

Charakteristiky oblaku těžkého plynu vzniklého jako důsledek chemické havárie

Characteristics of the Cloud of Heavy Gas Generated as a Result of Chemical Accidents

RNDr. Mgr. Petr Adolf Skřehot, Ph.D.^{1,2}

Ing. Jakub Marek¹

RNDr. Ing. Marcela Skřehotová¹

RNDr. Veronika Paučová, PhD.³

¹ERGOWORK s.r.o.

Raichlova 2659/2, 155 00 Praha 5

²Znalecký ústav bezpečnosti a ochrany zdraví, z.ú.

Divišova 235, 503 02 Pardubice

³ÚJV Řež, a.s.

Hlavní 130, Řež, 250 68 Husinec

ergowork@ergowork.cz, zuboz@zuboz.cz,

veronika.paucova@ujv.cz

Abstrakt

Události v Bhópálu nebo v Sevesu se nesporně staly přelomovými momenty, jež významně ovlivnily rozvoj bezpečnostního inženýrství. Obě měly jedno společné - došlo při nich k emisi oblaku těžkého plynu, který způsobil závažné ztráty. Obdobně nebezpečné mohou ale být i útočné systémy na bázi toxických plynů použité v uzavřených prostorách nebo na plochách menšího měřítka. Tyto nové hrozby vyvolaly potřebu zkoumat, pochopit a popsat procesy, které determinují chování těžkého plynu v reálných podmínkách. Jedná se o komplexní problematiku, která kromě technického přístupu vyžaduje také znalosti fyzikální chemie, fyziky atmosféry a numerických metod. Nezbytným předpokladem pro vývoj validního rozptylového modelu jsou také terénní testy, během nichž jsou navržené modelové situace ověřeny v reálných podmínkách. Řešením tohoto problému se zabývá výzkumný projekt „DEGAS“, jehož dílčí dosažené výsledky shrnuje tento článek.

Klíčová slova

Těžký plyn, rozptyl, modelování, atmosféra.

Abstract

Undoubtedly, the events in Bhopal and Seveso have become a groundbreaking moments, which significantly influenced the development of safety engineering. Both of them had one thing in common - by these events have occurred an emission of cloud of heavy gas, which caused serious losses. The offensive systems based on toxic gases used in confined spaces or in areas smaller scale can be similarly dangerous too. These new threats necessitate to explore, understand and describe the processes, which determine behaviour of heavy gas in real conditions. This is a complex issue, which in addition to the technical approach also requires knowledge of physical chemistry, physics and atmospheric numerical methods. Also field tests are prerequisite for the development of valid dispersion model, during which the proposed model situations verified in real conditions. The research project "DEGAS" is engaged in solution of this problem, whose partial achieved results summarizes this article.

Keywords

Heavy Gas, Dispersion, Modeling, Atmosphere.

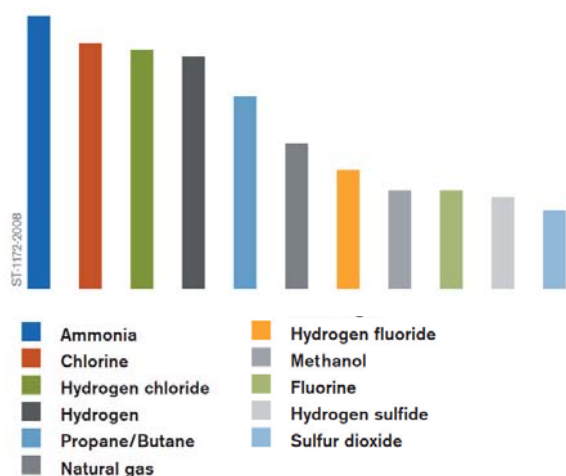
Úvod

Rozvoj lidské společnosti a s ním spojená vzrůstající intenzita aktivit hlavně na poli průmyslové výroby a dopravy vedou k velmi vážným dopadům na bezpečnost obyvatelstva i stav životního prostředí. Pro vyspělou civilizaci se tento problém stává problémem univerzálním, nezávislým na specifických podmínkách či na ekonomickém rozvoji společnosti. S přihlédnutím k chemickým haváriím proběhlým v nedávné minulosti si zvláštní pozornost zasluhují otázky týkající se uniků nebezpečných látek do ovzduší. Zejména události v Bhópálu nebo v Sevesu se v rozvoji bezpečnostního inženýrství staly přelomovými událostmi. Obě měly jedno společné - došlo při nich k emisi oblaku těžkého plynu, který způsobil závažné ztráty. Tyto situace nás ale poučily v tom, že je nutné důkladně pochopit a popsat procesy, které je utvářejí. Spolu s vývojem technických věd se postupně rozvíjely také nové směry ve výzkumu atmosféry. V rámci nich je problematika šíření těžkých plynů studována z pohledu fyzikálního a numerického. Integrace poznatků z těchto dvou oblastí je tak nezbytným předpokladem pro vytvoření uceleného pohledu na uvedený problém.

