

ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE



TEZE K DISERTAČNÍ PRÁCI

České vysoké učení technické v Praze
Fakulta biomedicínského inženýrství
Katedra zdravotnických oborů a ochrany obyvatelstva

Ing. Martin Staněk

**MOŽNOSTI MODELACE ROZPTYLU A ŠÍŘENÍ TĚŽKÉHO
PLYNU V RÁMCI CHEMICKÝCH HAVÁRIÍ**

**Possibilities of Modeling the Dispersion and Spread of Heavy
Gas in Chemical Accidents**

Doktorský studijní program: Ochrana obyvatelstva
Studijní obor: Civilní nouzová připravenost

Teze disertace k získání akademického titulu "doktor", ve zkratce
"Ph.D."

Kladno, září 2022

Disertační práce byla vypracována v prezenční formě doktorského studia na Katedře zdravotnických oborů a ochrany obyvatelstva Fakulty biomedicínského inženýrství ČVUT v Praze.

Uchazeč: Ing. Martin Staněk

Katedra zdravotnických oborů a ochrany obyvatelstva
Fakulta biomedicínského inženýrství, ČVUT v Praze
nám. Sítná 3105, 272 01 Kladno

Školitel: doc. Mgr. Zdeněk Hon, Ph.D.

Katedra zdravotnických oborů a ochrany obyvatelstva
Fakulta biomedicínského inženýrství, ČVUT v Praze
nám. Sítná 3105, 272 01 Kladno

Školitel-specialista:

doc. RNDr. Mgr. Petr Adolf Skřehot, Ph.D., MSc.
Znalecký ústav bezpečnosti a ochrany zdraví, z.ú.
Raichlova 2659/2, 155 00 Praha 5 – Stodůlky

Oponenti:

.....
.....
.....

Teze byly rozeslány dne:

Obhajoba disertace se koná dne v hod.
před komisí pro obhajobu disertační práce ve studijním oboru Civilní
nouzová připravenost v místnosti č Fakulty biomedicínského
inženýrství ČVUT v Praze.

S disertací je možno se seznámit na děkanátu Fakulty
biomedicínského inženýrství ČVUT v Praze, na oddělení pro vědu,
výzkum a zahraniční styky, nám. Sítná 3105 272 01 Kladno 2.

.....
předseda komise pro obhajobu disertační práce
ve studijním oboru
Civilní nouzová připravenost
Fakulta biomedicínského inženýrství ČVUT,
nám. Sítná 3105, 272 01 Kladno 2

1. SOUČASNÝ STAV PROBLEMATIKY

V novodobé historii jsou celosvětově používány tisíce chemických látek a směsí k nejrůznějším účelům. Od každodenní lidské potřeby, například ve formě hygienických přípravků, přes deratizační prostředky, výrobu plastů, až po využití na hokejových stadionech nebo k úpravě pitné vody. K těmto účelům a pokrytí poptávky po chemických látkách, směsích a jejich produktech je především ve vyspělých zemích značně rozvinutý chemický průmysl a v asijských a rozvojových zemích dochází k jeho výraznému nárůstu v posledních letech. Riziko chemických havárií je v rámci tohoto průmyslu zcela reálné a dopady mohou být vzhledem k charakteristice uniklých látek a jejich nebezpečným vlastnostem velmi závažné. Chemický průmysl může představovat významný zdroj ohrožení pro člověka, zvířata a životní prostředí. Chemické havárie mohou mít řadu příčin. Jedná se především o technologické, výrobní, procesní a jiné příčiny, které jsou převážně technického charakteru. Nezanedbatelnou příčinu rovněž představuje lidský faktor. Jedná se zejména o neúmyslné zavinění havárie, například nedodržováním bezpečnostních předpisů či při neodborném technickém zásahu v rámci takzvaného „outsourcingu“. Lze uvažovat i o jejím cíleném zapříčinění, například ve formě teroristického útoku na chemické zařízení, zásobníky s chemickými látkami, nebo přepravní cisterny a jiné. Chemické látky byly historicky využívány i ve formě bojových otravných látek a v novodobé historii se lze setkat s užitím dostupných průmyslových chemikálií k tomuto účelu. Případně lze uvažovat chemická zařízení jakožto sekundární chemickou zbraň při zapříčinění úniku nebezpečných látek konvenčními prostředky. Obzvláště nebezpečné jsou chemické havárie, které mohou vzniknout v rozsáhlých aglomeracích nebo v jejich blízkosti z důvodu přítomnosti velkého počtu osob a vzhledem k charakteristice a nebezpečným vlastnostem uniklých látek.

Únik těchto látek nemusí vzniknout pouze ze stacionárních zdrojů, které představují zejména chemické podniky, sklady či zařízení, která chemické látky skladují a používají ke své činnosti, ale i z mobilních zdrojů, například automobilové či železniční cisterny převážející nebezpečné chemické látky a směsi. Jako příklad lze uvést řadu historicky významných a rozsáhlých chemických havárií s únikem nebezpečných látek. Například únik cyklohexanu s následným výbuchem ve Flixborough (Velká Británie, 1974), únik dioxinu v Sevesu (Itálie, 1976), nehoda automobilové cisterny s únikem bezvodého amoniaku v Houstonu (USA, 1976), únik methylisokianátu v Bhópálu (Indie, 1984), únik amoniaku v Jonově (Litva 1989), únik chloru v rámci železniční přepravy ve městech Festus (USA, 2002) a Graniteville (USA, 2005) a řadu dalších.

Významné historické havárie měly dopady nejenom lokálního charakteru na místní obyvatelstvo a životní prostředí, ale i celosvětového na celkovou bezpečnost chemického průmyslu a nutnost stanovení důkladnějších bezpečnostních předpisů a postupů. Rovněž se neustále zvyšují požadavky v oblasti chemické bezpečnosti, havarijního plánování a přípravy na řešení chemických havárií, včetně zajištění adekvátní ochrany obyvatelstva a odezvy záchranných složek. Důležitým aspektem v této oblasti je zejména prevence a snaha haváriím předcházet, minimalizovat riziko potenciálního úniku nebezpečných látek či dalších jejich havarijních projevů. V neposlední řadě je důležité důkladně znát ohrožení, která tyto mimořádné události představují a zabývat se i charakteristikou šíření nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkých plynů v prostředí. V podmínkách České republiky je havarijní připravenost realizována v souladu s direktivou Evropské unie SEVESO III prostřednictvím zákona č. 224/2015 Sb., o prevenci závažných havárií způsobených vybranými nebezpečnými chemickými látkami nebo chemickými směsmi a o změně zákona č. 634/2004 Sb., o správních poplatcích, ve znění pozdějších předpisů,

(zákon o prevenci závažných havárií), a doplňujícími právními předpisy.

S rozvojem výpočetních technologií a zvyšujícími se nároky na bezpečnost chemického průmyslu se v dnešní době využívají modelační softwarové nástroje k predikci možných dopadů potenciačních úniků nebezpečných chemických látek a směsí v rámci analýz rizik. Výsledné modelace lze využít i pro účely chemické bezpečnosti při stanovení a optimalizaci zón havarijního plánování. Tyto nástroje se v souladu s tímto trendem soustavně vyvíjejí, především v oblasti zlepšení přesnosti samotných modelací a zkvalitnění matematických modelů, dle kterých je vypočítán dosah působení určené látky při jejím úniku. V dnešní době je také kladen důraz na zkvalitnění výsledků modelací ve specifických podmínkách, například v členitém terénu či městských zástavbách. Specifické podmínky rovněž představují situace při nedostatku vstupních dat a řadě neznámých parametrů, které v průběhu samotného řešení úniku nebezpečných látek a směsí nemusí být pro provedení prvotní modelace vždy k dispozici.

2. CÍLE DISERTAČNÍ PRÁCE

Cílem práce a realizovaného výzkumu je při terénních experimentech a za pomoci vybraného stopovače ověřit chování těžkého plynu v případě jeho úniku z technologického zařízení. Jsou analyzovány časové změny v průběhu rozptylu oblaku a měřeny jeho charakteristiky (dosahy zraňujících koncentrací, distribuce v prostoru apod.). Na základě výsledků experimentů jsou navržena organizační a bezpečnostní opatření (ochranného, záchranného a likvidačních charakteru), která přispějí ke zvýšení připravenosti složek IZS a ke snížení ohrožení obyvatelstva a životního prostředí v případě chemické havárie spojené s únikem těžkého plynu.

Práce si rovněž klade za cíl vymezit problematiku chemické bezpečnosti a chemických havárií s bližším zaměřením na oblast těžkých plynů a možnosti softwarové modelace jejich šíření v prostředí za reálných podmínek. Dále bude představeno realizované experimentální šetření v rámci projektu DEGAS, jehož výsledky budou následně v práci prezentovány a výstupy využity k naplnění vytyčených cílů. K tomuto účelu jsou stanoveny čtyři dílčí cíle práce a tři hypotézy.

Dílčí cíle práce:

1. Vymezení problematiky chemické bezpečnosti a chemických havárií, včetně popisu nebezpečnosti chemických látek a směsí, jejich možných havarijních projevů při úniku a definice těžkého plynu s vymezením způsobu jeho šíření v prostředí.
2. Analyzování možností modelace úniku chemických látek a šíření těžkých plynů pomocí vybraných softwarových nástrojů, možných přístupů, matematických modelů, vymezení vstupních dat modelací i faktorů ovlivňujících šíření těžkých plynů v prostředí a výsledky modelací.

3. Experimentální ověření a analýza chování, rozptylu a šíření těžkého plynu za použití vybraného stopovače při terénních experimentech simulujících únik látky z technologického zařízení v rámci validace a verifikace výstupů projektu DEGAS.
4. Analýza validity výsledků modelací úniku nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkého plynu na základě výsledků komparativních modelací modulu DEGAS, modelu Heavy Gas softwarového nástroje ALOHA a porovnání výsledků s reálnými podmínkami vybraných chemických havárií. Na základě výsledků analýzy stanovení možností a způsobů využití modelací v rámci chemické bezpečnosti, ochrany obyvatelstva a řešení chemických havárií složkami IZS.

Hypotézy:

Hypotéza 1: Výsledky terénního experimentu ověřujícího chování, šíření a rozptyl těžkého plynu v atmosféře se shodují s výsledky modelace tohoto experimentu prostřednictvím modulu DEGAS.

Hypotéza 2: Výsledky modelace vybraných chemických havárií prostřednictvím modulu DEGAS se neliší o více jak 10 % při komparaci s výsledky modelu Heavy Gas softwarového nástroje ALOHA.

Hypotéza 3: Výsledky modelace šíření a rozptylu těžkého plynu v atmosféře prostřednictvím modulu DEGAS a modelu Heavy Gas softwarového nástroje ALOHA věrohodně odpovídají reálným podmínkám analyzovaných chemických havárií.

3. METODY ZPRACOVÁNÍ

Při zpracování disertační práce byly analyzovány literární zdroje různého charakteru, především z Wiley Online Library, Web of Science a Scopus, a to zejména k tvorbě rešeršní a popisné části práce. Analyzována byla oblast chemické bezpečnosti a chemických havárií, téma těžkého plynu, modelování následků chemických havárií pomocí softwarových nástrojů a rovněž aktuálních právních předpisů ČR a EU. Dále byly analyzovány významné dokumenty nelegislativního charakteru definující a popisující oblast chemické bezpečnosti a prevence závažných havárií. V oblasti chemických havárií a jejich analýzy bylo vycházeno z odborné literatury a vědeckých článků, ale i ze studia vyšetřovacích zpráv havárií a databází chemických havárií, kterými jsou zejména francouzská databáze ARIA, evropský systém a databáze eMARS a americká databáze CSB. Zjištěné poznatky byly interpretovány a shrnuty v části práce uvádějící přehled současného stavu. V oblasti modelace následků chemických havárií byla pozornost věnována zejména problematice těžkých plynů a analýze možností modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí a jejich šíření v atmosféře. Tato část vycházela mimo výše uvedených zdrojů i z popisu, dostupné dokumentace a samotné práce s vybranými softwarovými nástroji, přičemž byla širší pozornost věnována nástrojům TerEx a ALOHA z důvodu jejich následného využití ve výzkumné části práce.

Při tvorbě praktické a výzkumné části práce byly použity vědecké metody experimentálního a aplikovaného výzkumu, terénních měření, modelování a observace v oblasti ověření chování těžkého plynu v prostředí za pomoci vybraného stopovače těžkého plynu. Tyto experimenty byly realizovány v rámci řešení projektu TH01031098 „Validace a verifikace modelu šíření a disperze těžkého plynu za specifických situací (DEGAS)“, na který je disertační práce navázána. K verifikaci a validaci výsledků a výstupů tohoto projektu bylo použito metody komparativních modelací šíření těžkého plynu

pomocí modelačních softwarových nástrojů a jejich vzájemné zhodnocení. Hlavním výstupem projektu bylo vytvoření modulu DEGAS určeného k modelaci šíření a disperze těžkých plynů v atmosféře jakožto součást modelačního softwarového nástroje TerEx. Tento modul byl dále využit k tvorbě komparativních modelací dle podmínek vybraných chemických havárií, jejichž výsledky byly komparovány s reálnými podmínkami havárií a s výsledky modelací softwarového nástroje ALOHA, který byl v této oblasti použit jako referenční.

Experimentální šetření a terénní experimenty projektu DEGAS

Projekt DEGAS byl řešen v letech 2015 až 2018 a byl realizován za vzájemné spolupráce společnosti T-SOFT a.s., ČVUT v Praze, Fakulty biomedicínského inženýrství, společnosti ERGOWORK s.r.o. a ÚJV Řež, a.s. Vytvořený modul DEGAS je určený pro predikci dosahu nebezpečných koncentrací plyných látek a disperzí těžších vzduchu, jejichž únik představuje především v aglomeracích a hustě obydlených oblastech významné riziko. Využití tohoto modulu je možné nejen v oblasti tvorby a aktualizace bezpečnostní dokumentace, ale i v rámci analýzy chemických havárií, výcviku a edukace odborných pracovníků v oblasti chemické bezpečnosti. Za určitých podmínek může tento modul sloužit jako analytický nástroj složkám IZS či orgánům krizového řízení. Na základě výsledků modelací lze navrhnout opatření ochrany obyvatelstva v potencionálně zasažené oblasti a stanovovat bezpečnostní opatření různého charakteru s účelem snížení ohrožení obyvatelstva i životního prostředí v případě chemické havárie s únikem nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkého plynu.

