

# MODUL DEGAS – NOVÝ SOFTWARE PRO SIMULACI ROZPTYLU TĚŽKÉHO PLYNU

## DEGAS MODULE – NEW SOFTWARE FOR SIMULATING OF HEAVY GAS DISPERSION

SKŘEHOT, P.A. & MAREK, J. & SKŘEHOTOVÁ, M. & MELICHAROVÁ,  
M. & FRÖHLICH, T. & HON, Z. & STANĚK, M. & PAUČOVÁ, V.

### **Abstrakt**

*Modul DEGAS představuje hlavní výstup výzkumného projektu č. TH01031098. K jeho vytvoření ale bylo nutné realizovat řadu výzkumných aktivit, které umožnily získat klíčové vědomosti a poznatky potřebné k navržení vhodného rozptylového modelu, jeho validaci a následnému převedení do finální softwarové podoby. V rámci projektu byly provedeny také dva terénní experimenty, jejichž účelem bylo upřesnit matematické rovnice popisující zákonitosti rozptylu těžkého plynu za reálných podmínek. Po čtyřletém úsilí řešitelského týmu lze nyní konstatovat, že kýženého cíle bylo úspěšně dosaženo. Modul DEGAS ovšem není samostatným počítačovým programem, nýbrž novým členem skupiny simulačních modelů soustředěných v online aplikaci TerEx (Terroristic Expert). Ta je primárně určená pro příslušníky zásahových složek k rychlému vyhodnocování následků úniků nebezpečných látek. Tento článek blíže představuje modul DEGAS a popisuje východiska použita při jeho vývoji i postup jeho verifikace.*

### **Abstract**

*Module DEGAS represents the main output of research project No. TH01031098. However, it was necessary to carry out a number of research activities that enabled it to acquire the knowledge needed to develop a suitable scattering model, validate it and then transfer it to the final software version. Within the project, two field experiments were also carried out to clarify the mathematical equations describing the patterns of heavy gas dispersion under realistic conditions. After four years of research team efforts, we can now say that the desired goal has been successfully achieved. However, DEGAS is not a separate computer program, but a new member of a group of simulation models centered in the TerEx (Terroristic Expert) online application. It is primarily intended for emergency response personnel to quickly assess the consequences of releases of hazardous substances. This paper details the DEGAS module and describes the bases used in its development as well as its verification procedure.*