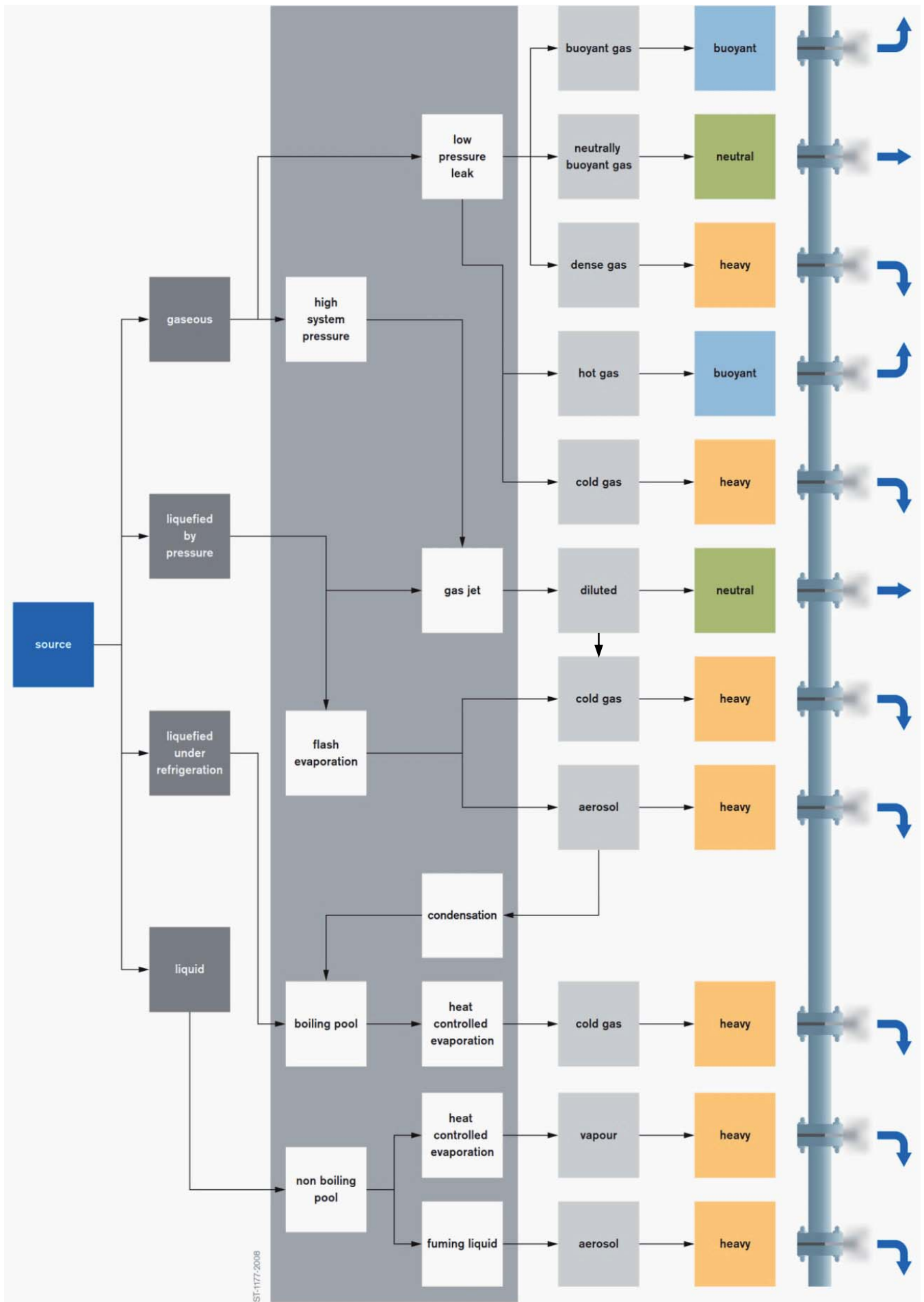
Vlastnosti těžkého plynu

Pojmem těžký plyn (Dense Gas nebo Heavy Gas) se označuje plyn, který má vyšší molekulovou hmotnost než vzduch ($28,96 \text{ g.mol}^{-1}$), anebo se nachází ve stavu, kdy má oproti vzduchu významně vyšší hustotu ($1,29 \text{ kg.m}^{-3}$). Z pohledu termodynamiky se tyto plyny označují jako negativně vznášivé (Negatively Buoyant Gas), neboť nepodléhají Gaussovskému rozptylu a často mívají také teplotně inverzní zvrstvení.

Podle databáze MARS je až 50 % závažných průmyslových havárií spojeno s uniky látek do ovzduší [7], z nichž 97 % vede ke vzniku oblaků těžkého plynu [4]. Nejčastěji se jedná o uniky amoniaku, chlóru a chlorovodíku, což jsou látky velmi reaktivní a toxické. Relativní zastoupení dalších látek při těchto událostech pak uvádí obr. 1.



Obr. 1 Přehled plynných látek podílejících se na závažných haváriích [7]



Obr. 2 Variantní scénáře úniků plynných látek skladovaných za různých podmínek [7]

Okolnosti, při kterých dochází k tvorbě těžkých plynů, přehledně ilustruje obr. 2. Na základě skupenství skladované látky, tlaku uvnitř zařízení a způsobu vzniku emise lze rozlišit celkem 11 různých scénářů, které vedou ke vzniku vznášivého (buoyant), neutrálního (neutral) nebo těžkého (heavy) plynu. U plynů zkapalněných tlakem nebo ochlazením dochází po jejich úniku ze zařízení k mžikovému odparu. Ten může nastat v podstatě trojím způsobem [1]:

- dvoufázovým únikem, kdy plynná fáze vzniká rychlým odpařováním tryskající kapalné fáze, jež se při průchodu únikovým otvorem třísťí na menší kapky,
- šampusovým efektem, kdy plynná fáze vzniká rychlým odpařováním povrchů bublin vznikajících varem tryskající kapalné fáze,