V rámci samotného projektu bylo realizováno několik etap, které se zabývaly výzkumem dané problematiky, návrhem řešení matematického modelu, který byl následně použit při tvorbě modulu DEGAS a ověření chování těžkého plynu při terénních

experimentech. Tyto experimenty byly rovněž použity jako podklad při doladění zvoleného matematického modelu a pro validaci výsledků vytvořeného modulu. Tato disertační práce byla zaměřena především na sekci terénních experimentů a následné validace výsledků modulu DEGAS. Disertační práce na řešený projekt dále nezávisle navazuje a zabývá se výzkumem validity modelací úniku chemických látek, směsí a šíření těžkých plynů v atmosféře v obecné rovině. K tomuto účelu byly analyzovány tři vybrané chemické havárie, jejichž podmínky a dopady byly modelovány prostřednictvím modulu DEGAS a referenčně softwarovým nástrojem ALOHA.

V rámci projektu DEGAS byly uskutečněny dva terénní experimenty. Jejich účelem bylo za pomoci vybraného stopovače, v tomto případě oxidu uhličitého (CAS 124-38-9), ověřit chování těžkého plynu při úniku z technologického zařízení. Tento plyn byl zvolen na základě jeho nízké úrovně toxicity, vysoké dostupnosti, možnosti relativně bezpečného vypuštění z tlakového zásobníku a možnosti snadné detekce. Oxid uhličitý kvůli svým fyzikálně chemickým vlastnostem rovněž vytváří za běžných podmínek při úniku z tlakové nádoby oblaka těžkého plynu, která lze v koncentraci přesahující 10 000 ppm viditelně pozorovat [1, 2]. Při experimentech byly analyzovány časové změny v průběhu rozptýlu oblaku a za pomoci detekčních přístrojů měřeny jeho charakteristiky, dosahy zraňujících koncentrací, distribuce v prostoru a další. Oba terénní experimenty byly realizovány ve spolupráci s AČR, konkrétně se 151. ženijním praporem 15. ženijního pluku AČR. Tento útvar poskytl pro potřeby experimentů polygon vojenského letiště ve vojenském prostoru u Bechyně a doplňující personál v podobě družstva vojenských hasičů, meteorologů a elektrocentrálu s obsluhou.

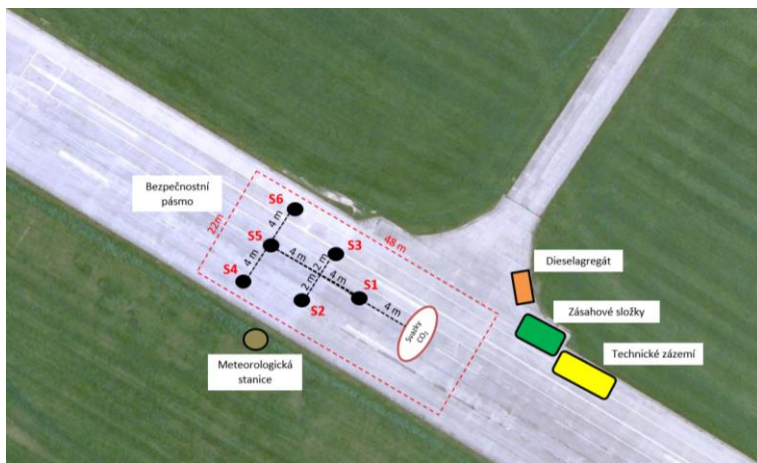
V případě obou experimentů probíhaly v rozmezí dvou dnů před samotným experimentem komplexní přípravy spočívající ve vymezení testovací oblasti, umístění zdroje stopovače na pozici,

nácviku rozmístění a zprovoznění detekčních přístrojů, jejich kalibrace a v dalších nezbytných činnostech, aby byl zajištěn bezproblémový a bezpečný průběh experimentů. Bezpečnost obou experimentů byla zajištěna zejména vhodným dispozičním nastavením experimentů, kdy bylo veškeré zázemí situováno za zdroj úniku stopovače v dostatečné vzdálenosti a samotný experiment byl orientován po směru větru. Přibližný dosah nebezpečné koncentrace použitého stopovače byl odhadnut na základě obecného předpokladu šíření látky a na základě vytvoření orientační modelace prostřednictvím softwarového nástroje ALOHA. Testovací oblast byla po dobu experimentů viditelně označena a byl zde nařízen zákaz vstupu. Pro zajištění bezpečnosti v oblasti zázemí a místa, odkud probíhala observace experimentu, byl použit dodatečný detekční přístroj pro měření kontinuální koncentrace oxidu uhličitého. Při ani jednom z experimentů nebylo v tomto prostoru dosaženo koncentrace látky 1 000 ppm, která je označována za hraniční koncentraci, od které lze pociťovat první příznaky intoxikace. Před samotnými experimenty rovněž proběhlo pro zúčastněné osoby školení BOZP.

První experimentální šetření bylo realizováno dne 26. října 2016 a jednalo se ověřovací experiment, na základě kterého měla být zejména ověřena a doladěna metodika před druhým, ostrým experimentem. V rámci provedeného terénního experimentu byly jako zdroj oxidu uhličitého zvoleny tlakové lahve v počtu 60 kusů dodané společností Air Liquide a.s., které byly umístěny v pěti svazcích po dvanácti lahvích s celkovým objemem 2 250 kilogramů zkapalněného plynu. Jednotlivé lahve ve svazku byly svedeny do jedné společné výpustě o průměru přibližně 2 cm. Svazky byly umístěny vedle sebe do mírného oblouku, aby byl plyn vypouštěn přibližně do stejného prostoru, ve kterém se nacházel první detekční přístroj. Při experimentu byly svazky otevírány manuálně výpustními ventily postupně v krátkém časovém intervalu. Celý experiment byl zaznamenáván audiovizuálním systémem, včetně dvou termokamer a dronu s kamerou. Pro nastavení záznamových zařízení

byla před zahájením experimentu provedena zkouška a vizualizace šíření látky pomocí zkušebních dýmovnic. Koncentrace plynu byla měřena prostřednictvím série detektorů (Lutron, typ CO2-9904SD), které odečítaly data v intervalu dvou vteřin. Konkrétně bylo použito šest detekčních přístrojů umístěných do stromové formace, viz obrázek 1. Detektory byly umístěny v podélné a příčné ose ve směru unikajícího plynu od zdroje úniku s definovanými rozestupy v řádu několika metrů. Jedná se o detektory s infračervenými senzory fungujícími na principu NDIR. Udávané detekční rozmezí přístrojů je 0 až 6 000 ppm, nicméně dle výrobce umožňují přístroje měřit až koncentraci o hodnotě přibližně 10 000 ppm, než dojde k přehlcení senzoru. Rozlišovací schopnost detektorů je 1 ppm. Přístroje umožňují také zaznamenávat relativní vlhkost vzduchu (rozmezí 10 až 95 %), teplotu (rozmezí 0 až 50 °C), jsou vybaveny alarmem při překročení nastavené koncentrace látky a umožňují zaznamenávat naměřená data na SD kartu až po dobu 8 hodin [3]. Na závěr terénního experimentu byla provedena vizualizace proudění vzduchu v daných podmínkách a šíření dýmového oblaku v prostředí, který měl simulovat šíření podstatně většího oblaku plynu, který byl předpokládán při druhém experimentu.

Hlavním cílem prvního šetření bylo především ověření a doladění metodiky experimentu před provedením druhého, hlavního experimentu a získání praktických zkušeností řešitelského týmu s procesem a podmínkami experimentu. Cíle prvního experimentu byly konkrétně zaměřeny na ověření vhodnosti a spolehlivosti zvoleného stopovače k experimentálním účelům, včetně vhodnosti a kvality jeho detekce pomocí zvoleného typu detekčních přístrojů. Dále byly prověřeny možnosti dodání chemických látek, zajištění veškeré logistiky, spolupráce s dotčeným útvarům AČR a byly taktéž prověřovány dílčí náležitosti technického charakteru k záznamu experimentu. V rámci testovací plochy byly zkoumány její dispoziční možnosti, nevhodnější rozestavení a orientace experimentu.



Obrázek 1: Situační schéma prvního, ověřovacího experimentu [1]

Na základě výsledků prvního experimentu byla doladěna metodika a ověřeny sledované cíle, jež přispěly k důkladné přípravě druhého terénního experimentu. Tento experiment spočíval v provedení validačních testů a verifikaci navrženého matematického modelu šíření a disperze těžkých plynů v rámci projektu DEGAS. Námětem experimentu byla nehoda cisterny převážející stlačenou chemickou látku s jejím následným únikem prostřednictvím omezeného otvoru představující poškození pláště cisterny. Samotný experiment byl realizován dne 12. dubna 2017. Při tomto experimentu byl zvolen totožný stopovač, nicméně byl v tomto případě jako zdroj úniku použit horizontální cylindrický tlakový zásobník na ocelovém rámu o objemu 6 tun zkapalněného plynu o tlaku 18 barů při naplnění. Chemický zásobník a zvolený plyn dodala společnost Linde Gas a.s. Na výpusť zásobníku byla aretována kovová trubka s ventilem o délce 1 m s průměrem 4 cm, jejíž ústí bylo přibližně 1 m nad zemí. Tato trubka sloužila jako výpusť a zdroj šíření plynu při experimentu. Veškeré nastavení zásobníku a instalace výpustě byla provedena techniky společnosti Linde Gas a.s. Zásobník byl manuálně otevřen

pomocí pákového mechanismu adekvátně bezpečnostně vybavenými příslušenstvími hasičské jednotky AČR. Celý experiment byl zaznamenán audiovizuálním systémem, třemi kamerami a dronem s kamerou. Termokamery již použity nebyly. Koncentrace plynu byla měřena pomocí série detektorů a jejich počet byl adekvátně navýšen oproti prvnímu experimentu na 14. Detektory byly rozmístěny v rozšířené stromové formaci, viz obrázek 2. Detektory byly umístěny v podélné a příčné ose ve směru unikajícího plynu od zdroje úniku s definovanými rozestupy v řádu desítek metrů, jelikož byl při tomto experimentu předpoklad tvorby podstatně většího oblaku těžkého plynu než při prvním experimentu. Z tohoto důvodu bylo vhodné využití většího počtu detektorů k pokrytí adekvátní oblasti. Pro měření byly znovu použity detektory Lutron, typ CO2-9904SD v počtu 13 kusů a jeden detektor Lutron MCH-383SD s detekčním rozsahem 0 až 4 000 ppm, přičemž ostatní funkcionalita je obdobná prvnímu typu [4]. Nastavený čas odečtu hodnot byl 2 vteřiny a data byla ukládána v každém přístroji na SD kartu. Pro měření charakteristiky tvořícího se aerosolu v oblaku těžkého plynu, který vzniká v důsledku Joule-Thomsonova jevu, bylo použito přístroje Grimm NanoCheck 1365, který obsahuje laserový fotometr Grimm 1.109 a čítač nanočástic NanoCheck-1320 (NC), jež funguje na principu colorimetrie s měřicím rozsahem 0,25 až 32 μm [5]. Cíle druhého experimentálního šetření spočívaly zejména v realizaci hlavního experimentu, jeho komplexním zabezpečení a simulaci průběhu nehody s únikem chemické látky v plynné formě. Dále v provedení samotných měření a jejich záznamu pomocí detekčních přístrojů, zajištění přípravy dat k následnému vyhodnocení a doladění modulu DEGAS.

Jedním z výstupů experimentálního šetření bylo doladění výpočtů v rámci modulu DEGAS. V další fázi byly provedeny modelace samotného experimentu prostřednictvím modulu DEGAS a modelu Heavy Gas softwarového nástroje ALOHA, který byl v tomto případě použit jako referenční z důvodu jeho dostupnosti, vysoké míře použití

v praxi a jelikož se jedná o vysoce uznávaný nástroj v oblasti chemické bezpečnosti. Vytvořené modelace a jejich výsledky, dosah látky v určité koncentraci a vypočtená koncentrace ve stanoveném bodě v definované vzdálenosti od zdroje úniku byly následně komparovány navzájem a také s hodnotami, které byly při terénním experimentu naměřeny a predikovány. Naměřené hodnoty jsou však zatíženy chybou měření v důsledku použité fyzikální metody v úrovni přibližně 10 %. Tyto hodnoty byly posléze vizualizovány na mapovém podkladu v sérii obrázků, které znázorňují vývoj naměřené koncentrace látky prostoru a v čase. Výsledná data byla následně korigována a upravena na základě série modelací, aby bylo možné vytvořit realistický odhad koncentrace, která se v prostoru mohla vyskytovat. Výsledné hodnoty byly použity při komparaci výsledků modelací s reálnými podmínkami experimentu a umožnily validovat a verifikovat výstupy projektu DEGAS.



Obrázek 2: Situční schéma druhého, ostrého experimentu [1]

Modelování úniku a šíření těžkých plynů a komparativní modelace prostřednictvím vybraných modelačních softwarových nástrojů

Pro účely disertační práce byly použity softwarové modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí a jejich šíření ve formě těžkých plynů v atmosféře. Vzhledem k provedenému výzkumu byly modelace zaměřeny výhradně na problematiku modelace úniku toxické látky v plynném skupenství při formování těžkého plynu. Modelace byly blíže zaměřeny na výpočet a predikci šíření těžkého plynu v prostředí, přičemž byly sledovány zejména koncentrace látky v prostoru, její vztah ke vzdálenosti od zdroje úniku a dosah zraňujících koncentrací. K vyhodnocení tohoto dosahu bylo využito koncentrací IDLH a AEGL 2 a 3. Hodnota AEGL 1 nebyla zvolena z důvodu její nízké úrovně oproti ostatním hodnotám AEGL a při jejím vykreslení se může projevit omezení maximální vzdálenosti výpočtu jednotlivých modelačních nástrojů. Pro modelaci byly zvoleny softwarové nástroje TerEx a ALOHA. TerEx byl zvolen z důvodu zaměření disertační práce a aplikovaného výzkumu, jelikož hlavním výstupem projektu DEGAS bylo vytvoření modulu DEGAS určeného pro modelaci šíření a rozptylu těžkého plynu. Pro modelace byl tedy použit výhradně modul DEGAS. Softwarový nástroj ALOHA byl zvolen z důvodu jeho všeobecné rozšířenosti a rozsáhlého využití v rámci chemické bezpečnosti u nás i ve světě, přičemž v současné době platí za neformální standard v této oblasti. Pro tvorbu modelací tímto softwarovým nástrojem bylo použito výhradně modelu Heavy Gas, který je shodně určen pro modelaci šíření a rozptylu těžkého plynu v atmosféře. Výsledky modelací a vypočtené zóny byly následně zaneseny na mapové podklady. Pro vizualizaci výsledků softwarového nástroje TerEx byl využit jeho integrální modul umožňující tuto funkcionalitu, který používá mapové podklady OpenStreetMap. Pro vizualizaci výsledků softwarového nástroje ALOHA byl použit sekundární softwarový nástroj s funkcionalitou GIS, nástroj MARPLOT, který je určen k vizualizaci výsledků

modelací a dalších informací z balíčku softwarových nástrojů CAMEO Software Suite, jehož je ALOHA součástí. Použitými mapovými podklady jsou v tomto případě Google Maps.