### **Klíčová slova**

*těžký plyn, rozptyl, software, modelování, prevence havárií*

### **Key Words**

*Heavy Gas, Dispersion, Software, Modeling, Accident Prevention*

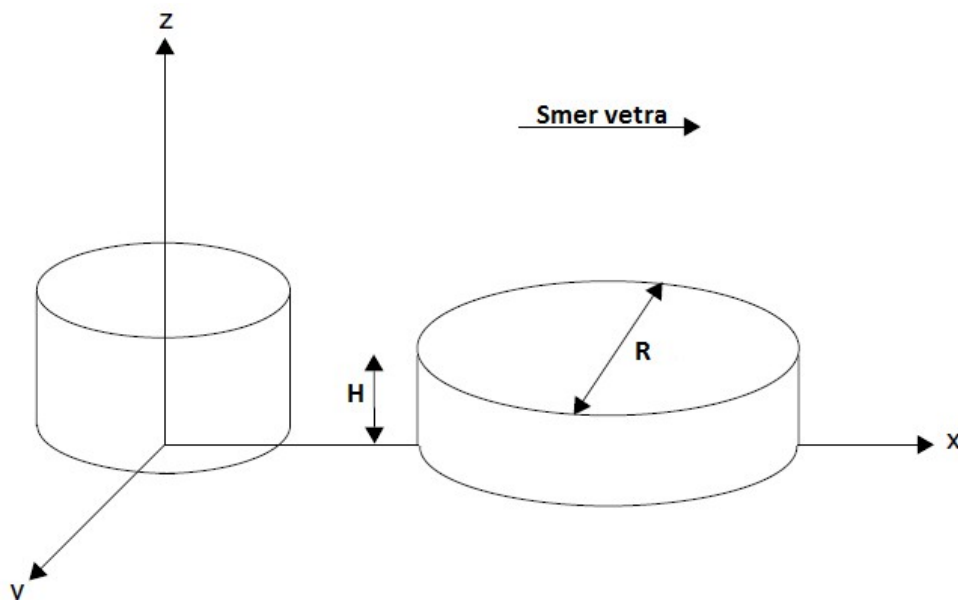
## Úvod

Po celou dobu řešení výzkumného projektu DEGAS, tj. od roku 2015, průběžně seznamujeme odbornou veřejnost s dosaženými výsledky a zajímavostmi (synergiemi), které tento projekt přinesl. V loňském roce jsme pozornost věnovali zejména terénním experimentům, jejichž cílem bylo ověřit charakteristiky rozptylu plynů těžších než vzduch. Jednalo se o dvě fáze – ověřovací testy (2016) [1] a ostré testy (2017) [2]. Rok 2018 nicméně představuje poslední etapu řešení a projekt tak spěje do finále. Plánovanými hlavními výstupy jsou SW nástroj DEGAS, odborná kniha a uspořádání závěrečného odborného workshopu. V tomto článku zaměříme pozornost na modelovací program DEGAS. Budou popsána východiska použitá při jeho vývoji a také postupy jeho verifikace. Představeny budou jeho některé funkcionality a také struktura online aplikace TerEx, do níž byl tento modul implementován.

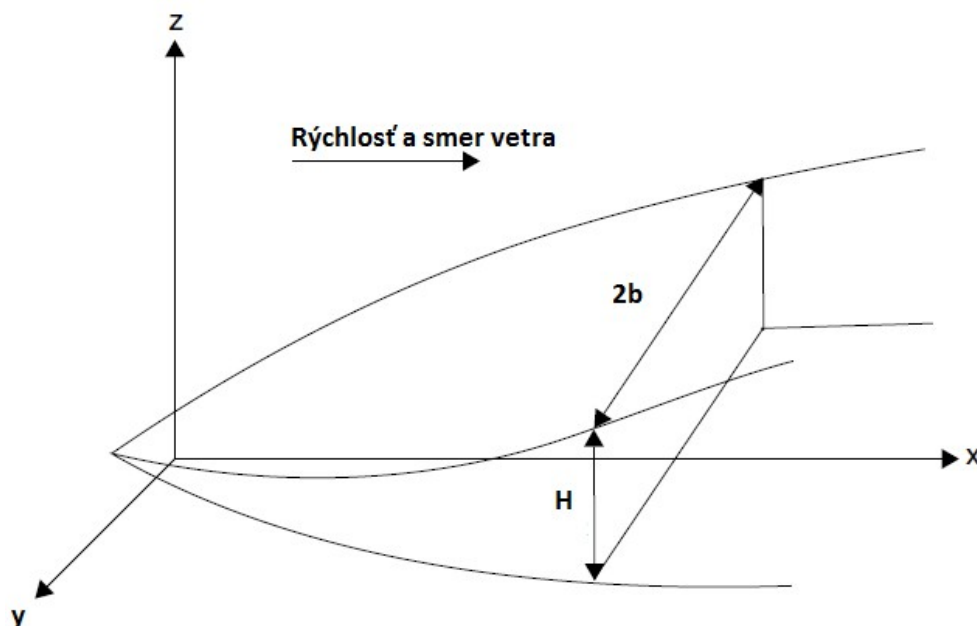
## Základní matematický aparát

Na základě zkoumání několika validovaných modelů určených pro simulaci rozptylu disperzí těžších než vzduch, byl jako východisko pro návrh modelu DEGAS použit matematický aparát modelu SLAB. Tento model, který patří do skupiny box modelů, vyvinula počátkem 90. let 20. století americká Lawrence Livermore National Laboratory, která jej také ověřovala v praxi.

SLAB dokáže modelovat šíření těžkého plynu pro několik možných scénářů úniku – jednorázový (okamžitý) únik, kontinuální únik, horizontálně nebo vertikálně orientovaný tryskový únik (jet) a odpařování kaluže. Šíření oblaku se graficky znázorňuje jako pohyb desky (anglicky slab) ve směru vanutí větru (obrázek 1 a 2). Deska je charakterizována vlastnostmi zprůměrovanými v horizontálním a vertikálním směru, tedy model je jednorozměrný.



Obr. 1: Princip box modelu pro okamžitý únik těžkého plynu [3].



Obr. 2: Princíp box modelu pro kontinuální únik těžkého plynu [3].

Matematický aparát tohoto modelu je založen na řešení šesti jednorozměrných diferenciálních rovnic, které zahrnují výpočty hybnosti ve třech směrech ( $x$ ,  $y$ ,  $z$ ), bilanci hmoty, energie a skupenského stavu unikající látky v čase. Výsledné hodnoty jsou pak prostorově zprůměrovány s přihlédnutím ke vstupním parametrům zdroje úniku. Model bere v úvahu také uplatnění gravitační síly, turbulentního promíchávání, difúze, tření postupujícího oblaku o zemský povrch a instability atmosféry v závislosti na horizontální advekci teploty a relativní vlhkosti vzduchu [3, 4]. V prvním kroku výpočtu jsou získány průběhy sledovaných vlastností oblaku, nikoli však koncentrace nebezpečné látky uvnitř oblaku. Profil objemové koncentrace je vypočítán až v dalším kroku, přičemž do výpočtu vstupují tzv. koncentrační funkce  $F_y$  a  $F_z$ , parametry oblaku (půl šířka oblaku, výška a tvar oblaku) a také celková hmotnost uvolněné látky.

