

Modelování úniku a rozptylu nebezpečných plynných látek v atmosféře

Petr Skřehot, Radovan Říman

Výzkumný ústav bezpečnosti práce, v.v.i., Praha, Jeruzalémská 9, 116 52 Praha 1

e-mail: skrehot@vubp-praha.cz

Abstrakt

Zkušenosti ukazují, že velké havárie ale také menší provozní nehody na zařízeních obsahujících nebezpečně plynné látky anebo zkapalněné plyny mívají jedny z nejhorších následků na životech a zdraví lidí. Vážně poškozeny bývají také složky životního prostředí. Pro účinnou prevenci je kromě dobrého technického stavu zařízení a bezpečné manipulace s těmito látkami důležitá také znalost jejich fyzikálně-chemických vlastností, na kterých závisí chování látky v případě vzniku havárie. Při havarijním plánování nás totiž obvykle zajímají tři základní otázky: jak rychle bude látka za daných podmínek unikat ze zařízení, jak se bude rozptylovat v ovzduší a jaké dopady bude mít na životy a zdraví exponovaných osob. Aby bylo možné provádět příslušné výpočty, byly navrženy různé modely, které stručně shrnuje tento článek i s odkazem na některé proběhlé situace.

S nebezpečnými chemickými látkami pracujeme, skladujeme je a manipulujeme s nimi v uzavřených nádobách, zařízeních. Tato zařízení mohou být jak stabilní, tak i mobilní. Mezi stabilní jednotky patří například zásobníky, čerpadla, kompresory a jiné technologické části. Mobilními jsou pak železniční a automobilové cisterny a nákladní lodě. Samostatnou zvláštní skupinu zařízení pak představují potrubní systémy. Dojde-li k havárii na těchto zařízeních ve většině případů dojde také k úniku části nebo veškerého obsahu látek nacházejících se uvnitř. K úniku může dojít následkem:

- vzniku totální ruptury pláště zařízení,
- vzniku drobné ruptury v plášti zařízení,
- poškození přečerpávacích částí (ventily, hadice apod.),
- poškození přetlakových ventilů a odplyňovacích zařízení,
- drobných úniků při manipulaci s látkou anebo úkapy netěsnostmi.

Charakter úniku látek ze zařízení je podmíněn řadou faktorů, které zohledňují různé fyzikální modely, a které jsou dobře známé z inženýrské praxe (1). Výběr vhodného modelu pro daný typ uvažovaného úniku závisí na fázi látky (tj. zda únik je či není ve formě kapalné, plynné nebo dvoufázové) a podmínkách úniku. Typickým jednoduchým příkladem modelu úniku kapaliny je Bernouliova rovnice. Pro únik plynu by měly být použity složitější modely a měl by být učiněn rozdíl mezi případem úniku plynu rychlostí supersonickou (nadzvukovou – tj. za vysokého tlaku) a subsonickou (podzvukovou – tj. za nízkého tlaku). Jiným případem úniku v plynné fázi je únik z pojišťovacích ventilů, tj. ventilů specificky určených k tomu, aby odlehčily zvýšenému tlaku v zařízení a tak zabránily jejímu roztržení vlivem kritického přetlaku.

Modely úniku obvykle berou jako vstupy podmínky vně a uvnitř zařízení s látkou (např. tlak, teplota) společně s charakteristikami látky. Požadovány jsou také velikost, tvar a umístění únikového otvoru. Tato data se odvozují přímo z provozních podmínek zařízení a z úvah spojených se scénářem dané nehody. Výstupem výtokových modelů jsou charakteristiky, které zahrnují:

- vyteklé množství nebo hmotnostní rychlost úniku,
- dobu trvání úniku,
- formu unikající látky, tj. zda se jedná o kapalnou nebo plynnou fázi, nebo o mžikově se odpařující látku – dvoufázový výtok.

V odborné praxi se můžeme setkávat především s níže uvedenými druhy modelů, které popisují únik plynu ze zařízení, anebo jeho přestup z kapalné fáze do plynné. Jedná se o:

- kontinuální laminární únik plynu,
- kontinuální turbulentní únik plynu,
- jednorázový únik plynu,
- únik kapaliny (zkapalněného plynu) následovaný okamžitým varem,
- dvoufázový výtok,
- odpařování kaluže.