Předmětem modelací byly podmínky a dopady vybraných chemických havárií, které posloužily jako zdroj vstupních údajů. Chemické havárie byly vybrány z databází chemických havárií ARIA a CSB. Studovány byly rovněž vyšetřovací zprávy vybraných havárií, které byly dostupné a relevantní pro výzkum. Kritériem výběru havárií byla nezbytnost havárie s únikem chemické látky v plynné fázi a její šíření ve formě těžkého plynu ve vnějším prostředí. Dále musely být dohledatelné nezbytné vstupní údaje pro vytvoření samotných modelací. Posledním kritériem bylo uvedení vyhodnocení události v jejím popisu či vyšetřovací zprávě, buď přímo uvedení velikosti zasažené oblasti, potažmo vzdálenosti, ve které byl unikající plyn detekován, nebo poskytnutí dostatečně kvalitních údajů, ze kterých bylo možné odvodit dosah látky v určité koncentraci. Celkem byly tímto způsobem vybrány tři chemické havárie různého charakteru, které tvoří reprezentativní vzorek pro provedení komparace výsledků modelací a stanovení jejich validity.

Vstupní údaje modelací jsou v některých bodech rozdílné, jelikož každý softwarový nástroj používá odlišný matematický model. U nástroje ALOHA je při zvolení modelu Heavy Gas umožněno modelovat čtyři typy úniku. Jedná se o přímý únik, který je jednorázového nebo kontinuálního charakteru, odparu látky z kaluže, únik ze zásobníku nebo únik z produktovodu. Modul DEGAS na druhou stranu umožňuje modelaci jednorázového úniku, horizontálního nebo vertikálního úniku ze zásobníku typu JET a odpar látky z kaluže. Nástroj ALOHA umožňuje modelaci přímého úniku látky dle zadání rychlosti a doby trvání úniku, potažmo objemu uniklé látky. Sekundárně umožňuje modelaci úniku, při kterém je zdrojem zásobník o definovaných parametrech. Proces modelace se zadáním velikosti a naplněnosti zásobníku ovšem slouží k výpočtu rychlosti

a doby trvání úniku látky ze zásobníku. Pro komparativní modelace byla v nástroji ALOHA zvolena metoda s přímým jednorázovým nebo kontinuálním únikem látky ze zařízení. Nicméně ALOHA neumožňuje počítat s variací vertikálního úniku a pracuje pouze s únikem v horizontální ose.

Přetlak látky uvnitř skladovacího zařízení byl zjišťován buď z dostupných informací o haváriích, nebo byl vyčten z tabulek prezentujících závislost teploty a tlaku různých látek dostupných například z webu Gas Encyclopedia Air Liquide, které prezentují minimální tlak látky při dané teplotě, kterého musí být dosaženo, aby byla látka zkvapalněna [6]. Výčet těchto hodnot může být zatížen určitou chybou, jelikož lze plynné látky zkvapalněné pomocí přetlaku skladovat i za větších tlaků, než je v tabulkách uvedeno. Meteorologické podmínky a jejich hodnoty použité při tvorbě modelací vycházely z vyšetřovacích zpráv havárií a z dostupných údajů online databází počasí. Dostupnost přesných dat může být zejména u událostí staršího data značně omezena a rovněž u událostí mladšího data nemusí být dostupná zcela přesná data. Měřicí stanice, ze které jsou data dostupná, nemusí být přímo v blízkosti místa události, ale pouze v daném regionu. Z tohoto důvodu je nezbytné vzít v potaz i jejich možnou nepřesnost a hodnoty mohou být oproti reálným podmínkám v místě události mírně odlišné. Měly by však vykazovat dostatečnou podobnost pro tvorbu směrodatných modelací.

Výsledky jednotlivých modelací nástrojů TerEx a ALOHA byly vzájemně komparovány, přičemž byly sledovány hodnoty vypočtené koncentrace látky a její dosah v prostoru. Pro vyhodnocení modelací úniku chemické látky a šíření těžkého plynu nabízí TerEx dvě možnosti. První představuje přednastavené hodnoty, kterými jsou koncentrace IDLH, AEGL nebo PAC dle volby nástroje. Celkově tento nástroj udává oblast pro provedení evakuace osob a oblast pro provedení chemického průzkumu. Uvedené koncentrace a jejich nastavení jsou ovšem fixní a nelze je měnit, aby bylo možné zjistit

detailnější informace o vývoji koncentrace látky v prostoru. K tomuto účelu slouží druhá možnost, generace grafu, který prezentuje vývoj koncentrace látky v závislosti na vzdálenosti od zdroje úniku. Tento graf představuje pro účely práce hlavní prostředek získání přesných údajů k provedení následné komparace. Používané jednotky tímto nástrojem jsou mg/m^3 , které jsou zcela validní, ale v zahraničních zdrojích se pracuje zejména s jednotkami ppm. Z tohoto důvodu je nezbytné provést konverzi používaných hodnot mezi uvedenými jednotkami, k čemuž je využito univerzálního převodníku, který kalkuluje při převodu jednotek s molekulovou hmotností látky.

Softwarový nástroj ALOHA je při vyhodnocení modelací variabilnější a nabízí účelnější funkcionalitu, jelikož umožňuje nejen zobrazení výsledků dle přednastavených hodnotících koncentrací, ale umožňuje i zadání vlastních hodnot. Standardně tento nástroj pracuje s hodnotami IDLH, AEGL, ERPG a PAC u výpočtu šíření a disperze těžkých plynů v prostředí. Zadáním vlastních hodnot lze do tohoto nástroje zanást přednastavené hodnoty z nástroje TerEx či například uvedené hodnotící koncentrace pro jinou dobu expozice než 60 minut, která je zde přednastavena. ALOHA pracuje při vyhodnocení modelací zejména na principu vykreslení zón kontaminace, případně vytvoření grafu vývoje koncentrace látky proti časové ose v konkrétním nastaveném bodě v zóně úniku. Neumožňuje tedy přímo vytvoření obdobného grafu jako nástroj TerEx, který by bylo možné přímo komparovat. Z tohoto důvodu byly při jednotlivých modelacích vybrány relevantní vzdálenosti od zdroje úniku, na kterých lze prezentovat vývoj vypočtené koncentrace látky v prostoru. Konkrétně se jedná o oblast blízkého pole do 100 m od zdroje úniku, oblast střední vzdálenosti do 200 m a oblast vzdáleného pole do 1 000 m a více. Tyto vzdálenosti byly následně zadány do nástroje ALOHA pro výpočet koncentrace látky v daném bodě nacházejícím se ve střední ose úniku. V nástroji TerEx byla koncentrace pro tyto body odečtena z vytvořeného grafu. Proces lze aplikovat i obráceným postupem pro zjištění, v jaké vzdálenosti

od zdroje úniku se bude nacházet určitá koncentrace látky. Dále byly na základě určených hodnotících koncentrací látky oběma nástroji komparovány vzdálenosti, do kterých byl vypočten dosah látky ve zvolené koncentraci, konkrétně koncentrace AEGL/PAC 2, 3 a hodnota IDLH. V rámci komparace výsledků modelací byl sledován rozdíl mezi výsledky modelací obou nástrojů, přičemž byla jako hranice významnosti rozdílu zvolena hodnota 10 %, která vychází z obecné statistiky a bývá používána pro označení statisticky vysoce významného rozdílu [7].

Výsledky modelací obou softwarových nástrojů byly následně podrobeny komparaci s reálnými dopady modelovaných havárií, přičemž byl sledován zejména dokumentovaný dosah látky v prostředí v zaznamenané nebo odvoditelné koncentraci. Predikci koncentrace látky v prostředí lze orientačně provést i na základě viditelnosti hustého oblaku těžkého plynu, který obecně značí koncentraci látky převyšující 10 000 ppm [1, 2]. Při komparacích bylo z kvalitativního pohledu sledováno, do jaké míry odpovídají výsledky modelací zvolených softwarových nástrojů a jejich matematických modelů reálným podmínkám vybraných havárií. Výsledky této části práce lze aplikovat při přibližném určení validity modelací šíření těžkých plynů v atmosféře při použití modulu DEGAS softwarového nástroje TerEx a modelu Heavy Gas nástroje ALOHA. Dále lze určit, který z nástrojů vykazuje vyšší přesnost modelací při porovnání s reálnými dopady vybraných chemických havárií. Na základě výsledků této kvalitativní analýzy limitovaného rozsahu a teoretického studia dané problematiky je možné obecně doporučit, k jakým účelům jsou softwarové modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkého plynu vhodné a jaký je jejich možný způsob využití. Tato část práce je tedy zaměřena na aplikovatelnost modelací chemických havárií s šířením těžkého plynu v atmosféře v rámci chemické bezpečnosti, ochrany obyvatelstva a možného využití složkami IZS.

4. VÝSLEDKY

Výsledky experimentálního šetření a terénních experimentů projektu DEGAS

První experimentální šetření bylo realizováno ve dnech 24. až 26. 10. 2016, přičemž samotný experiment byl realizován po několikadenních přípravách v poslední uvedené datum v dopoledních hodinách. Přípravy spočívaly v rekognoskaci testovací plochy, nácviku dispozičního postavení jednotlivých prvků a technických prostředků experimentu, včetně příprav a kalibrace detekčních přístrojů. Jako zdroj úniku zvoleného stopovače sloužilo pět svazků tlakových lahví v příslušném rozestavení po dvanácti tlakových lahvích s celkovým objemem 2 250 kg látky. V rámci příprav byly svazky lahví umístěny dle předem definované geometrie a proběhla zkušební vizualizace šíření plynu v prostředí, přičemž byla testována i vizuální záznamová zařízení. Jako vhodný plyn byl pro experimentální účely zvolen oxid uhličitý, který vykazuje základní požadované vlastnosti. Jedná se o plyn s nízkou mírou toxicity, respektive se jeho toxicita na člověka projevuje až při expozici vysokým koncentracím, v řádu jednotek tisíc ppm. Dále je z pohledu fyzikálních vlastností vhodný, jelikož je relativně snadno detekovatelný a měřitelný pomocí dostupných a cenově nenáročných detekčních přístrojů. Vzhledem k jeho molekulové hmotnosti se jedná o látku těžší vzduchu, přibližně 1,52krát, která je za standardních podmínek v plynném stavu o hustotě 1,87 mg/m³ při 15 °C. Tato látka je snadno zkapalnitelná pomocí tlaku a má tedy při úniku vlastnosti těžkého plynu. Při vyšších koncentracích vytváří okem viditelnou směs plynu a aerosolu, která umožňuje sledovat a zaznamenávat šíření oblaku těžkého plynu. Podstatná je i jeho dobrá dostupnost v ČR a možnost získání a využití pro vědecko-výzkumné účely.

Experiment byl naplánován na 26. 10. 2016 v přibližném čase 8:30 až 9:30 hod. V této době byl zahájen přípravami testovací

plochy, rozmístěním a zprovozněním detekčních přístrojů a zajištěním příslušného zázemí. Uvedený čas byl zvolen jako vhodný z pohledu predikce meteorologických podmínek na základě předchozího studia předpovědi meteorologické situace pro danou lokalitu z veřejně dostupných zdrojů a konzultací s pracovištěm meteorologické služby AČR. Veškeré činnosti probíhaly v souladu s časovým harmonogramem a stanovenou metodikou. Výpustě svazků tlakových lahví byly otevřeny v rychlém sledu v 9:17 hod a v iniciálních fázích byl patrný značný výron unikajícího plynu na testovací ploše, který se v souladu s kinetikou vypuštěné látky a panujícími meteorologickými podmínkami šířil ve směru rozmístěných detekčních přístrojů. Na základě vlastností látky a dynamiky úniku z tlakových zásobníků se jednalo o únik typu JET, kdy docházelo k okamžitému odparu látky ze zdroje a její šíření ve formě těžkého plynu tvořeného po určitou vzdálenost viditelnou směsí plynu a aerosolu. Samotný únik se v závislosti na snižování tlaku uvnitř tlakových lahvích zmenšoval a po 75 minutách, v 10:32 hod, byly všechny svazky manuálně uzavřeny. V rámci bezpečnosti byl experiment zakončen po dalších 10 minutách, aby proběhlo úplné odvětrání experimentálního prostoru a vstup do něj byl bezpečný. V průběhu experimentu a po jeho skončení bylo na tlakových lahvích patrné jejich výrazné zchlazení z důvodu uvolnění tlaku uvnitř a byla na nich vytvořena zhruba centimetrová námraza kondenzované vlhkosti vzduchu. Tento jev byl potvrzen i snímáním termokamerou, kdy dle měření dosahovala teplota lahví hodnot až přibližně $-15\text{ }^{\circ}\text{C}$. Na závěr experimentu byla provedena dodatečná vizualizace proudění vzduchu a plynu pomocí speciální pyrotechnické dýmové nálože. Panující meteorologické podmínky v době experimentu byly 8 až $9\text{ }^{\circ}\text{C}$, rychlost větru se pohybovala okolo 2 m/s, obloha byla zatažená a kvůli deštivému počasí v předchozích dnech byla zvýšená vlhkost vzduchu [1].