## Popis softwarového modulu DEGAS

Vytvořený rozptylový model byl v podobě samostatného softwarového modulu DEGAS zapracován do internetové aplikace TerEx (Terroristic Expert), která slouží k vyhodnocení následků úniků nebezpečných látek. TerEx je nástroj, který je neustále rozvíjen, přičemž aktuálně obsahuje tyto dílčí moduly:

- PUFF – model pro simulaci jednorázového úniku vroucí kapaliny s rychlým odparem do oblaku.
- JET FIRE – model pro simulaci déletrvajícího masivního úniku plynu se zahořením.
- PLUME – model pro simulaci déletrvajícího úniku plynu do oblaku.
- PLUME – model pro simulaci déletrvajícího úniku vroucí kapaliny s rychlým odparem do oblaku.
- PLUME – model pro simulaci pomalého odparu kapaliny z louže do oblaku.
- POOL FIRE – model pro simulaci hoření louže kapaliny nebo vroucí kapaliny.

- BLEVE – model pro simulaci ohrožení nádrže plošným požárem s rizikem jevu BLEVE.
- PUFF – model pro simulaci jednorázového úniku plynu do oblaku.
- EXPLOSIVE – model pro simulaci účinků nástražného výbušného systému.
- SPREAD – model pro simulaci šíření nebezpečných prachových částic.
- SPREAD EXPLOSIVE – model pro simulaci šíření prachových částic v důsledku exploze.

Výše uvedené moduly (viz Obr. 3) patří do skupiny jednoduchých softwarových nástrojů, které jsou určeny pro stanovení bezpečných zón při havarijním zásahu. Nespornou výhodou TerEx je, že moduly DEGAS, SPREAD a SPREAD EXPLOSIVE představují původní a zcela originální software, které byly vytvořeny v rámci projektů aplikovaného výzkumu. Tyto moduly byly validovány a verifikovány jak prostřednictvím simulačních zkoušek, tak i pomocí provedených terénních testů.

Uživatelské rozhraní aplikace i charakter jejich výstupů z TerEx jsou jednoduché a intuitivní, což může být pro uživatele zvláště při stresových situacích výhodou. Program uživatele navádí ke zdárnému výsledku prostřednictvím jednotlivých dialogových oken obsahujících vysvětlivky. Výstupy prováděných simulací jsou prezentovány formou textu a jednoduché grafiky, které podávají informaci o dosahu zraňujících následků. Aplikace využívá těchto hlášení:

- Ohrožení osob toxickou látkou – podává informaci, do jaké vzdálenosti může dosáhnout koncentrace dané látky v ovzduší odpovídající hodnotě AEGL 3 (10 min). Jedná se o vymezení prostoru, v němž se předpokládá zamoření toxickou látkou do takové míry, že jedinci exponovaní po dobu 10 minut mohou být ohroženi na životě, případně i zemřít.
- Doporučený průzkum koncentrace toxické látky – podává informaci, do jaké vzdálenosti může dosáhnout koncentrace dané látky v ovzduší odpovídající hodnotě AEGL 2 (10 min). Jedná se o vymezení prostoru, v němž se předpokládá zamoření toxickou látkou do takové míry, že jedinci exponovaní po dobu 10 minut mohou zakusit nevratné nebo jiné vážné, dlouhotrvající nepříznivé zdravotní účinky nebo může dojít ke zhoršené schopnosti jejich úniku ze zamořeného prostoru.