- rychlým výparem z kaluže vzniklé rozlítím většího množství kapalné fáze na zemský povrch.

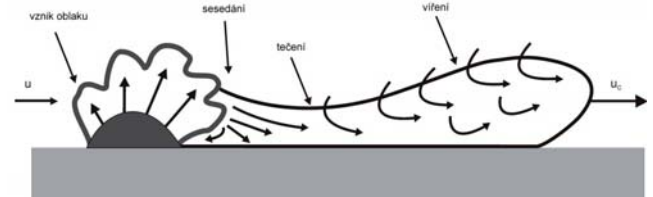
V případě, že je plyn skladován pod vysokým tlakem (nikoli ale ve zkapalněné formě), dochází při jeho úniku k uplatnění Jouleho-Thomsonova jevu. Ten způsobí ochlazení, které je o to větší, čím větší je rozdíl tlaků uvnitř zařízení a vně a dále čím větší je rychlost úniku (expanze plynu do prostoru). Tento proces jsme podrobněji popsali v našem předchozím článku, který byl publikován na konferenci na Štrbském Plese v roce 2015 [6]. Z výše uvedeného je zřejmé, že se jedná o záležitost značně složitou a závislou na mnoha parametrech. Jakkoli paušalizovat chování plynů unikajících z technologických zařízení tedy rozhodně nelze [1]. Pro účely modelování možných havarijních situací je nicméně nutné tento složitý problém určitým způsobem zjednodušit. Jednou z možností je rozdělení procesu rozptylu na několik částí, které jsou následně řešeny odděleně.

Jak již bylo uvedeno, typickou vlastností těžkých plynů je, že po svém vzniku klesají k zemskému povrchu, podél něhož se šíří a postupně rozptylují v ovzduší (viz obr. 3). Na základě empirických zkušeností lze tento kontinuální proces rozdělit do tří základních časových fází. První fází je „sesedání“. Ta nastává po té, kdy oblak ztratí počáteční hybnost danou únikem ze zařízení a vlivem gravitace klesne k zemskému povrchu. Po té následuje fáze „tečení“, kdy se oblak rozšiřuje do prostoru podél zemského povrchu a mnohdy i zatéká do nejrůznějších prohlubní. Za klidného počasí a při relativně rovinném, nepřilíš zdrsněném povrchu, může mít pohyb oblaku až laminární charakter. Tato situace ale ve skutečnosti nastává jen zcela výjimečně, neboť v reálné atmosféře se vždy uplatňují účinky turbulence.