Na základě realizovaného experimentálního šetření lze konstatovat, že zvolená metodika se fundamentálně prokázala jako

vhodná a vyhovující s nezbytností drobných úprav a nastavení pro realizaci druhého experimentu. Koncepce sekundárního experimentu byla mírně odlišná od prvního, kdy bylo plánováno uskutečnění simulace úniku z automobilové cisterny z jednoho bodu. Zvolený stopovač se prokázal jako vyhovující. Při úniku dle předpokladů tvořil oblaka těžkého plynu, která byla ve vyšších koncentracích viditelná pouhým okem, a tudíž bylo možné šíření oblaku v blízkosti zdroje úniku vizuálně monitorovat a zaznamenávat. Svazky tlakových lahví byly pro prvotní experiment dostačující. Způsob a úroveň vypouštění plynu byla adekvátní a při samotném úniku nedošlo k žádným komplikacím, ucpání únikových otvorů zmrazky ani ke komplikacím jiného charakteru. Zvolené detekční přístroje se prokázaly jako vyhovující a všechny nepřetržitě fungovaly a zaznamenávaly koncentraci látky dle jejich možností a detekčního rozsahu po celou dobu experimentu. Udávaný detekční rozsah přístrojů, 5 000 až 6 000 ppm, byl experimentálně ověřen jako efektivně překročitelný až do úrovně, která přesahovala maximální koncentraci udávanou výrobcem, 10 000 ppm, o zhruba 10 %. První umístěný detekční přístroj v blízkosti zdroje úniku byl nad očekávání funkční po celou dobu experimentu a nedošlo u něho k sebemenšímu poškození. V lokalitě jeho umístění byla předpokládána koncentrace látky v řádu desítek tisíc ppm a bylo rovněž předpokládáno výraznější snížení teploty vzduchu z důvodu vzniku Joule-Thomsonova jevu při úniku látky, jež byl ze všech svazků směřován právě k tomuto detektoru. Nedostatkem a zásadním podnětem pro přípravu druhého experimentu byl nedostatečný počet detekčních přístrojů, které nebyly schopny obsáhnout celou plochu úniku látky. Viditelný oblak plynu byl v iniciálních fázích pozorovatelný až do vzdálenosti přibližně 25 m od zdroje úniku.

Pro možnost video záznamu a monitorace experimentu se prokázala jako nejvhodnější standardní digitální záznamová zařízení, která byla schopna zaznamenávat viditelnou fázi unikajícího plynu a celkový průběh experimentu. Jako vhodné a užitečné

se ukázalo použití dronu, který byl schopen průběh experimentu zaznamenávat z ptačí perspektivy i nestandardních úhlů, čímž dopomohl k získání unikátního nadhledu na dynamiku, tvorbu a šíření viditelné fáze oblaku těžkého plynu v prostředí. Jako nevhodné se prokázaly použité termokamery značky Flir systems, jelikož nebyly schopny detekovat a měřit teplotu tvořícího se oblaku těžkého plynu a umožňovaly pouze sledovat změnu teploty jednotlivých tlakových lahví. Vzhledem k dostupnosti termokamer a jejich potencionálním pořizovacím nákladům bylo od tohoto konceptu a jejich použití pro následující experiment upuštěno. Pro účely druhého experimentu byl počet kamer navýšen s cílem využít možnosti záznamu z různých úhlů a pozic, ve kterých lze předem nastavené kamery bez nutnosti lidské obsluhy umístit, a to v přiměřené vzdálenosti i na místa, která mohou být vystavena vyšším koncentracím unikajícího plynu. Vhodnost prostoru vojenského letiště Bechyně se prokázala jako dobrá a příslušný útvar AČR byl pro experimentální účely schopen vyčlenit celý prostor letiště, včetně zajištění požadované technické a personální spolupráce. Zvolené dispoziční uspořádání experimentu se rovněž prokázalo jako vyhovující a z pohledu bezpečnosti experimentu vhodné. Pro realizaci druhého bylo nezbytné vzhledem k jeho plánovanému rozsahu úměrně rozšířit vytyčenou testovací plochu, a to i s přihlédnutím k bezpečnosti experimentu.

Druhý experimentální šetření bylo realizováno ve dnech 10. až 12. 4. 2017. Jeho předmětem bylo provedení samotného „ostrého“ experimentu projektu DEGAS a příslušných měření. Lokalita byla totožná s prvním experimentem a celkový harmonogram byl obdobný. V prvních dnech probíhaly přípravné práce, celkový nácvik jednotlivých činností před uskutečněním hlavního experimentu a příprava časového plánu. Námětem pro druhý experiment byla nehoda automobilové cisterny převážející zkapalněný, stlačený plyn, který bude při havárii unikat skrze relativně malý otvor a při úniku bude vytvářet oblaka těžkého plynu šířící se v prostředí. Podstatou byl únik látky z horizontálního cylindrického zásobníku a monitorace její

následné disperze v atmosféře. Tento proces simuluje reálnou nehodu či provozní havárii s únikem těžkého plynu, kterou lze následně simulovat pomocí modelačních softwarových nástrojů. Samotný experiment také posloužil k doladění a verifikaci výsledků modelace pomocí modulu DEGAS a jeho matematického modelu, který vznikl jako výstup projektu a je součástí expertního softwarového nástroje TerEx.

V rámci přípravných prací proběhlo umístění zdroje úniku, pro který byl zvolen horizontální cylindrický tlakový zásobník o objemu 6 tun zkapalněného oxidu uhličitého, který byl použit jako stopovač pro následné měření. Tlak látky uvnitř zásobníku byl po jeho naplnění 18 bar. Zásobník byl vzhledem k předpovědi počasí a předpokládanému proudění větru umístěn opačným směrem než při předchozím experimentu. Samotné umístění zásobníku na testovací plochu, jeho naplnění kapalným oxidem uhličitým, nastavení techniky zásobníku, instalace výpusti a zaškolení obsluhy k otevření a uzavření zásobníku, proběhlo dne 11. 4. Dále byla vytyčena celá experimentální plocha a viditelně označena pro zajištění bezpečnosti experimentu. Součástí příprav byl rovněž nácvik práce s detekčními přístroji, jejich cvičné rozmístění a kalibrace. Na základě prvního experimentu byl počet detekčních přístrojů adekvátně rozšířen pro pokrytí měření na větší ploše a oblasti předpokládaného šíření těžkého plynu. Použité detekční přístroje byly stejného typu jako při prvním experimentu a byly doplněny o měřicí stanoviště pro měření charakteristiky tvořeného aerosolu v oblaku těžkého plynu. Zde byl rovněž umístěn dodatečný detekční přístroj jiného typu pro měření koncentrace oxidu uhličitého, viz metodika experimentu. Experiment byl zaznamenáván pomocí vhodně rozmístěných digitálních kamer a dronu. Celkem byly k záznamu experimentu použity tři kamery a uvedený dron s kamerou. Dále byla zajištěna plná spolupráce s dotčeným útvarem AČR, který zabezpečil dodávku elektrické energie pomocí mobilní elektrocentrály, meteorologické měření a pro zajištění dodatečné bezpečnosti rovněž hasičské družstvo. Uvedené

družstvo se dále podílelo na otevření a poté i uzavření ventilu výpustě zásobníku.

Na základě stanoveného harmonogramu bylo hlavní experimentální šetření projektu DEGAS uskutečněno 12. 4. 2017. Dle předchozího studia meteorologické předpovědi na uvedené datum byl čas experimentu z důvodu možných proměnných podmínek stanoven na dopoledne, přibližně mezi 9 a 11 hod, kdy mělo panovat ideální počasí pro jeho realizaci. Experimentální šetření bylo dle stanoveného harmonogramu a metodiky zahájeno v ranních hodinách přípravami, rozmístěním a zprovozněním detekčních přístrojů, video záznamových zařízení a zajištěním elektrické energie pomocí mobilního agregátu. Dále byl připraven prostor zázemí, kde byl rovněž z důvodu monitorace situace a bezpečnosti umístěn jeden detekční přístroj, který nebyl součástí realizovaných měření. Na základě vydání pokynu byl experiment zahájen v 9:34 hod otevřením příslušného ventilu připravené výpustě zásobníku. Tento úkon provedli příslušníci hasičské jednotky AČR, kteří byli vybaveni příslušnými ochrannými prostředky. Samotný test trval 16 minut, kdy po uplynutí této doby došlo k vyčerpání kapalné fáze látky a poklesu tlaku uvnitř zásobníku. Oblak plynu byl viditelný do vzdálenosti nejméně 80 metrů, v iniciální fázi experimentu až zhruba do 150 metrů. Po uvedené době došlo k manuálnímu uzavření zásobníku. Při tomto experimentu panovaly ideální meteorologické podmínky k jeho provedení, nízká teplota v rozmezí 7 až 9 °C, bez srážek, téměř bezvětří a oblačno. Vlhkost vzduchu byla v rozmezí 58 až 93 %, rychlost větru v nadzemní vrstvě do 1 m/s ve směru orientace experimentu a třída stability atmosféry dle Pasquill-Giffordovy-Turnerovy typizace D [1].

V rámci vyhodnocení druhého terénního šetření a stanovených cílů lze konstatovat, že experiment dopadl úspěšně a jednotlivé cíle byly splněny. Simulace nehody automobilové cisterny proběhla bez komplikací. Dle očekávání vytvářel unikající plyn oblaka těžkého

plynu, která se ve vyšších koncentracích a ve viditelné fázi šířila v očekávané zóně, kde byly rozmístěny detekční přístroje v metodicky určeném schématu. Detailně byly zaznamenány zejména hodnoty koncentrace šířící se látky v čase a prostoru. Kontinuálně byly také zaznamenávány přesné meteorologické podmínky na testovací ploše poblíž zdroje úniku prostřednictvím meteorostanice AČR. Tyto hodnoty byly následně využity k vytvoření modelací daného experimentu pomocí vybraných modelačních softwarových nástrojů, přičemž byla použita reálná a přesná data.

Na základě jednotlivých měření a jejich následném vyhodnocení byla vytvořena série map vyobrazující šíření látky v čase a prostoru. Tyto mapy ovšem z technických důvodů neukazují přesné hodnoty koncentrace látky v prostředí. Nedostatky byly dány typem použitých detekčních přístrojů, měřící metodou a dynamikou šíření těžkého plynu v experimentálním prostředí. Hlavním nedostatkem byl detekční rozsah použitých přístrojů, který byl 10 000 ppm. Reálně je tento rozsah o něco vyšší, ale výrazně se snižuje přesnost měření. Dle použitého typu detekční metody NIDR dochází při překročení detekční hranice k přehlcení senzoru znemožňující měření vyšších koncentrací, ale měření probíhají nadále. Celková odhadovaná nepřesnost měření při experimentu byla 10 %. Z pohledu účelu experimentu se jedná o akceptovatelnou hodnotu, jelikož je výrazně nižší než odhadovaná přesnost softwarových modelací daného jevu [1]. Z map je rovněž patrná dynamika šíření těžkého plynu v atmosféře. Při tomto procesu se uplatňuje do určité vzdálenosti od zdroje úniku aktivní šíření látky z důvodu její kinetické energie vzniklé při uvolnění látky a poklesu jejího tlaku. Dále se látka šíří v menších shlucích podléhajících turbulentním jevům, které tvoří celkový oblak těžkého plynu a v procesu šíření se vyskytují fluktuace koncentrace látky v čase a prostoru. Na tento proces mají taktéž zásadní vliv panující meteorologické podmínky. Podstatnou roli zde má i pokles tlaku uvnitř zásobníku v průběhu času, který způsobuje postupné omezení úniku. Obecně se jedná o jevy, které jsou z pohledu

softwarových modelací šíření těžkých plynů v prostředí složitě řešitelné a jedná se o jeden z jejich nedostatků.

Z provedených observací a znalosti způsobu šíření těžkých plynů v prostředí, včetně možnosti jejich softwarové modelace, lze konstatovat, že koncentrace látky v blízkosti zdroje úniku musela být výrazně vyšší, než jaká byla při experimentu měřena. Odhadovaná koncentrace v blízkosti zdroje úniku byla v řádu stovek tisíc ppm, což je vysoce za hranici detekčních schopností použitých detekčních přístrojů. V oblasti poslední řady detektorů, 100 m od zdroje úniku, byla odhadována koncentrace v řádu desítek tisíc ppm. V prostoru viditelného šíření oblaku plynu lze dle fyzikálních vlastností látky odhadovat její koncentraci vyšší než 10 000 ppm. V iniciálních fázích experimentu byla viditelná oblast vytvořeného oblaku těžkého plynu až do vzdálenosti zhruba 150 m. Z těchto důvodů bylo nezbytné naměřená data korigovat a upravit, aby bylo možné vytvořit realistický odhad koncentrace, která se v prostoru mohla vyskytovat. Ke korekci hodnot byly použity naměřené hodnoty a dvě orientační modelace v softwarovém nástroji ALOHA s cílem vytvořit odhad koncentrace látky v blízkém poli úniku. Pro první modelaci byly použity reálné hodnoty a rozměry zásobníku i únikového otvoru a pro druhou modelaci byla použita dopočítaná průměrná rychlost úniku. Na základě porovnání výsledků byl stanoven koeficient, který byl použit k přepočtu a korekci naměřených hodnot. Výsledný odhad koncentrace v blízkém poli na ose x ve střední ose směru šíření látky je uveden v tabulce 1. Tyto hodnoty byly rovněž použity k doladění modulu DEGAS a ke zpřesnění výpočtu distribuce koncentrace látky a její disperze v blízkém poli. Je však nezbytné si uvědomit, že únik stlačeného plynu z tlakové nádoby či zásobníku, je dynamický děj a rychlost úniku není konstantní. S poklesem tlaku uvnitř zásobníku a snížením teploty v důsledku rozpínavosti plynu vedoucím rovněž ke zvýšení hustoty látky, dochází k pozvolnému snižování rychlosti úniku a k průběžnému poklesu koncentrace látky v prostoru.

Tabulka 1: Odhad koncentrace stopovače těžkého plynu při experimentálním úniku v blízkém poli [1]

Vzdálenost od zdroje úniku (m)	Hodnota koncentrace látky (ppm)
15	589 000
25	394 000
35	253 000
45	166 000
55	117 000
65	80 000
75	60 000
100	25 000

Verifikace výsledků modelace modulu DEGAS a komparace s výsledky měření a observacemi druhého terénního experimentu

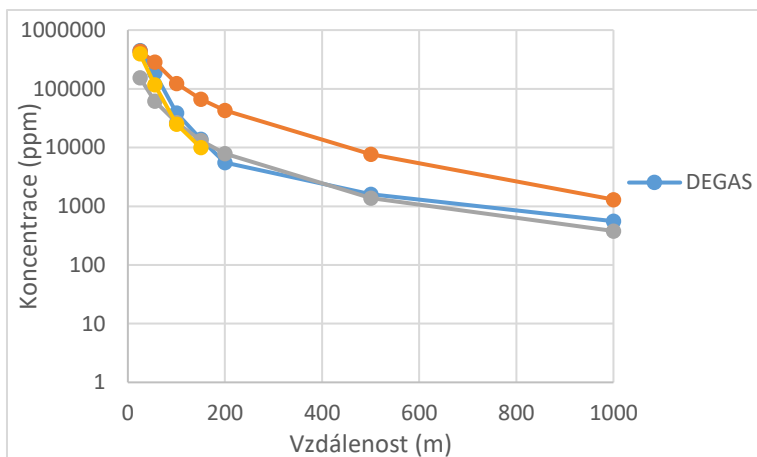
Pro verifikaci výsledků modelace s využitím modulu DEGAS byla vytvořena modelace úniku těžkého plynu ze zařízení, která svými vstupními hodnotami a parametry odpovídá reálným podmínkám, jež byly sledovány a zaznamenány při realizaci hlavní části experimentálního šetření a terénních měření projektu DEGAS. Jednalo se konkrétně o podmínky druhého experimentu, při kterém byl realizován únik těžkého plynu ze zásobníku. Výsledky modelace byly následně komparovány s modelací vytvořenou prostřednictvím softwarového nástroje ALOHA za použití modelu Heavy Gas. Pro účely modelace byl pozměněn jediný údaj, kterým je výška únikového otvoru nad zemí z 1 m na 0 m. Důvodem byl fakt, že jsou oba použité modely modelačních softwarových nástrojů koncipovány primárně pro únik lokalizovaný při zemi a TerEx v daných podmínkách umožňuje provést modelaci pouze s nulovou výškou nad zemí. Vstupní parametry modelací byly pro oba nástroje totožné, nicméně se z podstaty vyžadovaných vstupních údajů mírně lišily

objemem zadávaných dat, nikoliv jejich hodnotami. Na závěr byly výsledky modelací obou nástrojů komparovány s naměřenými a korigovanými daty a observacemi v průběhu experimentu. Prostřednictvím nástroje ALOHA byly vytvořeny dvě modelace, přičemž v první byl použit jako zdroj úniku zásobník a při druhé byl zvolen přímý zdroj s kontinuálním únikem.