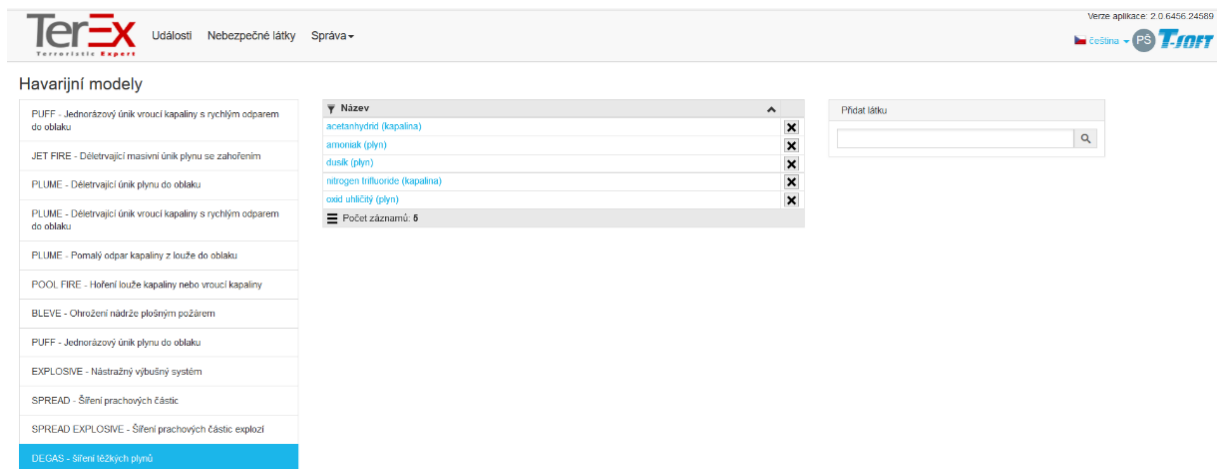
Zóna „Ohrožení osob toxickou látkou“ je v grafickém výstupu vykreslena v podobě kruhové výseče s modrým šrafováním a zóna „Doporučený průzkum koncentrace toxické látky“ pak jako modrý kruh se středem ve zdroji úniku.

Aplikace TerEx disponuje vlastní databází obsahující celkem 1014 nejčastěji používaných chemických látek nebo nebezpečných materiálů. Ke každé látce lze po kliknutí na tlačítko „Vlastnosti“ zjistit řadu cenných informací, jako například:

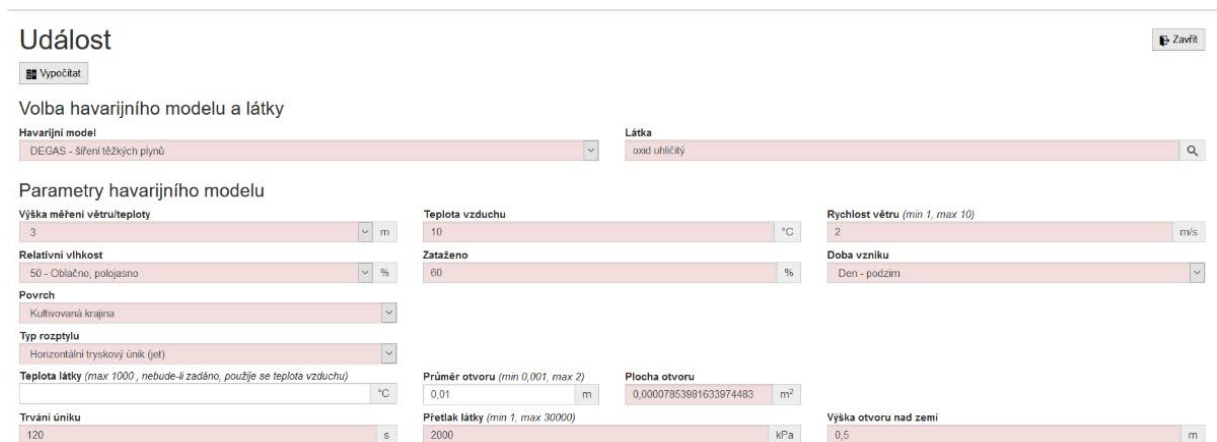
- Základní informace o dané látce (kódy, symboly nebezpečnosti apod.).
- Fyzikálně-chemické vlastnosti látky.
- Havarijní a toxické vlastnosti látky.
- Možné havarijní modely, které lze pro danou látku použít.
- Vlastní popis dané látky (např. zraňující projevy, první pomoc při zasažení danou látkou, hasební prostředky, způsob ochrany apod.).

Výsledky získané při modelování vybraných událostí pomocí aplikace TerEx lze poměrně snadno vyhodnotit a interpretovat. Pokud jde o kvalitu výstupů, pak v případě úniků látek, které se mohou chovat jako těžký plyn, se poskytované výsledky poměrně dobře shodují s výsledky z programu ALOHA. Jedná se tedy o vhodnou alternativu k tomuto programu. Na rozdíl od ALOHA je ale TerEx jednodušší pro ovládání a nevyžaduje tak široké spektrum vstupních dat (viz Obr. 4). Výstupy z aplikace TerEx jsou generovány v textové i grafické podobě, lze je uložit a exportovat do xls souboru.