Turbulentní proudění představuje poměrně složitou strukturu pohybu jednotlivých částic, kdy se jejich proudnice často vzájemně proplétají a mísí, a to zpravidla s výraznou časovou proměnlivostí až chaotičností [5]. Kovalets a Maderich [8] uvádějí, že za bezvětří je při fázi „tečení“ účinek turbulentní difúze překonán účinky gravitace, která se projevuje laterálním šířením těžkého plynu. Oblak se tedy rozšiřuje (roztéká) do stran podobně jako kapalina rozlité na podložku. Tento efekt se vysvětluje tak, že rozšiřování oblaku do stran dominují tíhové a vztlakové síly, zatímco turbulentní difúze se uplatňuje spíše při šíření oblaku ve směru převažujícího proudění nebo ve vertikálním směru. Má-li navíc oblak stabilní stratifikaci, dochází k potlačení turbulentního proudění až o 20 %. Oblak se tak drží při zemi a jeho povrch je více méně hladký. To se pozitivně projevuje nakonec i v rychlosti větru ve vrstvě nacházející se bezprostředně nad oblakem. Podle [8] je průměrná rychlost větru v této vrstvě až 1,3-krát vyšší než v případě, kdy oblak stabilní stratifikaci nemá. Tyto poznatky sice mohou pomoci při návrhu optimalizovaného rozptylového modelu, nicméně bez jejich ověření během terénních testů je nelze efektivně využít.

Konečně třetí a poslední fází je „víření“, během které dochází k postupnému naředění oblaku vzduchem a jeho následnému splynutí s okolní atmosférou. Zde se uplatňují zejména dynamické

silý způsobené mechanickými účinky větru, v menší míře pak i difúze působící ve směru koncentračního gradientu. Tuto fázi rozptylu významně ovlivňuje také stabilita atmosféry. I tato fáze vyžaduje experimentální ověření a to nejen za využití měřicí techniky, ale také časosběrného snímkování. To umožní odhalit pomyslnou mez, kdy oblak začne podléhat pasivnímu rozptylu.



Obr. 3 Jednotlivé fáze rozptylu oblaku těžkého plynu (u je rychlost větru, tj. vzduchu vstupujícího do oblaku a u_c je rychlost postupu čela oblaku) (upraveno podle [3])

Faktory ovlivňující rozptyl

Jak známo, na rozptyl jakékoli emise v atmosféře mají největší vliv meteorologické podmínky. Jedná se zejména o vanutí větru, vertikální teplotní gradient (tzv. stabilita atmosféry), teplotu a vlhkost vzduchu, atmosférický tlak, srážky a výšku, ve které se nachází případná inverzní vrstva. Rychlost větru, jakožto nejdůležitější parametr z uvedených, se ale účinkem tření vzduchu o zemský povrch s výškou mění. Tento fakt se výrazněji uplatňuje kupříkladu při rozptylu vertikálně mohutnějších oblaků, kdy přízemní část oblaku se již po několika sekundách od úniku ve svém postupu značně „opozďuje“ oproti jeho horním partiím. Pro výpočet rychlosti větru v závislosti na výšce se nejčastěji používá následující vztah:

$$u(z) = u_r \left(\frac{z}{z_r} \right)^p \quad (1)$$

kde z je výška nad zemí [m], pro kterou rychlost větru počítáme, u_r je rychlost větru [m.s⁻¹] v referenční výšce z_r [m] a p je index vztážený k místním podmínkám.

Nad stejnorodým terénem a za instabilních a neutrálních podmínek se vertikální profil rychlosti větru blíží logaritmické závislosti, kde jako proměnné vstupují výška a drsnost povrchu [9]. Tento vztah lze vyjádřit rovnicí 2.

$$u(z) = \frac{u_*}{\kappa} \ln \left(\frac{z}{z_0} \right) \quad (2)$$

přičemž

$$u_* = c_g u_g \quad (3)$$

kde je z_0 koeficient drsnosti povrchu [m] a u_* je dynamická (frikční) rychlost, která vyjadřuje zpomalování větru vlivem tření vzduchu o nehomogenity na zemském povrchu a κ je von Karmánova konstanta. Proměnná c_g je pak koeficient tření a u_g je rychlost geostrofického větru [m.s⁻¹], tj. rychlost, kterou by vítr měl, kdyby se neuplatňoval vliv terénních překážek (odpovídá rychlosti větru nad mezní vrstvou atmosféry).