V okamžiku, kdy se plyn dostane ze zařízení do ovzduší, vznikne oblak, na který začnou působit síly snažící se mrak rozptýlit do okolního prostředí. Tuto fázi nazýváme rozptylem látky v atmosféře. V zásadě existují dva hlavní mechanismy rozptylu:

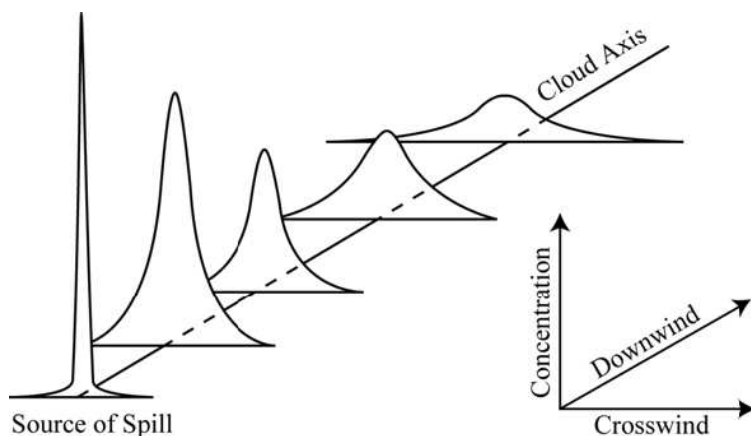
- vznášivý rozptyl (též pozitivně vzlínavý) – pro plyny, které jsou lehčí než vzduch; tyto oblaky jsou pasivně transportovány větrem a
- rozptyl plynů nebo směsí těžších než vzduch – v tomto případě existuje nejdříve klesavá fáze (negativní vzlínání), během níž je dominantní silou gravitace. Během této fáze vstupuje do mraku vzduch, který ho zahřívá a zředuje a tím ho činí lehčím. Po té nastává přechodná fáze následovaná pasivní rozptylovou fází, kdy je již hustota mraku významně nižší a mrak se stává lehčím než vzduch.

Pro fyzikální popis průběhu rozptylu plynů v atmosféře existuje mnoho modelů (1), které se dají rozdělit podle:

- chování vytvořeného mraku:
 - modely pro vznášivý rozptyl (pasivní modely neboli Gaussův rozptyl),
 - modely pro rozptyl těžkého plynu,
 - turbulentní modely
- trvání úniku:
 - modely pro okamžitý únik plynu (PUFF),
 - modely pro kontinuální únik plynu (PLUME),
- složitosti modelování:
 - jednoduché „box modely“,
 - složité 3D modely (berou v úvahu reliéf terénu).

Pro účely bezpečnostně-inženýrské praxe má rozhodující význam model Gaussův a model rozptylu těžkého plynu. S těmito modely se také nejčastěji setkáme i v nejrůznějších softwarových aplikacích (např. ALOHA apod.).

Gaussův model je určen pro modelování šíření plynů, které se ve vzduchu dobře rozptylují. Podle tohoto modelu, rychlost větru a turbulence představují hlavní faktory, které mají vliv na pohyb molekul uvolněného plynu, takže plyn se šíří ve směru větru a postupně se promíchává se vzduchem, anebo za bezvětří stoupá vzhůru. Podle Gaussova modelu, koncentrační profil každé látky má podobu zvonu (2), který se s časem mění (viz obr. 1).



Obrázek 1: Změna koncentrace látky v atmosféře podle Gaussova modelu rozptylu. Zdroj: ALOHA® - User's manual

V okamžiku úniku je koncentrace látky ve vzduchu velmi vysoká a pík je úzký, ale jak se uplatňuje rozptyl, postupně se rozšiřuje a zplošťuje (maximum klesá). Plocha pod píkem je úměrná množství uniklé látky. Za předpokladu, že by se neuplatňovala depozice, vymývání, vypršení nebo chemické reakce látky v atmosféře, zůstávala by tato plocha konstantní.