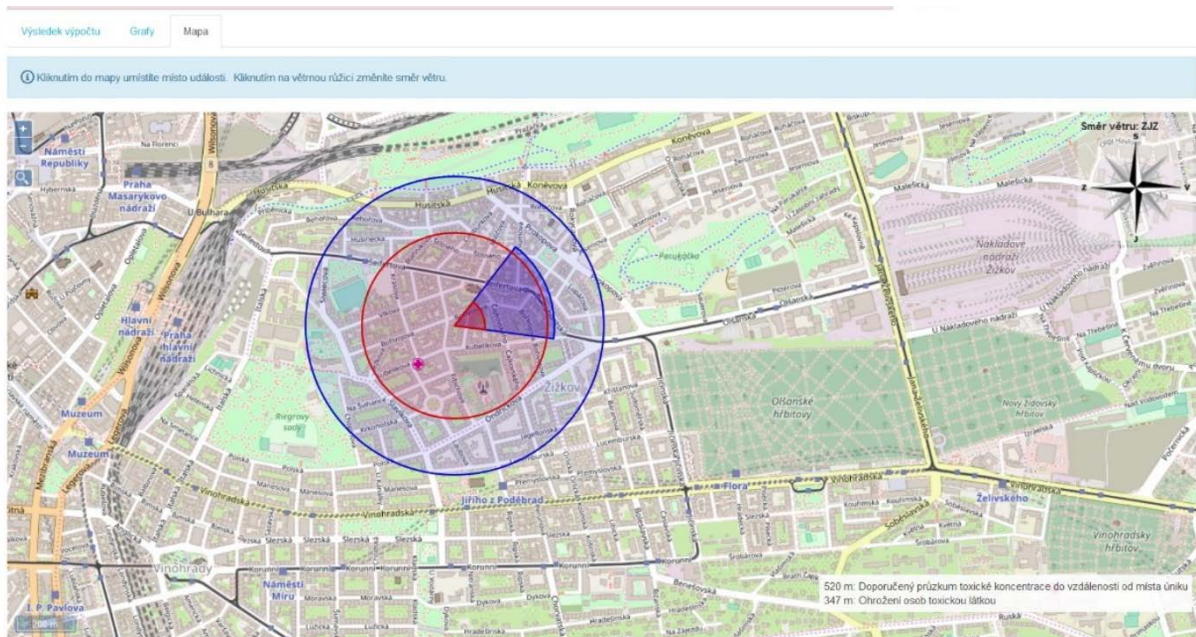
Součástí modulu DEGAS je i mapový podklad, jenž slouží k zobrazení modelované události v místě úniku (viz Obr. 5). Vzhledem k tomu, že mapový podklad umožňuje standardní operace, jako jsou vyhledávání podle adresy, zoomování nebo změna mapového podkladu např. na leteckou mapu, poskytuje pro uživatele názornou informaci o místě úniku.



Obr. 3: Ukázka základního rozcestníku v aplikaci TerEx pro volbu havarijních modelů.



Obr. 4: Dialogové okno pro zadávání vstupních údajů pro výpočet pomocí modulu DEGAS.



Obr. 5: Vizualizace výsledku modelování rozptýlení těžkého plynu pomocí modulu DEGAS přenesená do mapových podkladů.

## Validace a verifikace modelu

Jak již bylo uvedeno výše, základní matematický aparát modulu DEGAS tvoří soustavy rovnic použité ve výpočtovém modelu SLAB, které byly v rámci řešení projektu upraveny. Integrovaný matematický model SLAB byl syntakticky přeložen z prostředí Fortran a převeden do webového rozhraní. K zobrazení v aplikaci je použita Javascriptová knihovna OpenLayers, webová aplikace je psaná v jazyce .NET C# nad databází Postgres.

Základní model SLAB byl v rámci vývoje modulu DEGAS postupně validován tak, aby poskytoval přesnější výsledky. Nejprve byly upraveny rovnice popisující parametry zdroje úniku, k čemuž posloužily výsledky získané z provedených terénních testů. Poté byly upraveny také rovnice pro výpočet distribuce koncentrací v blízkém poli. Tato fáze validace byla velice náročná, neboť bylo nutné empiricky odvodit vztah pro výpočet disperzního koeficientu  $k_x$ , tedy koeficientu zpřesňující výpočet koncentrace uvnitř oblaku těžkého plynu ve směru vanutí větru (tj. podél osy  $x$ ).