V reálné atmosféře rychlost větru roste až do výšky přibližně 300 až 750 metrů nad zemí (300 metrů nad volnou rovinou a 750 metrů nad urbanizovanou nebo velmi členitou krajinou). Nad touto výškou se pak až k horní hranici mezní vrstvy (cca 1500 metrů) dále příliš nemění.

Výpočet rychlosti větru ve výšce podle rovnice 1 sice vypadá poměrně jednoduše, ve skutečnosti jej ale notně komplikuje neznalost hodnoty indexu p . Ta se obvykle pohybuje v rozmezí od 0 do 1, nicméně její stanovení je předmětem dlouhodobých sporů. Sám Lees [2] uvádí celkem čtyři různá rozpětí jeho hodnot a upozorňuje, že se jedná o parametr závislý na řadě proměnných,

jejichž vzájemné vztahy doposud nebyly jednoznačně popsány. Pro účely modelování následků mimořádných událostí se proto využívá zjednodušený vztah (viz rovnice 4), který odvodil Hanafusa a kol. v roce 1986. Jeho výhodou je, že je provázán s Pasquillovou-Giffordovu typizací stability atmosféry [17], jak ostatně dokládá tab. 1.

$$p_i = \frac{n}{2-n} \quad (4)$$

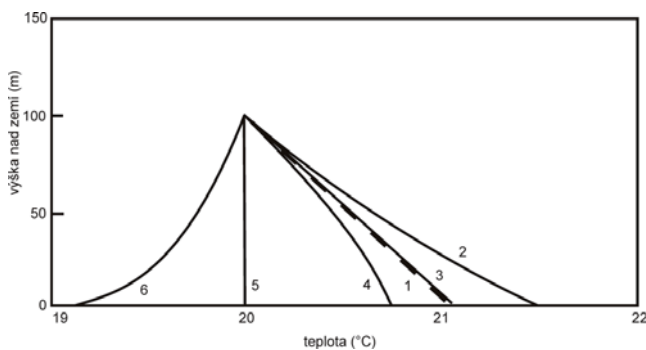
V uvedené rovnici je n tzv. meteorologický exponent, který přímo úměrně závisí na drsnosti povrchu. Jeho hodnota ale roste nejen zvětšující se hodnotou z_0 , ale také se zvyšující se stabilitou atmosféry [9].

Tab. 1 Hodnoty meteorologického exponentu n [10]

u , [m.s ⁻¹]	Vertikální teplotní gradient (°C na 100 metrů výšky), resp. třída stability	Průměrná hodnota meteorologického exponentu n
2	-0,2 (stabilní)	0,50
5	-0,6 (neutrální)	0,25
7	-1,0 (mírně instabilní)	0,20

Již zmíněná stabilita atmosféry, správněji řečeno vertikální gradient teploty, je ukazatelem vypovídajícím o tom, zda za daných podmínek vzduchové částice podléhají vzestupným nebo sestupným pohybům. Abychom získali informaci o teplotním zvrstvení atmosféry, je nutno změřit vertikální gradient teploty a ten následně porovnat s průběhem nasycené a nenasyčené adiabaty. Klesá-li teplota s výškou rychleji než teplota nenasyčené (suché) adiabaty, hovoříme o instabilním zvrstvení; klesá-li pomaleji než teplota nasycené adiabaty, hovoříme o stabilním zvrstvení a konečně, klesá-li tempem, které je mezi nasycenou a nenasyčenou adiabatou, hovoříme o neutrálním zvrstvení. To je stav, kdy je vrstva atmosféry instabilní pro nasycené vzduchové částice a současně stabilní pro částice nenasyčené.