Na rozptyl l atky m a vliv i v yška zdroje, ze kter eho je l atka do atmosféry emitov ana. Pro v ypočet koncentrace l atky v bod e (x, y, z) lze v p r pad e kontinu ln ho  niku z vyzv yšen ho bodov ho zdroje o v yšce H pou it vztah:

$$c(x, y, z) = \frac{m}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \left[\exp \frac{-y^2}{2\sigma_y^2} \right] \left[\exp \frac{-(z-H)^2}{2\sigma_z^2} + \exp \frac{-(z+H)^2}{2\sigma_z^2} \right]$$

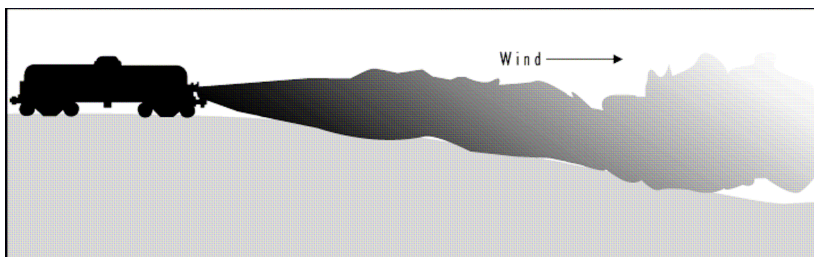
Pro okam it y  nik l atky m a pak rovnice tvar:

$$c(x, y, z) = \frac{M}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \left[\exp \left\{ -\frac{(x-ut)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2} \right\} \frac{-y^2}{2\sigma_y^2} \right] \left[\exp \frac{-(z-H)^2}{2\sigma_z^2} + \exp \frac{-(z+H)^2}{2\sigma_z^2} \right]$$

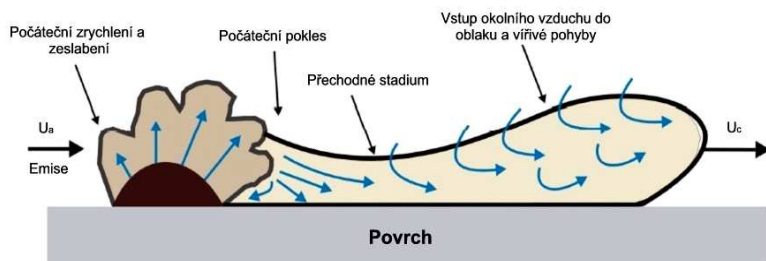
kde x, y, z jsou vzd alenosti od zdroje (x - po sm eru v tru, y - kolmo na sm er v tru, z - vertik ln ), c(x,y,z) je koncentrace l atky v bod e (x, y, z) [kg/m³], m je hmotnostn  rychlost  niku l atky [kg/s], u je rychlost v tru [m/s], H je v yška zdroje nad ter nem [m], σ_x , σ_y , σ_z jsou dva horizont ln  a jeden vertik ln  rozptylov  koeficient, M je mno stv i uvoln n  l atky [kg] a t je doba, kter a uplynula od okam iku  niku [s].

Plyn, kter y m a molekulovou hmotnost v tší ne  vzduch (cca 29 g/mol), vytvo r  po  niku ze zdroje plyn y oblak, kter y m a podle Archim dova z kona tendenci sesedat k zemi. Stejn  se chovaj  tak  plyny, kter  jsou leh i ne  vzduch (p i teplot  okoln ho vzduchu), ale kter  jsou uskladn ny v kryogenn m (podchlazen m) stavu. Po  niku ze za r zen  tento stav u nich trv a ale jen do okam iku, kdy jejich teplota stoupne natolik,  e se hustota sn z  pod 1,1 kg/m³, co  je hustota vzduchu za standardn ch fyzik ln ch podm nek.

V kr tk m  asov m intervalu od okam iku uvoln n  do atmosféry tedy mrak „t  k ho plynu“ propadne  i poklesne k zemsk mu povrchu a n sledn  se za ne pohybovat a rozptylovat na z klad  působen  proud n  vzduchu. Rychlost a sm er v tru jsou p itom dominantn mi prvky. Oblak se postupn  na ed uje a hustota plynu kles . To m a pozitivn  vliv na rychlost rozptylu. V okam iku, kdy hustota oblaku dos hne hustoty vzduchu, za ne se plyn rozptylovat podle Gaussova modelu. Odborn  prameny hovo r  (2),  e vyrovn n  hustoty oblaku s hustotou vzduchu nast v a p i objemov  koncentraci plynu rovnaj c  se 10 000 ppm, tj. 1%.