Většina matematických modelů odhaduje koncentrace v blízkém poli (tj. ve vzdálenostech řádově desítek metrů od zdroje úniku) velmi nepřesně a SLAB není výjimkou. Z provedených experimentů je známo, že programy SLAB i ALOHA tyto hodnoty podhodnocují. V případě ALOHA bylo zjištěno, že v některých případech uváděla hodnoty až 5x nižší, než odpovídalo skutečnosti [5]. Jedná se tedy o oblast, kde standardní numerické modely selhávají. Důvodem je skutečnost, že se v těchto vzdálenostech oblak teprve formuje. Dochází k jeho sesedání a postupnému tečení podél zemského povrchu. Jeho rozptýl je dominantně ovlivňován hybností (setrvačností) unikající látky, termodynamickými změnami, působením gravitační síly a třecích sil. Jedná se tedy o značně komplikovaný fyzikální proces, který je pro vysoký stupeň nahodilosti jevů a nejistoty výsledků standardními matematickými postupy neřešitelný. Přitom ale právě v těchto vzdálenostech od místa nehody záchranáře nejvíce zajímají informace o koncentraci toxické látky. Musejí se totiž rozhodovat o tom, jak ochránit vlastní životy, zda mohou do zamořeného prostoru vůbec vstoupit, jak dlouho jim vydrží fungovat plynová maska a také zda je možné vůbec zamořeným prostorem evakuovat ohrožené lidi.

S ohledem na složitost výpočtu rozptylu těžkého plynu nepředstavuje disperzní koeficient univerzální konstantu, nýbrž se jedná o funkci závislou na mnoha proměnných. Pro jeho odvození je ale nutné řešený problém zjednodušit a disperzní koeficient vztáhnout pouze k jediné (a snadno zjistitelné) proměnné – vzdálenosti od zdroje úniku. Praktické stanovení disperzní funkce pak spočívalo v provedení série verifikačních zkoušek, při nichž byl použit základní model SLAB, dva modely pro program ALOHA (Gaussian model a Dense-Gas model) a modelu PLUME z aplikace TerEx a poznatky získané při reálné simulaci úniku oxidu uhličitého z mobilního zásobníku. Pro výpočet bylo vybráno 24 nejčastěji se vyskytujících látek<sup>a</sup>, pro které byly pomocí uvedených modelů spočítány hodnoty koncentrací ve vzdálenostech 50 m, 100 m, 200 m, 500 m a 1000 m ve směru vanutí větru. Vstupní parametry zdroje úniku, topografie okolí místa úniku a povětrnostní podmínky byly ve všech případech stejné.

Hodnoty získané z ALOHA a modelu PLUME byly následně pro každou látku a vzdálenost zprůměrovány a vyděleny hodnotou získanou ze základního modelu SLAB, čímž byla získána matice hodnot korekčních koeficientů. Po vynesení do grafu pak byly vizualizovány průběhy závislosti těchto korekčních koeficientů na vzdálenosti od epicentra úniku (Obr. 6). Z uvedených 24 látek pak byly následně vyloučeny tři látky (dikyan, ethylen a fluor), jejichž křivky vykazovaly výrazné odchylky od převažujícího trendu. Ze zbylých 21 látek pak byla interpolací odvozena disperzní funkce  $k_x = f(x)$ , která musela splňovat základní limitní podmínku (rovnice 1)

$$\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = 1 \quad (1)$$

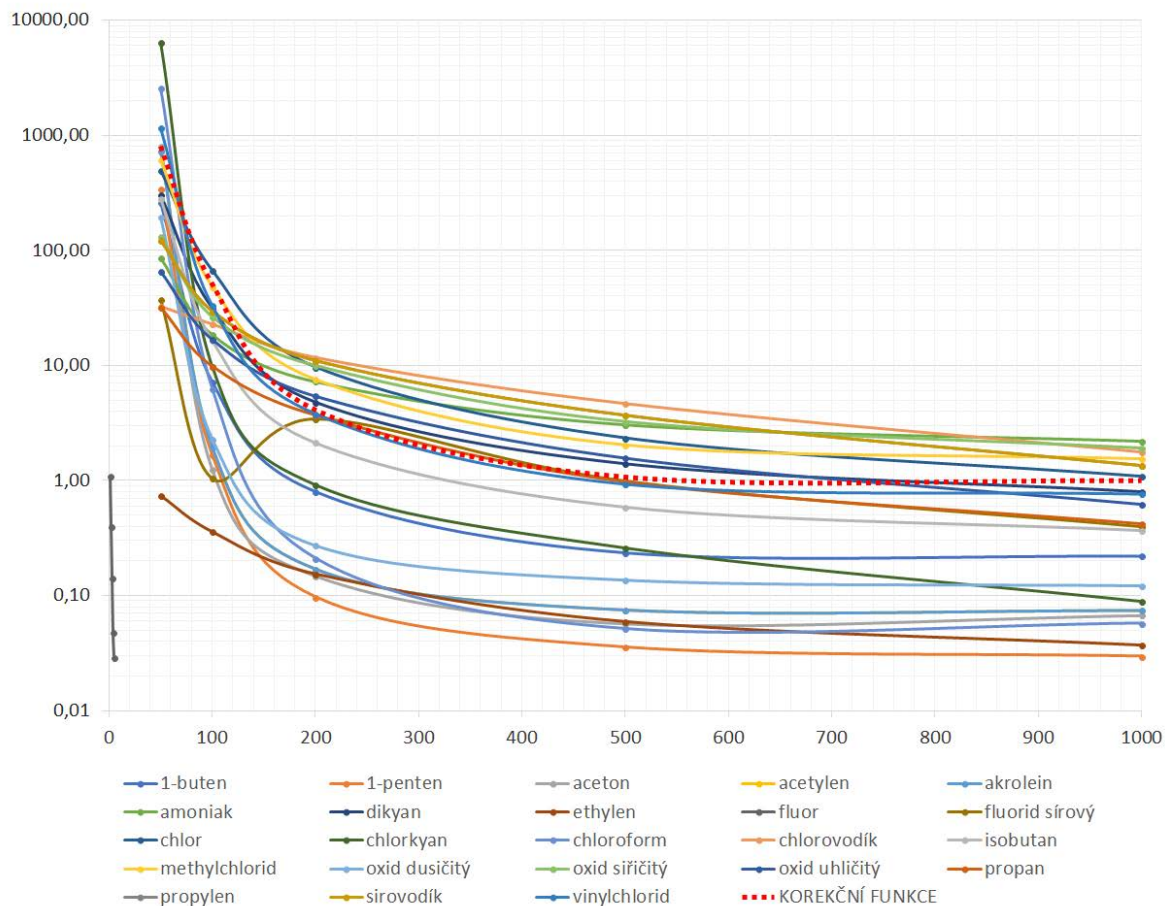
kde  $x$  je vzdálenost od zdroje úniku [m].