Situace, které v reálné atmosféře mohou nastat, jsou znázorněny na obr. 4. Křivka 1 ukazuje vertikální profil teploty za adiabatických suchých podmínek (suchá adiabata); křivka 2 ukazuje super-adiabatické podmínky, které mohou být následkem silného slunečního záření nebo průchodem chladného vzduchu nad teplým povrchem, a které podporují konvekci a instabilitu; křivka 3 ukazuje neutrální podmínky, které jsou spojeny se zataženou oblohou a se středně silným větrem; křivka 4 ukazuje subadiabatické podmínky, které podporují stabilní zvrstvení; křivka 5 ukazuje izotermické podmínky, které jsou charakteristické pro výrazně stabilní zvrstvení; křivka 6 ukazuje inverzní podmínky, které potlačují konvekci.



Obr. 4 Vertikální teplotní profil pro jednotlivé meteorologické podmínky: 1 suché adiabatické podmínky, 2 instabilní zvrstvení, 3 neutrální zvrstvení, 4 stabilní zvrstvení, 5 izotermální stav a 6 inverzní podmínky [2]

Pro účely modelování rozptylu se používá šest tříd stability (označované písmeny A až F) navržených Pasquillem s Giffordem [11], které se určují na základě snadno zjistitelných projevů počasí. Jejich účelem je parametrizace rozptylových koeficientů, což jsou směrodatné odchylky vymezující stranový rozptyl oblaku v příčném, horizontálním a vertikálním směru.

Vedle atmosférických vlivů, o nichž bylo pojednáno výše, se při rozptylu látek v atmosféře uplatňuje i charakter terénu (místní topografie). Topografie každého bodu je reprezentována jeho souřadnicemi vztaženými k určité soustavě. Pro modelování rozptylu je hlavní vertikální souřadnice - výška. Drsnost povrchu má rovněž velký význam, což ostatně vyplývá i z dříve uvedeného. Povrch je aerodynamicky drsný, jestliže proud vzduchu pohybující se nad ním podléhá turbulencím, jejichž účinkem se následně stáčí směrem dolů, podobně jako je tomu u vln na moři. Terén tak klade proudícímu vzduchu odpor, což se projeví postupným snižováním jeho rychlosti v sestupném směru. Vrstva přiléhající přímo k zemskému povrchu se pak již prakticky vůbec nepohybuje. Tato skutečnost paradoxně není závislá na viskozitě, nýbrž na délce (vertikálním rozměru) nerovností nacházejících se na povrchu, jejich počtu a distribuci v prostoru. Délka nerovností se popisuje pomocí veličiny zvané koeficient drsnosti z_0 [m], který lze přibližně určit z rovnice 5.

$$z_0 = \frac{\varepsilon}{30} \quad (5)$$

kde ε je střední výška prvků nerovnosti na daném povrchu [m].

Pro výrazně zvlněné povrchy s množstvím překážek může být logaritmický vztah pro výpočet vertikálního profilu rychlosti větru (viz rovnice 3) rozšířen pomocí empirické modifikace na vztah popsaný rovnicí 6.

$$u(z) = \frac{u_*}{\kappa} \ln \left(\frac{z-l}{z_0} \right) \quad (6)$$

kde $u(z)$ je rychlost větru [m.s⁻¹] ve výšce z , u_* je frikční rychlost [m.s⁻¹], κ je von Karmánova konstanta a l je nulové rovinné posunutí [m], tj. výchozí úroveň, nad kterou se již neuplatňuje tření o povrch, a kde již nastává normální turbulentní výměna.

Ve zjednodušeném formátu (např. některých modelovacích software) je obvykle uvažováno pouze pět kategorií drsnosti povrchu:

- rovný volný terén,
- obdělávané pozemky, zemědělská půda, louky, pastviny,
- terén s řídké rozptýlenými menšími stavbami,
- obydlené oblasti a
- urbanizované, hustě obydlené oblasti s výškovými budovami.

Pro detailnější výpočty se ovšem používají konkrétní hodnoty koeficientu z_0 , které byly odvozeny na základě simulací nebo provedených terénních testů. Použití této veličiny nicméně předpokládá, že v cestě rozptylujícího se oblaku nestojí žádné výrazné terénní překážky, které by mohly ovlivnit charakter proudění vzduchu na větším měřítku (hory, kopce, údolí, apod.).