V rámci komparace výsledků modelací obou softwarových nástrojů byla srovnávána koncentrace látky v určených vzdálenostech od zdroje úniku. Tyto vzdálenosti byly zvoleny na základě vybraných výše uvedených korigovaných koncentrací látky a obecných vzdáleností pro prezentaci výsledků modelace ve vzdáleném poli. Dále byly vybrány vzdálenosti, ve kterých byly umístěny detekční přístroje a vzdálenosti, ve kterých lze na základě observace experimentu reálně odhadnout přibližnou koncentraci látky. Konkrétně se jednalo o vzdálenosti 25, 55, 100, 150, 200, 500 a 1000 m. Dále byly na základě určených hodnotících koncentrací látky oběma nástroji komparovány vzdálenosti, do kterých byl vypočten dosah látky ve zvolené koncentraci. Přesněji se jednalo o koncentrace AEGL/PAC 2, 3 a hodnota IDLH. Výsledné hodnoty jsou uvedeny v tabulce 2 a na obrázku 3. Modelace vytvořené prostřednictvím softwarového nástroje ALOHA byly označeny číselně, přičemž první modelace (ALOHA 1) prezentuje výsledky modelace úniku ze zásobníku a druhá modelace (ALOHA 2) prezentuje výsledky modelace z přímého zdroje s kontinuálním únikem.

Tabulka 2: Výsledky modelace podmínek experimentu dle modulu DEGAS a nástroje ALOHA

Vzdálenost od zdroje	DEGAS	ALOHA 1	ALOHA 2
25 m	810 000 mg/m ³ , 450 000 ppm	787 000 mg/m ³ , 437 000 ppm	277 000 mg/m ³ , 154 000 ppm
55 m	335 000 mg/m ³ , 186 000 ppm	482 000 mg/m ³ , 286 000 ppm	111 000 mg/m ³ , 61 600 ppm
100 m	70 000 mg/m ³ , 38 900 ppm	221 000 mg/m ³ , 123 000 ppm	48 000 mg/m ³ , 26 500 ppm
150 m	25 000 mg/m ³ , 13 900 ppm	120 000 mg/m ³ , 66 400 ppm	24 000 mg/m ³ , 13 200 ppm
200 m	10 000 mg/m ³ , 5 560 ppm	77 000 mg/m ³ , 43 000 ppm	14 000 mg/m ³ , 7 840 ppm
500 m	2 900 mg/m ³ , 1 610 ppm	14 000 mg/m ³ , 7 740 ppm	2 500 mg/m ³ , 1 370 ppm
1000 m	1 000 mg/m ³ , 556 ppm	2 300 mg/m ³ , 1 300 ppm	680 mg/m ³ , 379 ppm
Koncentrace látky	DEGAS	ALOHA 1	ALOHA 2
72 g/m ³ , 40 000 ppm (IDLH)	90 m	212 m	76 m
70 g/m ³ , 38 889 ppm	100 m	215 m	80 m
50 mg/m ³ , 28 ppm	5 143 m	3 900 m	4 000 m



Obrázek 3: Grafické znázornění vypočtené koncentrace látky v prostoru dle podmínek experimentu

Při vyhodnocení výsledků modelací lze sledovat tři základní oblasti, ve kterých se modelace shodují či rozcházejí. Jedná se o oblast blízkého pole do 100 m, oblast střední vzdálenosti do 200 m, a oblast vzdáleného pole do 1 000 m. V bezprostřední blízkosti zdroje úniku dosahují nejlepších výsledků modelace DEGAS a ALOHA 1, které uvádějí vzdáleně podobné hodnoty k odhadované koncentraci látky při experimentálním úniku v blízkém poli, viz tabulka 1. Tyto výsledky se ale ve vzdálenosti 55 i 100 m začínají výrazně rozcházet a modelace ALOHA 1 v těchto oblastech uvádí výrazně vyšší hodnoty oproti výsledku modulu DEGAS i odhadu koncentrace látky při experimentu. Maximální vypočtená koncentrace modulem DEGAS je 458 000 ppm ve vzdálenosti 29 m od zdroje úniku. Realistický odhad koncentrace je v blízkosti zdroje úniku ještě vyšší. Výsledek modelace ALOHA 2 v této oblasti ukazuje výrazně nižší koncentraci látky oproti výsledkům ostatních modelací i odhadované koncentraci látky. Výsledky této modelace ovšem oproti ostatním uvádějí nejpodobnější hodnotu k odhadované koncentraci látky ve vzdálenosti 100 m od zdroje úniku.

Ve střední vzdálenosti i v oblasti vzdáleného pole vykazují modelace DEGAS a ALOHA 2 podobné výsledky. Na základě observace experimentu lze dedukovat, že ve vzdálenosti přibližně 150 m byla koncentrace látky vyšší než 10 000 ppm, jelikož do této vzdálenosti byl v iniciální fázi experimentu pozorovatelný hustý oblak těžkého plynu tvořený směsí plynu a aerosolu. Obě uvedené modelace v této oblasti shodně uvádějí hodnotu vyšší než 13 000 ppm, což se shoduje s observací při experimentu. Pro oblast vzdáleného pole lze již komparovat pouze rozdílnost výsledků modelací, jelikož v této oblasti nebyly při experimentu umístěny detekční přístroje. Oproti ostatním dvou modelacím udává v této oblasti modelace ALOHA 1 výrazně vyšší koncentrace, které lze označit za nadhodnocené. Dle výsledků ALOHA 1 by byl vytvořený oblak těžkého plynu pozorovatelný až do vzdálenosti přibližně 445 m, což se neshoduje s reálnými podmínkami. U modelace ALOHA 1 je ale nezbytné uvažovat její chybovost na základě vypočtené doby a rychlosti úniku. Tyto hodnoty byly vypočteny na dobu trvání 4 minuty s rychlostí úniku 1 950 kg/min. Reálná doba úniku ovšem byla 19 minut s rychlostí úniku 375 kg/min. Modul DEGAS vypočetl rychlost úniku rovněž chybně na 248 kg/min, což je ale podobnější hodnota reálným podmínkám oproti druhé modelaci. Na základě těchto rozdílů lze vysvětlit i celkovou rozdílnost výsledků modelace ALOHA 1 oproti výsledkům ostatních dvou modelací. Pro modelaci ALOHA 2 byly zadány reálné hodnoty úniku a ve střední oblasti i ve vzdáleném poli vykazuje akceptovatelné výsledky. Jako směrodatné lze tedy v uvedené oblasti brát výsledky modelací DEGAS a ALOHA 2. V rámci modulu DEGAS se zde uplatňuje i nastavený disperzní koeficient, který zpřesňuje modelaci právě ve vzdáleném poli a je závislý na vzdálenosti od zdroje úniku. Modelace ALOHA 2 selhává při výpočtu koncentrace látky v blízkém poli a zejména v blízkosti zdroje úniku, kde udává výrazně nižší koncentraci látky, než jaká se v reálných podmínkách vyskytovala. V oblasti vzdáleného pole udává tato modelace výraznější pokles koncentrace látky v prostoru než modul DEGAS.

Samotné výsledky modelací experimentu prostřednictvím obou softwarových nástrojů a použitých druhů výpočtů se v oblasti blízkého pole, střední vzdálenosti i vzdáleného pole liší ve vypočtené koncentraci o více jak 10 %. Toto platí pro všechny vzdálenosti kromě 150 m, kde jsou výsledky modulu DEGAS a modelace ALOHA 2 rozdílné o méně jak 10 %. Výsledky všech modelací jsou taktéž rozdílné o více jak 10 % ve vypočteném dosahu stanovených koncentrací látky a lze konstatovat jejich významnou rozdílnost, byť jsou výsledky DEGAS a ALOHA 2 ve střední vzdálenosti a ve vzdáleném poli zdánlivě podobné. Ve vypočtené vzdálenosti se shodují pouze výsledky obou modelací ALOHA pro koncentraci 28 ppm. Při bližší komparaci vypočtených hodnot dle jednotlivých modelací s korigovanými hodnotami lze sledovat, že se ve vzdálenostech 25, 55 a 100 m výsledky relativně shodují s modelací prostřednictvím modulu DEGAS. Výsledky modulu DEGAS lze v jednotlivých oblastech shledat konzistentními a v uvedených vzdálenostech udávají relativně podobné hodnoty uvedenému odhadu. Výsledky modelace ALOHA 1 se z jednotlivých modelací korigovaným hodnotám nejvíce přibližují v blízkosti zdroje úniku ve vzdálenosti 25 m, ale poté udávají výrazně nižší úroveň poklesu koncentrace látky v prostoru. Výsledky modelace ALOHA 2 naopak udávají výrazně nižší koncentraci látky v blízkosti zdroje úniku, ale ve vzdálenosti 100 m se korigovaným hodnotám oproti ostatním nejvíce přibližují. Z tohoto důvodu lze výsledky obou modelací softwarového nástroje ALOHA shledat v tomto případě nekonzistentní pro oblast blízkého pole a střední vzdálenosti.

Na základě prezentovaných výsledků lze konstatovat, že nejrealističtějších výsledků dosahuje ze tří provedených modelací výsledek vytvořený modulem DEGAS. Tyto výsledky jsou rovněž v relativní shodě i při komparaci s odhadem koncentrace CO_2 při experimentálním úniku v blízkém poli, viz tabulka 1 a obrázek 3, a při komparaci s provedenými observacemi v průběhu experimentu. Při modelaci úniku a šíření těžkého plynu v atmosféře je nezbytné vzít

v potaz, že ani jeden nástroj do modelací zcela nezanáší dynamiku úniky látky, která je proměnná a s postupem času se únik zmenšuje. Při interpretaci výsledků modelací je žádoucí, aby modelace prezentovaly maximální dosah nebezpečné koncentrace látky v prostředí, ke kterému dochází při úniku typu JET v iniciální fázi. Toto je podstatné zejména u látek, které jsou za standardních podmínek těžší vzduchu, jelikož mohou být v prostředí perzistentní a je nezbytné vědět, v jaké oblasti může být nezbytné realizovat úkony chemického průzkumu, ochrany obyvatelstva a další opatření.

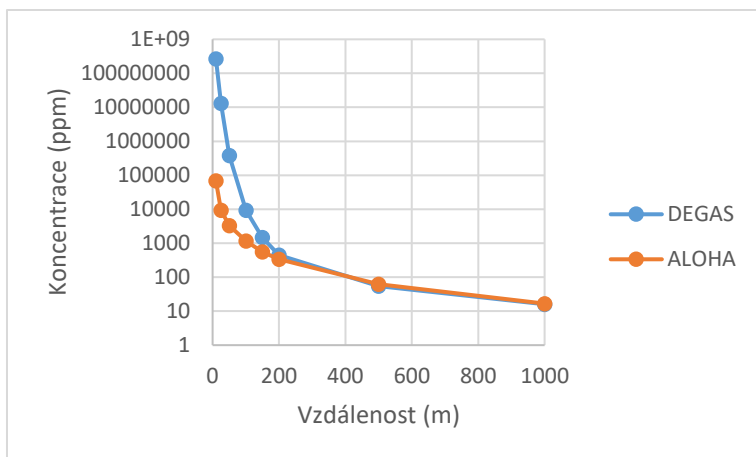
Výsledky modelace úniku a šíření těžkých plynů v podmínkách vybraných chemických havárií

K demonstraci validity výstupů modelací a jejich výsledků či predikci dopadů chemických havárií jsou níže uvedeny tři dle stanovené metodiky vybrané chemické havárie, jejichž dopady byly modelovány prostřednictvím modulu DEGAS softwarového nástroje TerEx a modelu Heavy Gas nástroje ALOHA. Konkrétně se jedná o havárie ve městech Festus (2002), Graniteville (2005) v USA a Tavaux (2004) ve Francii. Vzhledem k výsledkům komparativní modelace obou nástrojů vytvořené v rámci vyhodnocení projektu DEGAS a jejich validity v reálných podmínkách, byl pro následující modelace v nástroji ALOHA zvolen pouze způsob modelace se stanovenou rychlostí úniku. Modelace dle určení velikosti zásobníku, na základě které softwarový nástroj dopočítá rychlost úniku, nebyla použita z důvodu vysoké chybovosti v určení rychlosti úniku a z ní plynoucí nespolehlivosti predikce šíření látky v atmosféře ve střední vzdálenosti a ve vzdáleném poli. Tento postup taktéž není univerzálně vhodný, kdy pro jeho využití je nezbytné modelovat únik přímo ze skladovacího zařízení. Jednotlivé havárie a jejich modelace byly zaměřeny výhradně na modelaci šíření a rozptylu těžkého plynu v atmosféře. Výsledky modelací byly následně komparovány navzájem a rovněž s reálnými dopady uvedených havárií.