Poslední fází validace bylo ověření tohoto postupu pro použitý standard (oxid uhličitý), kdy byly vzájemně porovnány vypočtené koncentrace a koncentrace naměřené během terénního testu provedeného v Bečyni [2]. Na základě získaných poznatků byla navržená disperzní funkce upravena do následující finální podoby (viz rovnice 2).

$$k_x = (5 \cdot 10^9 + x^{-4}) + 1 \quad (2)$$

---

<sup>a</sup> Použity byly tyto látky: 1-buten, 1-penten, aceton, acetylen, akrolein, amoniak, dikyan, ethylen, fluor, fluorid sírový, chlor, chlorkyan, chloroform, chlorovodík, isobutan, methylchlorid, oxid dusičitý, oxid siřičitý, oxid uhličitý, propan, propylen, sirovodík a vinylchlorid.



Obr. 6: Závislost korekčního koeficientu na vzdálenosti od místa zdroje [m] pro vybrané látky a grafické vyobrazení výsledné korekční funkce.

## Závěr

Tento článek stručně představil nový softwarový modul DEGAS, který je hlavním výstupem stejnojmenného výzkumného projektu. Modul byl vyvinut za využití teoretických i praktických poznatků získaných během čtyř let řešení. Poslední fází vývoje programu bylo provedení verifikace modelu DEGAS. Jako srovnávací modely byly použity dva modely programu ALOHA (Gaussian model a Dense-Gas model) a model PLUME z aplikace TerEx. Celkem bylo do simulačních zkoušek použito 24 různých chemických látek, z nichž byly tři následně vyřazeny pro příliš velkou volatilitu výsledků. Bylo zjištěno, že pro vzdálenosti 50 metrů od zdroje úniku, nepřesáhla odchylka mezi výsledky DEGAS a ALOHA v deseti případech hodnotu 30 %, resp. ve čtrnácti případech nepřesáhla 50 %. Ač se tyto hodnoty mohou na první pohled zdát jako příliš vysoké, je potřeba upozornit, že modelování rozptylu těžkého plynu je procedura značně složitá, vyznačující se velkou mírou predikční nejistoty. Je zcela běžné, že se různé numerické modely dosti rozcházejí, přičemž v některých případech to může být až o pětinašobek [6]. Rozptyl výsledků  $\pm 50\%$  tudíž lze oprávněně považovat za poměrně dobrou shodu.



## Epilog

Řešení projektu DEGAS skončí k poslednímu dni letošního roku. To, že se jednalo o projekt zdařilý, svědčí nejenom dosažení hlavního plánovaného výsledku – softwarového modulu DEGAS, ale také více jak dvou desítek dalších (vedlejších) výstupů. Během let 2015 až 2018 bylo publikováno 16 odborných článků<sup>b</sup> (tři v časopisech s impakt faktorem [ $J_{imp}$ ] a třináct v konferenčních sbornících [D]), vydána byla souhrnná monografie [B], výsledky řešení se promítly do dvou výstupů legislativní povahy (nařízení vlády č. 32/2016 Sb. a ČSN 01 8003) [ $H_{leg}$ ], byl uspořádán odborný workshop a na domácích i zahraničních vědeckých sympoziích bylo odprezentováno přes deset aktivních příspěvků na související témata.