Závěr

Studium chování těžkých plynů v reálné atmosféře představuje velmi náročný a komplexní úkol. Složitost jeho řešení závisí jak na použitém přístupu, tak na dostupných empirických datech. Pro návrh funkčního rozptylového modelu, který má být cílem řešení projektu DEGAS, je proto nutné určit a v praxi ověřit standardní (očekávané) i okrajové (extrémní) podmínky. Mezi klíčové otázky, které v této souvislosti aktuálně řešíme, proto patří: 1) výběr vhodného stopovače, 2) návrh reprezentativních modelových situací, 3) stanovení vhodných podmínek experimentu a 4) diskuse vlivu možných nežádoucích externalit. Jelikož se jedná o značně širokou oblast, zaměřil se tento článek pouze na malý segment prováděného výzkumu. Pokusili jsme se v něm nastínit

složitost řešené problematiky a prezentovat teoretické přístupy, které poslouží jako východiska při vývoji matematického modelu. V letošním roce budou v laboratorních podmínkách prováděny simulační zkoušky chování těžkého plynu. V roce 2017 na ně naváže série terénních experimentů, jejichž cílem bude fyzikální ověření rozptylového modelu za reálných podmínek.

Poděkování

Výsledky publikované v tomto článku vznikly v rámci řešení výzkumného projektu TH01031098 „Validace a verifikace modelu šíření a disperze těžkého plynu za specifických situací (DEGAS)“, který je spolufinancován Technologickou agenturou ČR. Uvedený projekt řeší konsorcium společností T-SOFT a.s., ERGOWORK s.r.o., České vysoké učení technické v Praze - Fakulta biomedicínského inženýrství a ÚJV Řež, a.s. za odborného přispění Znaleckého ústavu bezpečnosti a ochrany zdraví, z.ú.

Použitá literatura

- [1] SKŘEHOT, P. [et al.]: *Prevence nehod a havárií: 2. díl: mimořádné události a prevence nežádoucích následků*. Praha: Výzkumný ústav bezpečnosti práce, T-Soft, 2009. 510 s. ISBN 978-80-86973-73-8. Dostupný na: <<http://www.portalbozp.cz/projekt/overeni-modelu-sireni-ucinku-ohrozujujich-udalosti/>>.
- [2] LEES, F. 1996.: *Loss Prevention in the Process Industries*. vol. 1. 2nd. ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1996. ISBN 0-7506-1547-8.
- [3] MARKIEWICZ, M. 2006.: *Models and Techniques for Health and Environmental Hazard Assessment and Management*. Warsaw: Warsaw University of Technology, The Faculty of Environmental Engineering, 2006. Mathematical Modelling of the Heavy Gas Dispersion, pp. 280-302.
- [4] ARIA [online]. Lyon: *Bureau for Analysis of Industrial Risk and Pollution* (BARPI). Dostupný na: <<http://www.aria.developpement-durable.gouv.fr/>>.
- [5] BEDNÁŘ, J.; BRECHLER, J.; FUKA, V.: Modelování atmosférické turbulence. *Vesmír* 91, 9. (2012). 498.
- [6] SKŘEHOT, P.A.; MAREK, J.; SKŘEHOTOVÁ, M.; PÍŠALA, J.: Náhled do problematiky těžkých plynů a modelování jejich rozptylu. In *Aktualne otázky bezpečnosti práce*: Recenzovaný zborník. Košice: Technická univerzita, 2015. ISBN 978-80-553-2302-2. Dostupný na: <http://www.zuboz.cz/wp-content/uploads/2015/10/Marek_konference-SK2015.pdf>.
- [7] *Gas Dispersion*. Draeger Safety AG & Co. KGaA. Dostupný na: <http://www.draeger.com/sites/assets/PublishingImages/Segments/ES/Oil-Gas-Industry/Plant-Safety-Operations/gas_dispersion_br_9046434_en.pdf>.
- [8] KOVALETS, I.V.; MADERICH, V.S.: *Numerical simulation of interaction of the heavy gas cloud with the atmospheric surface layer*, *Environmental Fluid Mechanics* 6 (4), 2006, 313-340.
- [9] MacDONALD, R.: *Tudory and Objectives of Air Dispersion Modelling, Modelling Air Emissions for Compliance: MME 474A Wind Engineering*. University of Waterloo, 2003.
- [10] URBAN, I. 1995.: *Hodnocení havárií spojených s výronem inhalačně toxických zkapalněných plynů a těkavých kapalin (nebezpečných škodlivin)*. Lázně Bohdaneč: Institut Civilní ochrany České republiky. 1995.
- [11] *ALOHA Computer Code Application Guidance for Documented Safety Analysis: Final Report No. DOE-EH-4.2.1.3-ALOHA Code Guidance* [online]. Washington D.C.: U.S. Department of Energy. 2004.