Výsledky modelace chemické havárie ve městě Festus

Tabulka 3: Výsledky modelace havárie ve městě Festus

Vzdálenost od zdroje	DEGAS	ALOHA
10 m	769 000 000 mg/m ³ , 265 000 000 ppm	198 500 mg/m ³ , 68 500 ppm
25 m	37 700 000 mg/m ³ , 13 000 000 ppm	26 960 mg/m ³ , 9 300 ppm
50 m	1 100 000 mg/m ³ , 379 500 ppm	9 620 mg/m ³ , 3 320 ppm
100 m	27 000 mg/m ³ , 9 315 ppm	3 260 mg/m ³ , 1 160 ppm
150 m	4 300 mg/m ³ , 1 480 ppm	1 630 mg/m ³ , 561 ppm
200 m	1 300 mg/m ³ , 449 ppm	974 mg/m ³ , 336 ppm
500 m	160 mg/m ³ , 55 ppm	179 mg/m ³ , 61,7 ppm
1000 m	47 mg/m ³ , 16 ppm	48 mg/m ³ , 16,7 ppm
Koncentrace látky	DEGAS	ALOHA
29 mg/m ³ , 10 ppm (IDLH)	1,3 km	1,3 km
14,5 mg/m ³ , 5 ppm	1,94 km	1,9 km
58 mg/m ³ , 20 ppm (AEGL 3)	900 m	909 m
5,8 mg/m ³ , 2 ppm (AEGL 2)	Více než 2,5 km	3,1 km



Obrázek 4: Grafické znázornění vypočtené koncentrace látky v prostoru havárie ve městě Festus

Výsledky modelace chemické havárie ve městě Festus uvedené v tabulce 3 a na obrázku 4 ukazují predikovaný vývoj koncentrace látky v prostoru a v druhé části tabulky uvádějí vypočtenou vzdálenost dle konkrétních koncentrací. Z výsledků je patrný zásadní rozdíl ve vypočtené koncentraci v blízkém poli, ale ve střední vzdálenosti a vzdáleném poli se výsledky vzájemně přibližují. Uvedené koncentrace byly oběma nástroji vypočteny do prakticky shodných vzdáleností. Tento závěr se shoduje i se závěrem modelací realizovaných v rámci projektu DEGAS, kde byl rovněž patrný rozdíl ve výpočtech v blízkém poli a následná relativní shoda ve střední vzdálenosti a ve vzdáleném poli. V rámci modelace této události jsou výsledky oproti modelaci simulované události v projektu DEGAS vzájemně více ve shodě. Nedostatek ve výsledcích je patrný u nástroje TerEx při uvedení vzdálenosti koncentrace 2 ppm, jelikož výsledný generovaný graf pro tuto modelaci je limitován na 2,5 km. Lze ale předpokládat, že výsledná vzdálenost by v dané koncentraci byla podobná výsledku nástroje ALOHA. Pozornost lze blíže věnovat koncentraci v blízkém poli vypočtené modulem DEGAS, která uvádí

koncentraci převyšující 1 000 000 ppm, což znamená, že koncentrace plynu ve vzduchu bude 100 %. Uvedené ovšem značí, že v nástroji TerEx není nastavena maximální hodnota pro tuto škálu.

Modul DEGAS udává pro tuto havárii v blízkém poli výsledky, které jsou srovnatelné s pozorováním při havárii. ALOHA udává v blízkém poli koncentrace, které jsou značně podhodnoceny. Samotné výsledky obou modelací jsou v oblasti blízkého pole a střední vzdálenosti rozdílné o více jak 10 %. V oblasti vzdáleného pole jsou výsledky modelací ve vzdálenosti 500 m podobné, ale až ve vzdálenosti 1 000 m jsou rozdílné o méně jak 10 % a lze tedy v této oblasti konstatovat jejich relativní shodu. Při výpočtu vzdálenosti dosahu stanovených koncentrací jsou výsledky rozdílné o méně jak 10 % a lze konstatovat jejich shodu.

Při komparaci výsledků modelace s reálnými podmínkami havárie lze využít zejména videozáznam havárie pořízený z vrtulníku televizním štábem, který zabírá blízkou oblast zdroje úniku a lze sledovat hustý oblak těžkého plynu o vysoké koncentraci [8]. Viditelná vzdálenost vytvořeného oblaku chloru je přibližně 85 m v nejbližším bodě. V této vzdálenosti se nacházel plot areálu a mírné vyvýšení přilehlé komunikace, které vytvářely terénní překážku pro šíření oblaku těžkého plynu. V této vzdálenosti musela dle předchozích poznatků být koncentrace plynu vyšší než 10 000 ppm. DEGAS počítá tuto koncentraci do vzdálenosti necelých 100 m, což lze považovat za odpovídající reálným podmínkám, pokud by ve zmiňované vzdálenosti nebyla přítomna terénní překážka. Uvedené ale neznamená, že se látka nešířila dál v nižších koncentracích pomocí proudění větru. Z jedné strany byl prostor omezen samotným chemickým závodem a z druhé strany železničním náspem. Tyto terénní překážky vytvořily omezenou oblast, ve které se vytvořilo „jezero“ oblaku těžkého plynu o velmi vysoké koncentraci. Výsledek modelace dle modulu DEGAS na základě zadaných vstupních parametrů uvádí nižší rychlost úniku, než jaká byla

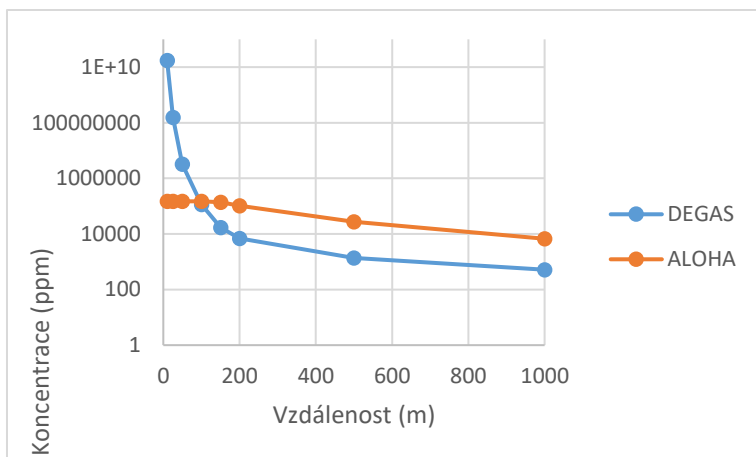
v reálných podmínkách, konkrétně necelých 1,5 kg/s. Reálná rychlost úniku ale byla přibližně 2 kg/s.

Ve vyšetřovací zprávě havárie [9] je uvedeno, že se unikající plyn mohl v době krátkého bezvětrí šířit západním směrem do oblasti blízkého kempu. Dále je zde uvedeno, že se oblak těžkého plynu šířil přes přilehlou komunikaci do vedlejšího stavebního podniku, kde jej zpozorovali zaměstnanci, což lze potvrdit, jelikož je chlor viditelný i v nižších koncentracích jako žlutozelený plyn. Zmiňovaný podnik se nachází ve vzdálenosti 150 m od místa havárie a obě modelace udávají v této vzdálenosti koncentraci vysoce převyšující hodnotu IDLH, tudíž zde hrozily závažné zdravotní následky osob při expozici unikající látky. Při 10minutové expoziční době je hodnota IDLH chloru udávána na 50 ppm [10]. Tuto hranici vysoce převyšují výsledky obou modelací. Pro účely vyšetřovací zprávy byla vytvořena soudobá modelace šíření chloru v prostředí, které udává, že dosah koncentrace 3 ppm mohl být až do vzdálenosti 6 km, což výsledky zde vytvořených modelací nepotvrzují [9]. Na základě komparace výsledků modelací s dopady reálné chemické havárie lze konstatovat, že vypočtené maximální dosahy nebezpečných koncentrací látky oběma nástroji se jeví jako realistické. Při výpočtu koncentrace látky v jednotlivých sledovaných oblastech dosahuje kvalitnějších výsledků modul DEGAS, byť uvádí mírnou nuanci v rychlosti úniku látky. Avšak v oblasti blízkého pole selhávají obě modelace, neboť modul DEGAS uvádí více než absolutní koncentraci látky v prostoru a ALOHA naopak koncentraci silně podhodnocenou. Z pohledu aplikace výsledků modelací v praxi je ale podstatný věrohodný odhad dosahu nebezpečné koncentrace látky v prostoru. V rámci této modelace se rovněž zásadně projevují nedostatky a omezení matematických modelů v popisu meteorologických a terénních podmínek, kdy modelace nejsou schopny únik přesně zanést do místních podmínek. I přes tyto nedostatky se pro popisovanou havárii jeví výsledky modelací obou softwarových nástrojů v oblastech nebezpečných koncentrací jako uspokojivé.

Výsledky modelace chemické havárie ve městě Graniteville

Tabulka 4: Výsledky modelace havárie ve městě Graniteville

Vzdálenost od zdroje	DEGAS	ALOHA
10 m	49 880 000 000 mg/m ³ , 17 210 000 000 ppm	431 900 mg/m ³ , 149 000 ppm
25 m	455 000 000 mg/m ³ , 157 000 000 ppm	431 900 mg/m ³ , 149 000 ppm
50 m	9 400 000 mg/m ³ , 3 240 000 ppm	431 900 mg/m ³ , 149 000 ppm
100 m	335 000 mg/m ³ , 115 600 ppm	431 900 mg/m ³ , 149 000 ppm
150 m	49 000 mg/m ³ , 16 900 ppm	400 000 mg/m ³ , 138 000 ppm
200 m	20 000 mg/m ³ , 6 900 ppm	296 000 mg/m ³ , 102 000 ppm
500 m	4 000 mg/m ³ , 1 380 ppm	79 130 mg/m ³ , 27 300 ppm
1000 m	1500 mg/m ³ , 518 ppm	19 480 mg/m ³ , 6 720 ppm
Koncentrace látky	DEGAS	ALOHA
29 mg/m ³ , 10 ppm (IDLH)	11,4 km	Více než 10 km
14,5 mg/m ³ , 5 ppm	16,6 km	Více než 10 km
58 mg/m ³ , 20 ppm (AEGL 3)	8 km	9,7 km
5,8 mg/m ³ , 2 ppm (AEGL 2)	2,8 km	Více než 10 km



Obrázek 5: Grafické znázornění vypočtené koncentrace látky v prostoru havárie ve městě Graniteville

Z výsledků modelace havárie ve městě Graniteville uvedených v tabulce 4 a na obrázku 5 lze při komparaci výstupů obou softwarových nástrojů konstatovat zásadní rozdíl ve všech sledovaných zónách kontaminace i ve vypočtených vzdálenostech dle určených koncentrací. Modelace ALOHA rovněž predikuje výrazně nižší úroveň poklesu koncentrace látky v prostoru než modul DEGAS. V bezprostřední blízkosti zdroje úniku a v blízkém poli udává modul DEGAS extrémně vysokou koncentraci látky v prostředí. Následně však uvádí výrazný pokles koncentrace látky v prostoru. ALOHA na druhou stranu udává v této oblasti koncentrace výrazně nižší. Uvedené hodnoty vypočtené nástrojem ALOHA jsou navíc ve všech vzdálenostech blízkého pole totožné a k poklesu koncentrace dochází až ve střední vzdálenosti. Ve výpočtu vzdálenosti konkrétních koncentrací se zde navíc projevuje omezení nástroje ALOHA, který uvádí výsledky maximálně do vzdálenosti 10 km a minimální dobu trvání úniku 1 minuta. Z důvodu minimálního časového omezení lze alternativně změnit rychlost úniku v modelaci ALOHA na hodnotu 908 kg/s. Uvedená úprava modelace se ale

neshoduje s reálnými podmínkami havárie. Na základě uvedených výsledků lze konstatovat, že se veškeré vypočtené hodnoty modelací liší o více jak 10 %.

Dle vyšetřovací zprávy havárie [11] se při úniku látky vytvořil oblak chloru v okolí cisterny a zaplnil místo havárie, které bylo položeno přibližně o 1 metr níže oproti souběžné komunikaci a kolejišti. Jedná se tedy o limitovaný prostor terénními překážkami, který nelze do modelací řádně zanést. Dle modelace DEGAS by byl vytvořen hustý oblak unikající látky o koncentraci vyšší než 10 000 ppm až do vzdálenosti přibližně 180 m a dle modelace ALOHA do 860 m. Samotný prostor byl však omezen v nejbližších bodech od havárie ve vzdálenosti přibližně 70 m. Lze ale předpokládat, že se plyn o vysoké koncentraci eventuálně šířil i za tuto uvedenou vzdálenost. Dle observací záchranných složek a lokalizace obětí havárie byl dosah vysoce nebezpečné koncentrace látky přibližně 760 m severně, 305 m západně i východně a 275 m jižně. Pokud bychom uvažovali koncentraci 50 ppm, tak by dle modelace DEGAS dosahovala do vzdálenosti přibližně 4 km a dle modelace ALOHA do vzdálenosti 6,9 km. Modelace ovšem v důsledku omezení výpočtů a matematických modelů nepočítají s výrazným šířením látky do jiných směrů, než jakým je nastaveno proudění větru. Pro vzdálenost 760 m po směru proudění větru udává modul DEGAS koncentraci látky 759 ppm a ALOHA 11 900 ppm. Dle uvedené hodnoty modelace ALOHA by v rozmezí této vzdálenosti byl stále viditelný hustý oblak plynu, který je ale popisován jen v blízkosti zdroje úniku.

V rámci zabezpečení oblasti byla v okruhu 1 míle od havárie vytvořena bezpečnostní uzávěra a v této oblasti proběhla plošná evakuace osob. V uvedené oblasti se dle modelací po směru větru vyskytovala nebezpečná koncentrace látky, nicméně je nezbytné vstít v potaz i po jakou dobu mohla látka v prostředí setrvat, než došlo k její disperzi. Při vyhodnocení modelací softwarový nástroj TerEx časovou

osu neuvádí. Nástroj ALOHA uvádí že by se v oblasti uzávěry dostala koncentrace chloru na bezpečnou úroveň přibližně po 15 minutách od vzniku havárie. Samotná uzávěra byla vytvořena až 20 minut po havárii a dle predikce softwarového nástroje ALOHA byla tato oblast již bezpečná pro pobyt osob. V této době je ve vyšetřovací zprávě dále uvedeno, že přítomnost hustého oblaku těžkého plynu o vysoké koncentraci byla pouze v bezprostřední blízkosti havarované cisterny [11].