Poznatky získané řešením projektu byly také využity ve výuce na Fakultě biomedicínského inženýrství ČVUT v Kladně v oboru Plánování a řízení krizových situací. Nová teoretická fakta byla promítnuta zejména do výuky v předmětech Teorie rizik a Toxikologické aspekty chemických havárií a zneužití chemických zbraní. S novým softwarem DEGAS se od akademického roku 2018/2019 studenti nově seznamují v rámci povinných cvičení, při nichž si osvojí praktické dovednosti v modelování havarijních scénářů. S řešením projektu byla provázána také disertační práce s názvem „Možnosti modelace rozptylu a šíření těžkého plynu v rámci chemických havárií“ doktoranda Ing. Martina Staňka.

V průběžné prezentaci projektu hrála klíčovou roli konference Aktuálně otázky bezpečnosti práce. Jelikož se tato akce tradičně koná v závěru roku, využívali jsme ji k určitému bilancování a diskusi o dosažených výsledcích. S ohledem na složení auditoria nám zpětná vazba od účastníků poskytla mnoho cenných podnětů využitelných v našem dalším výzkumu. Ten se ale nyní nezadržitelně chýlí ke svému konci, takže na letošním XXXI. ročníku této konference tuto naši sérii příspěvků o projektu DEGAS uzavřeme. I když to může být vnímáno jako pomyslné rozloučení s projektem, s uvedeným tématem se náš řešitelský tým rozhodně loučit nehodlá. Problematika prevence závažných havárií představuje i nadále téma celospolečensky závažné, a tudíž se v této oblasti zcela nesporně nabízí perspektiva dalšího navazujícího výzkumu.

## 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.

## Literatura

- [1] SKŘEHOT P.A., MAREK J., MELICHAROVÁ M., HON Z. Ověření metodiky pro simulaci úniku technického plynu z přepravního svazku. In *Advances in Fire and Safety Engineering 2017, 2017, sborník příspěvků*. Trnava : Slovenská technická univerzita, 2017. ISBN 978-80-8096-245-6.

---

<sup>b</sup> Většina publikačních výstupů je v plné verzi dostupná na stránce <http://www.zuboz.cz/reference/publikace/>.

- [2] SKŘEHOT P.A., MAREK J., MELICHAROVÁ M., HON Z., CIVIŠ M. Zajímavosti z terénních testů provedených v rámci výzkumného projektu DEGAS. In *Aktuálne otázky bezpečnosti práce 2017 : Sborník příspěvků*. Košice : Technická univerzita v Košiciach, 2017. ISBN 978-80-553-2857-7.
- [3] ERMAK D.L. User's Manual for SLAB: An Atmospheric Dispersion Model for Denser-Than-Air Releases. UCRL-MA-105607. [online]. Lawrence Livermore National Laboratory. 1990. Dostupné z:  
<https://www3.epa.gov/ttn/scram/models/nonnepa/SLAB.pdf>
- [4] ZAPERT J.G. et al. Evaluation of Dense Gas Simulation Models. EPA-450/4-90-018. [online]. US EPA. 1991. Dostupné z:  
<https://www3.epa.gov/ttn/scram/userg/other/DenseGasEvaluations.pdf>
- [5] SKŘEHOT P.A., MAREK J., SKŘEHOTOVÁ M., PÍŠALA J., CIVIŠ, M. Projekt DEGAS – nejnovější poznatky a zajímavé synergie výzkumu rozptylu těžkých plynů. In *Aktuálne otázky bezpečnosti práce, 2016 : sborník příspěvků*. Košice : Technická univerzita v Košiciach, 2016. ISBN 978-80-553-3006-8.
- [6] TURNER D. Comparisons of Dense Gas Dispersion Models with Field Experiments. AristaTek. [on line] <http://www.aristatek.com/Newsletter/NOV08/TechSpeak.pdf>

### **Korespondenční adresa**

1. ERGOWORK s.r.o., Raichlova 2659/2, 155 00 Praha 5 – Stodůlky, Česká republika,  
e-mail: [ergowork@ergowork.cz](mailto:ergowork@ergowork.cz)

2. Znalecký ústav bezpečnosti a ochrany zdraví, z.ú., Ostrovského 253/3, 150 00 Praha 5-  
Smíchov, Česká republika, e-mail: [zuboz@zuboz.cz](mailto:zuboz@zuboz.cz)