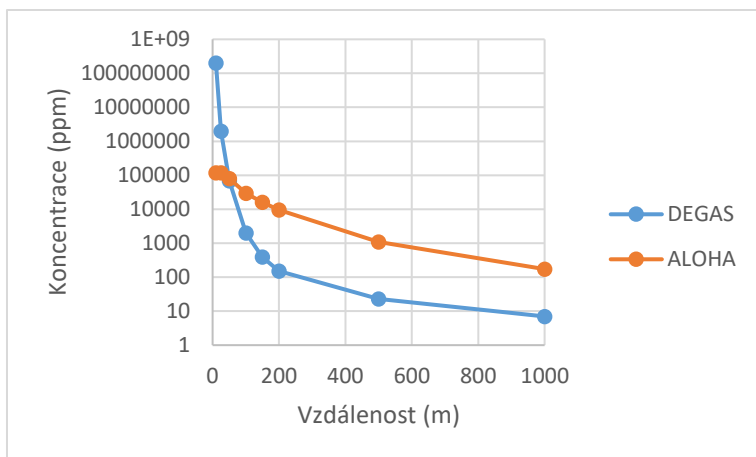
Výsledky modelace modulu DEGAS se dále výrazně liší od reálných podmínek, jelikož dle nastavených hodnot uvádí rychlost úniku 178,7 kg/s. Reálná rychlost ale byla téměř 10krát tak vysoká. Pokud by se vypočtená rychlost úniku více přibližovala reálným podmínkám, lze předpokládat větší podobnost s výsledky nástroje ALOHA, ale rovněž jejich nižší věrohodnost. Na základě komparace výsledků modelací s reálnými podmínkami havárie lze konstatovat, že i přes uvedené nedostatky dosahují přesnějších a realističtějších predikcí výsledky modulu DEGAS.

Výsledky modelace chemické havárie ve městě Tavaux

Z výsledků uvedených v tabulce 5 a na obrázku 6 jsou patrné obdobné výsledky jako u předchozích dvou modelací a shodně se zde projevují omezení a nedostatky jednotlivých matematických modelů. V blízkosti zdroje úniku udává model DEGAS velmi vysoké, až fyzikálně nerealistické hodnoty koncentrace látky. Jelikož se jedná o trend u všech modelací, lze deklarovat, že se jedná o způsob výpočtu poklesu koncentrace látky v závislosti na vzdálenosti od zdroje úniku, který je podobný logaritmické křivce a vyobrazení maximální koncentrace není omezeno při hodnotě dosahující 100 % koncentrace látky v ovzduší. Na druhou stranu výsledky softwarového nástroje ALOHA dle metodicky zvoleného postupu poukazují na limitaci maximální koncentrace látky v blízkosti zdroje úniku a k jejímu poklesu dochází až následně.

Tabulka 5: Výsledky modelace havárie ve městě Tavaux

Vzdálenost od zdroje	DEGAS	ALOHA
10 m	510 000 000 mg/m ³ , 199 400 000 ppm	304 000 mg/m ³ , 119 000 ppm
25 m	5 110 000 mg/m ³ , 1 998 000 ppm	304 000 mg/m ³ , 119 000 ppm
50 m	175 000 mg/m ³ , 68 425 ppm	205 000 mg/m ³ , 80 200 ppm
100 m	5 150 mg/m ³ , 2 013 ppm	75 450 mg/m ³ , 29 500 ppm
150 m	1 000 mg/m ³ , 391 ppm	40 660 mg/m ³ , 15 900 ppm
200 m	390 mg/m ³ , 152 ppm	24 250 mg/m ³ , 9 480 ppm
500 m	60 mg/m ³ , 23 ppm	2 813 mg/m ³ , 1 100 ppm
1000 m	18 mg/m ³ , 7 ppm	442 mg/m ³ , 173 ppm
Koncentrace látky	DEGAS	ALOHA
4 800 mg/m ³ , 1876 ppm (IDLH)	103 m	409 m
50 mg/m ³ , 20 ppm	561 m	2,2 km
12 300 mg/m ³ , 4800 ppm (AEGL 3)	63 m	277 m
3 100 mg/m ³ , 1200 ppm (AEGL 2)	140 m	485 m



Obrázek 6: Grafické znázornění vypočtené koncentrace látky v prostoru havárie ve městě Tavaux

Při komparaci výsledků obou modelů je patrný rozdíl v udávaných hodnotách ve všech sledovaných vzdálenostech i ve vypočtených vzdálenostech dle stanovené koncentrace látky. Míra rozdílnosti výsledků převyšuje stanovenou hranici 10 %. Následně model DEGAS udává výrazně větší pokles koncentrace látky v prostoru. Dalším zásadním rozdílem obou modelací je rychlost úniku látky. DEGAS tuto rychlost vypočetl na 0,13 kg/s, což je výrazný rozdíl oproti reálné hodnotě. Oproti předchozím haváriím je tato událost mírně odlišná, konkrétně ve výšce zdroje úniku nad zemí. V předchozích modelacích se jednalo o úniky v malé výšce, ale v tomto případě byl zdroj úniku 14 m nad zemí. Jelikož jsou matematické modely použitých softwarových nástrojů koncipovány pro modelaci úniku a šíření těžkého plynu v minimální až nulové výšce nad zemí, bylo nezbytné v modelacích upravit výšku na 0 m.

Nedostatkem pro přesné vyhodnocení modelace a komparace s reálnými podmínkami sledovanými při havárii je absence přesného umístění zdroje úniku v podniku, který ve vyšetřovací zprávě není

blíže uveden. Tento nedostatek není pro účely modelace předmětný, ale je validní pro komparaci výsledků modelací s popisem úniku a jeho dopadů ve vyšetřovací zprávě. Tato zpráva uvádí hodnoty měření koncentrace unikající látky, které byly zaznamenány v objektu, u něhož k úniku došlo. Zároveň jsou zde uvedeny hodnoty měření z vedlejšího objektu, u kterého není známo, jak daleko se nacházel od zdroje úniku. Obecně lze předpokládat, že vzdálenost obou objektů od sebe byla v řádu maximálně desítek metrům. Ve zprávě jsou dále uvedeny výsledky soudobé modelace zkoumaného úniku, které poskytují dostatečné informace pro jejich komparaci s modelacemi vytvořenými v této práci [12].

Dle vyšetřovací zprávy analyzované chemické havárie [12] byla v primárně zasažené výrobní hale detekována koncentrace unikající látky 2 763 ppm po dobu kratší než 20 minut. Detekovaná koncentrace v druhé výrobní hale byla 22 ppm po dobu kratší než 20 minut. Pokud bychom uvažovali vzdálenost druhé haly 100 m od zdroje úniku, nacházela by se ve vnějším prostředí vysoká koncentrace látky, která dle modulu DEGAS hraničí s koncentrací IDLH. Modelace ALOHA udává v této oblasti více jak 10krát vyšší koncentraci látky. Nástroj ALOHA dále predikuje koncentraci látky penetrující do budov v této oblasti na 512 ppm, která je výrazně vyšší oproti reálným naměřeným hodnotám při havárii. ALOHA dále v oblasti blízkého pole do 100 m udává, že se látka bude v prostředí vyskytovat maximálně po dobu 10 minut. Vzhledem k předpokládané dispozici obou výrobních hal v areálu lze konstatovat, že časové výpočty a předpoklad dynamiky disperze látky v prostředí se shodují s měřeními a časovými údaji uvedenými ve vyšetřovací zprávě havárie.

Výsledky zde provedených modelací lze blíže komparovat se soudobou modelací analyzovaného úniku, která byla zaměřena na výpočet nebezpečné vzdálenosti dle hodnotící koncentrace NOEL (No Observable Effect Level). Hodnota této koncentrace pro vinylchlorid je určena na 8 000 ppm [13]. Dle výpočtu byl vytvořen

oblak plynu unikající látky, který udávané koncentrace dosahoval ve výšce 6 m, šířce 7 m a délce 42 m [12]. Z uvedených parametrů lze komparovat s výsledky zde vytvořených modelací pouze dosah koncentrace v přímé vzdálenosti od zdroje úniku. Modul DEGAS udává vzdálenost od zdroje úniku při koncentraci 8 000 ppm na 75 m a ALOHA na 218 m. Oba výsledky vysoce převyšují udávanou vzdálenost dle původní modelace. Lze ale konstatovat, že výsledek modulu DEGAS je s původní modelací v podstatně větší shodě než výsledek nástroje ALOHA. Nejistotu výpočtů obou prezentovaných modelací zvyšuje fakt, že se únik odehrál v silně urbanizované krajině, uvnitř průmyslového areálu, kde se při disperzi oblaku těžkého plynu mohly uplatňovat další fyzikální jevy spojeny s proměnlivostí meteorologických podmínek a specifickým prouděním vzduchu.

Na základě výsledků výše prezentovaných modelací vybraných chemických havárií a jejich komparace lze konstatovat, že oba sledované matematické modely popisující šíření a rozptyl těžkých plynů v atmosféře udávají v rámci možností kvalitní výstupy, které jsou využitelné pro orientační odhad šíření plynných látek v prostředí. Oba modely jsou ovšem výrazně zatíženy řadou nedostatků a omezení, které pramení z nutnosti zjednodušeného popisu šíření látek v atmosféře a vnímání externích faktorů, aby bylo realistické modelace vytvořit v běžných podmínkách. V tomto ohledu je nezbytné řadu faktorů zobecňovat či zjednodušovat, zejména popis a implementace meteorologických a terénních faktorů do jednotlivých modelů. Dle prezentovaných výsledků je validita softwarových modelací úniku a šíření těžkých plynů v prostředí pouze částečná, a to zejména vzhledem k ose úniku látky ze zdroje a směru proudění větru. Dle sledovaných havárií docházelo k částečnému úniku látky i do ostatních směrů mimo proudění větru, což modelace nedokáží řádně predikovat. Směrodatnými výstupy jsou zejména orientační predikce dosahu chemické látky o určené koncentraci v ose úniku po směru větru.

Stanovení doporučení k využití softwarových modelací úniku nebezpečných chemických látek, směsí a šíření těžkých plynů v atmosféře v oblasti chemické bezpečnosti a ochrany obyvatelstva

Na základě výše prezentovaných výsledků a jejich interpretace lze stanovit následující soubor doporučení pro využití softwarových modelací úniku nebezpečných chemických látek, směsí a šíření těžkých plynů v atmosféře. Z pohledu modelací jsou doporučení koncipována pro využití zejména softwarových modelačních nástrojů TerEx, modulu DEGAS a nástroje ALOHA, modelu Heavy Gas. Samotná doporučení jsou zaměřena na možné využití modelací v oblasti ochrany obyvatelstva, chemické bezpečnosti a složkami IZS při přípravě na řešení a při řešení chemických havárií v rámci provádění záchranných a likvidačních prací a stanovení adekvátních opatření.

- Softwarové modelace úniku nebezpečných chemických látek, směsí a šíření těžkých plynů v atmosféře je vhodné využít zejména pro účely analýzy rizik, přípravy bezpečnostní dokumentace a retrospektivní analýzy chemických havárií.
 - Modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí lze doporučit pro implementaci do bezpečnostní dokumentace a analýzy rizik všech objektů skladujících nebezpečné chemické látky a směsi, jejichž plyny a páry vykazují nebezpečné vlastnosti pro životy a zdraví osob, zvířata a životní prostředí.
- Softwarové modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkého plynu lze doporučit primárně pro modelaci a analýzu úniků ve vnějším prostředí, přičemž je vhodné kalkulovat se zdrojem úniku v nulové výšce nad zemí.
- Softwarové modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí v současném pojetí a dle aktuálních možností modelačních softwarových nástrojů jsou pouze omezeně vhodné

pro využití složkami IZS při řešení již probíhající chemické havárie a při provádění záchranných a likvidačních prací.

- Výsledky softwarových modelací je nezbytné brát orientačně a vždy je zapotřebí jejich bližší interpretace v konkrétním prostředí s přihlédnutím k místním meteorologickým podmínkám a ke skladbě okolního terénu.
- V rámci vyhodnocení výsledků modelací lze doporučit sledování tří oblastí v okolí zdroje úniku a koncentrace látky v těchto zónách, oblast blízkého pole do 100 m od zdroje úniku, oblast střední vzdálenosti do 200 m a oblast vzdáleného pole do 1 000 m a více.
 - V oblasti blízkého pole lze při chemických haváriích doporučit plánování/provedení bezodkladného ukrytí a následné evakuace osob bez ohledu na závažnost havárie. V ostatních oblastech lze doporučit varování a ukrytí obyvatel a zvážení následné evakuace či invakuace osob na základě závažnosti chemické havárie.
- Při interpretaci výsledků modelací je nezbytné predikovat charakteristiku úniku a sledovat jeho časovou osu při použití vhodných hodnotících koncentrací, které lze vzít v potaz při plánování a určení opatření ochrany obyvatelstva a postupů realizace záchranných a likvidačních prací.
 - Pro interpretaci výsledků modelací a stanovení oblastí, ve kterých může být nezbytné realizovat opatření ochrany obyvatel a záchranné a likvidační práce, lze doporučit využití hodnotících koncentrací AEGL, ERPG, IDLH, PAC a v podmínkách HZS ČR také HPK a HAU.
 - Pro korektní interpretaci výsledků modelací a predikce koncentrace látky v určité oblasti od zdroje úniku je vhodné využít softwarových databází nebezpečných chemických látek a směsí ke zjištění relevantních informací o látce a doporučení pro záchranné a likvidační práce, včetně doporučení na úroveň individuální ochrany zasahujících osob.

- Pro jednorázové či krátce trvající úniky lze v rámci hodnotících koncentrací doporučit využití hodnot pro 30minutovou expoziční dobu. Pro déle trvající havárie lze v rámci hodnotících koncentrací doporučit využití hodnot pro 60minutovou expoziční dobu.
- Při vyhodnocení výsledků modelací a při analýze potenciačních následků chemických havárií je nezbytné brát v potaz šíření látky i do ostatních směrů mimo vykreslenou zónu softwarovými nástroji. V tomto případě je nezbytné doplnit stanovení nebezpečné zóny o oblast ohraničenou tvarem kružnice okolo zdroje úniku v minimální vzdálenosti udávané v Řádu chemické služby HZS ČR.
 - Při analýze a observaci chemické havárie lze doporučit sledování viditelné fáze oblaku těžkého plynu a směr jeho šíření.
 - V okolí zdroje úniku lze doporučit ustanovení nebezpečné zóny ve všech směrech v minimální vzdálenosti 100 m bez ohledu na závažnost havárie.

Vyhodnocení hypotéz

Hypotéza 1: Výsledky terénního experimentu ověřujícího chování, šíření a rozptyl těžkého plynu v atmosféře se shodují s výsledky modelace tohoto experimentu prostřednictvím modulu DEGAS.
Hypotéza byla potvrzena.

Na základě analýzy výstupů druhého experimentálního šetření projektu DEGAS a jejich komparace s výsledky modelace tohoto experimentu za reálných podmínek prostřednictvím modulu DEGAS lze konstatovat jejich relativní a akceptovatelnou shodu. Výsledky modelace udávají realistické predikce šíření a disperze použitého stopovače v atmosféře, které se primárně shodují s observacemi při experimentu a částečně s korigovanými a detekovanými hodnotami látky v prostředí.

Hypotéza 2: Výsledky modelace vybraných chemických havárií prostřednictvím modulu DEGAS se neliší o více jak 10 % při komparaci s výsledky modelu Heavy Gas softwarového nástroje ALOHA. Hypotéza byla vyvrácena.

Na základě komparace výsledků modelací analyzovaných chemických havárií prostřednictvím modulu DEGAS a modelu Heavy Gas lze ve většině sledovaných parametrů konstatovat jejich rozdílnost o více jak 10 %. Relativní shoda v části výsledků byla sledována pouze u první havárie. V případě komparativních modelací dalších chemických havárií byla v ostatních parametrech sledována větší rozdílnost výsledků převyšující stanovenou hladinu významnosti. Obdobný výsledek byl rovněž sledován v rámci komparativních modelací experimentálního šetření projektu DEGAS.

Hypotéza 3: Výsledky modelace šíření a rozptylu těžkého plynu v atmosféře prostřednictvím modulu DEGAS a modelu Heavy Gas softwarového nástroje ALOHA věrohodně odpovídají reálným podmínkám analyzovaných chemických havárií. Hypotéza byla vyvrácena.

Na základě analýzy dopadů vybraných chemických havárií a jejich komparace s výsledky vytvořených modelací prostřednictvím vybraných softwarových nástrojů lze konstatovat, že výsledky modelací úniku nebezpečných chemických látek a směsí a jejich disperze v atmosféře věrohodně neodpovídají podmínkám a dopadům analyzovaných chemických havárií. Výsledky modelací a jejich predikce šíření látky v prostředí vykazují řadu nedostatků snižující míru jejich realističnosti. Projevuje se v nich řada nedostatků a omezení pramenících z matematického popisu šíření látky, úrovně implementace externích faktorů a detailnosti zanesení výsledků modelací do konkrétního prostředí. Navzdory identifikovaným nedostatkům udává modul DEGAS přesnější výsledky, které více odpovídají reálným dopadům analyzovaných chemických havárií.

5. ZÁVĚR

Disertační práce byla zaměřena na tematiku softwarových modelací úniku, šíření a disperze nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkých plynů v atmosféře. Jejím předmětem bylo v souladu s vytyčenými cíli vymezení problematiky chemické bezpečnosti s bližším zaměřením na softwarové modelace uvedeného jevu a validitu jejich výstupů i využitelnosti v daném tématu. Práce byla navázána na projekt DEGAS, při kterém byly realizovány dva terénní experimenty simulující únik nebezpečné látky ze zařízení. Jeho hlavním výstupem bylo vytvoření stejnojmenného modulu pro modelaci šíření a rozptylu těžkých plynů v atmosféře, který je součástí expertního softwarového nástroje TerEx. Modul DEGAS byl následně využit k modelaci podmínek druhého experimentu a dopadů vybraných chemických havárií, přičemž byly jeho výstupy komparovány s reálnými podmínkami a výsledky modelací softwarového nástroje ALOHA, který byl v tomto případě použit jako referenční.

Na základě prezentovaných výsledků byla identifikována řada nedostatků modelací analyzovaného jevu i použitých softwarových nástrojů a jejich matematických modelů, které se shodují s obecnými nedostatky uvedenými v teoretické části práce. Tyto nedostatky snižují míru přesnosti a validity jejich výstupů, ale nejsou takového rozsahu, který by bránil jejich praktickému využití. Softwarové modelace úniku a šíření nebezpečných chemických látek a směsí jsou vhodným doplňujícím a analytickým nástrojem pro různé využití v rámci chemické bezpečnosti, ochrany obyvatelstva a v určité míře při řešení chemických havárií záchrannými složkami, zejména při doplnění o softwarové databáze nebezpečných chemických látek a směsí. Jejich vhodnost je především pro modelaci provozních typů havárií s nižší rychlostí úniku látky ze zdroje, při kterých udává modul DEGAS i přes určité nedostatky realistický odhad šíření látky v prostředí. Výsledky modelací je ale nezbytně korektně interpretovat,

zejména s přihlédnutím k místním terénním a meteorologickým podmínkám, které mohou být proměnné. K tomuto účelu disponují softwarové nástroje řadou funkcionalit umožňující detailní vyhodnocení a interpretaci jejich výstupů, ale výsledky je v jejich současném pojetí nezbytné brát pouze orientačně jako možnou predikci šíření nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkých plynů v prostředí.

Seznam v teziích použité literatury

[1] SKŘEHOT, Petr. *Rozptyl těžkého plynu v atmosféře: teorie - modely - experimenty*. V Praze: T-SOFT, 2018. ISBN 978-80-905401-2-5.

[2] ZENG, Yousheng a Jon MORRIS. Detection limits of optical gas imagers as a function of temperature differential and distance. *Journal of the Air & Waste Management Association*. 2019, **69**(3), 351-361. Dostupné z: doi:10.1080/10962247.2018.1540366

[3] *CO2 measure LUTRON CO2-9904SD* [online]. Lutron Instruments, 2021 [cit. 2021-08-25]. Dostupné z: <https://www.lutroninstruments.eu/co-and-co2-meters/co2-measure-lutron-co2-9904sd/>

[4] *CO2+humidity+temperature meter MCH-383SD* [online]. Lutron Instruments, 2021 [cit. 2021-08-25]. Dostupné z: <https://www.lutroninstruments.eu/with-recording/co2-humidity-temperature-meter-mch-383sd/>

[5] HARRISON, William, David LARY, Brian NATHAN a Alec MOORE. The Neighborhood Scale Variability of Airborne Particulates. *Journal of Environmental Protection*. 2015, **06**(05), 464-476. ISSN 2152-2197. Dostupné z: doi:10.4236/jep.2015.65045

[6] *Gas Encyclopedia Air Liquide* [online]. In: . Air Liquide [cit. 2021-05-19]. Dostupné z: <https://encyclopedia.airliquide.com>

[7] KHAN, Noohi. Introduction to Statistical Tests of Significance. *Research & reviews : journal of statistics*. 2021, **10**(2), 17-22. Dostupné z: doi:10.37591/RRJoST

[8] U.S. CHEMICAL SAFETY AND HAZARD INVESTIGATION BOARD. *Investigation Report: Chlorine Release DPC Enterprises*,

L.P. Washington D.C.: U.S. Chemical Safety And Hazard Investigation Board, 2003. Report no. 2002-04-I-MO.

[9] NATIONAL TRANSPORTATION SAFETY BOARD. *Collision of Norfolk Southern Freight Train 192 With Standing Norfolk Southern Local Train P22 With Subsequent Hazardous Materials Release at Graniteville, South Carolina January 6, 2005: Railroad Accident Report NTSB/RAR-05/04*. Washington, D.C.: National Transportation Safety Board, 2005. PB2005-916304.

[10] FRENCH SUSTAINABLE DEVELOPMENT MINISTRY. *Vinyl chloride leak in a chemical plant: February 3, 2004, TAVAUX (Jura - 39), France*. Paříž: French Sustainable Development Ministry, 2006. N° 26363.

[11] Festus, MO 2002 Chlorine Leak. In: *YouTube* [online]. [cit. 2022-02-06]. Dostupné z: https://www.youtube.com/watch?v=FDJai_WVeGI&t=199s

[12] CHLORINE. In: *CAMEO Chemicals: Verze 2.7.1 rev 3* [online]. [cit. 2022-02-06]. Dostupné z: <https://cameochemicals.noaa.gov/chemical/2862>

[13] WORLD HEALTH ORGANIZATION. *Vinyl Chloride*. 1. Ženeva: World Health Organization, 1999. ISBN 92-4-157215-9.

Seznam prací disertanta vztahujících se k disertaci

WOS/SCOPUS: 1 citace (bez autorizace), zahraniční

STANĚK, M., HON, Z. Šíření simulantu bojové chemické látky ve specifickém prostředí. In: *Aspekty práce pomáhajících profesí AWHP 2019*. Kladno: ČVUT v Praze, Fakulta biomedicínského inženýrství, 2019, s. 144–160. ISBN 978-80-01-06651-5.

SKŘEHOT, P. A., MAREK, J., HOUSER, F., HON, Z., STANĚK, M., MELICHAROVÁ, M., JAŇOUR, Z., KORBA, P. Predikce vzniku a šíření těžkého plynu při chemických haváriích. *Chemické listy*. 2019, 113 (9), 553-558. ISSN 0009-2770 (Print), ISSN 1213-7103 (Online).

STANĚK, M., HON, Z. Ochrana osob ve specifickém prostředí v případě chemické havárie. In: *Riešenie krízových situácií v špecifickom prostredí*. Žilina: Fakulta bezpečnostného inžinierstva Žilinskej univerzity v Žiline, 2019. ISBN 978-80-554-1559-8.

SKŘEHOT, P. A., MELICHAROVÁ, M., HON, Z., MAREK, J., SKŘEHOTOVÁ, M., FRÖLICH, T., STANĚK, M., PAUČOVÁ, V., FIŠER, V. *Rozptyl těžkého plynu v atmosféře*. Praha: T-SOFT a.s., 2018. 140 s. ISBN 978-80-905401-2-5.

STANĚK, M., HON, Z. Charakteristika šíření nebezpečných chemických látek ve specifickém prostředí. In: *Hazmat Protect 2018*. Kamenná: Státní ústav jaderné, chemické a biologické ochrany, 2018, s. 253 – 261. ISBN 978-80-270-4852-6.

HON, Z., STANĚK, M., SKŘEHOT, P., A., MELICHAROVÁ, M., FRÖLICH, T., MAREK, J. Terénní testy realizované v rámci vývoje validního rozptylového modelu určeného pro predikci šíření těžkého plynu. In: *Riešenie krízových situácií v špecifickom prostredí*. Žilina:

Fakulta bezpečnostného inžinierstva Žilinskej univerzity v Žiline, 2018, s. 135 – 143. ISBN 978-80-554-1439-3.

HON, Z., STANĚK, M., SKŘEHOT, P. A., MELICHAROVÁ, M., FRÖLICH, T., MAREK, J. Vývoj validního rozptylového modelu určeného pro predikci šíření těžkého plynu v rámci chemických havárií. In: *Riešenie krízových situácií v špecifickom prostredí*. Žilina: Fakulta bezpečnostného inžinierstva Žilinskej univerzity v Žiline, 2017, s. 116 – 121. ISBN 978-80-554-1332-7.

STANĚK, M. Možnosti armády České republiky k řešení radiální mimořádné události. In: *Současné problémy radiální ochrany obyvatelstva*. Kladno: ČVUT v Praze, Fakulta biomedicínského inženýrství, 2016, s. 130 – 135. ISBN 978-80-01-05948-7.

SUMMARY

The dissertation thesis is focused on the topic of software modeling of the release, spread and dispersion of dangerous chemical substances and mixtures in the form of heavy gases in atmosphere. Its subject is the definition of the issue of chemical safety with closer focus on software modeling of the mentioned phenomenon and the validity of their outputs and usability in the given topic. The aim of the work is, on the basis of the research carried out within the DEGAS project to which the thesis is linked, the establishment of recommendations of a different character for the use of the outputs of software modeling in the field of chemical safety and population protection. Four sub-goals and three hypotheses are set for the purposes of the thesis.

The theoretical part of the thesis is focused on a comprehensive definition of the issue of chemical safety, including possible emergency manifestations of the release of dangerous chemical substances and mixtures. Furthermore, on the definition of heavy gas, the process of its spread in the environment and the factors that influence this process. Subsequently, the possibilities of software modeling of the spread and dispersion of heavy gases in atmosphere, various mathematical models and approaches, their limits, input parameters of modeling and examples of software tools are analyzed.

The practical part of the thesis is focused on the experimental research that was carried out within the DEGAS project and its main output, which was the creation of the eponymous module for modeling the spread and dispersion of heavy gases in atmosphere, which is part of the TerEx expert software tool. This part of the thesis is further focused on the analysis of the validity of the results of software modeling of the release of dangerous chemical substances and mixtures in the form of heavy gas through impact modeling of selected chemical accidents. The results of the modeling created

using the DEGAS module and the ALOHA software tool, which was used as a reference in this case, are compared with each other and with the real impacts of the accidents. Based on the results of the research carried out, a series of recommendations for the use of software modeling of the given phenomenon in the field of chemical safety, population protection and solving chemical accidents is established to support the determination of adequate measures.

RESUMÉ

Disertační práce je zaměřena na tematiku softwarových modelací úniku, šíření a disperze nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkých plynů v atmosféře. Jejím předmětem je vymezení problematiky chemické bezpečnosti s bližším zaměřením na softwarové modelace uvedeného jevu a validitu jejich výstupů i využitelnosti v daném tématu. Cílem práce je na základě realizovaného výzkumu v rámci projektu DEGAS, na který je práce navázána, stanovení doporučení různého charakteru pro využití výstupů softwarových modelací v oblasti chemické bezpečnosti a ochrany obyvatelstva. Pro účely práce jsou stanoveny čtyři dílčí cíle a tři hypotézy.

Teoretická část práce je zaměřena na komplexní vymezení problematiky chemické bezpečnosti, včetně možných havarijních projevů úniku nebezpečných chemických látek a směsí. Dále na vymezení těžkého plynu, způsobu jeho šíření v prostředí a faktorů, které tento proces ovlivňují. Následně jsou analyzovány možnosti softwarové modelace šíření a disperze těžkých plynů v atmosféře, různé matematické modely a přístupy, jejich limity, vstupní parametry modelací a příklady softwarových nástrojů.

Praktická část práce je zaměřena na experimentální šetření, které bylo realizováno v rámci projektu DEGAS a jeho hlavní výstup, kterým bylo vytvoření stejnojmenného modulu pro modelaci šíření a rozptylu těžkých plynů v atmosféře, který je součástí expertního softwarového nástroje TerEx. Tato část práce je dále zaměřena na analýzu validity výsledků softwarových modelací úniku nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkého plynu prostřednictvím modelace dopadů vybraných chemických havárií. Výsledky modelací vytvořených prostřednictvím modulu DEGAS a softwarového nástroje ALOHA, který byl v tomto případě použit jako referenční, jsou komparovány navzájem a s reálnými dopady

havárií. Na základě výsledků realizovaného výzkumu je stanovena série doporučení k využití softwarových modelací daného jevu v oblasti chemické bezpečnosti, ochrany obyvatelstva a řešení chemických havárií pro podporu stanovení adekvátních opatření.