Obr zek 2:  nik l atky ze  elezni n  cisterny n sledovan y vytvo ren m mraku t  k ho plynu. Zdroj: ALOHA[®] - User's manual



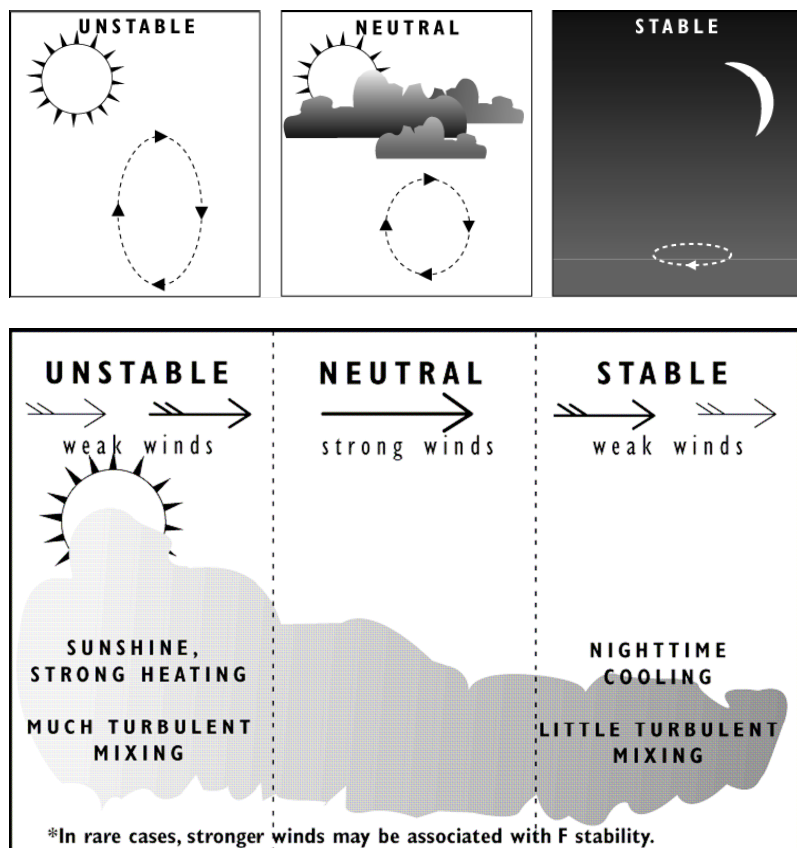
Obr zek 3: Uk zka r zn ch f z  p i rozptylu mraku t  k ho plynu. Zdroj: Publikace M.Markiewicz (9)

V p r pad  mal ch  nik  doch z  k vyrovn n  hustot ve vzd alenosti n kolika m lo metr  od zdroje; u velk ch  nik  to v ak m  e b t a  ve vzd alenostech stovek metr  ve sm eru v tru. V takov ch p r pad ch se j  v razn  uplatn je charakter okoln ho ter nu, kter  by m l b t proto v modelu tak  zohledn n (softwarov  aplikace toto

velmi dobře zvládají). Například údolí, kaňony, uliční zástavba měst a jiné uzavřené lokality ředění a rozptyl oblaku značně zpomalují.

Dominantní vliv na rozptyl látek v atmosféře má charakter proudění vzduchu a rychlost větru. Jejich vliv se uplatňuje ve všech fázích rozptylu, poněkud pak ve fázi pasivního rozptylu. Charakter proudění vzduchu je výrazně závislý také na stabilitním stavu atmosféry. Rozlišujeme tři základní stabilitní třídy:

- instabilní
- neutrální (indiferentní)
- stabilní



Obrázek 4: Charakter proudění a rozptylu mraku plynu při různých stabilitních podmínkách. Zdroj: ALOHA® - User's manual

Během instabilních povětrnostních podmínek se vyskytují největší turbulence. Instabilní povětrnostní podmínky se vyskytují tehdy, když slunce prohřívá půdu a vaky či kapsy teplého vzduchu stoupají vzhůru a mísí se v nižší vrstvě atmosféry – v mezní vrstvě. Za instabilních podmínek se oblaky plynů rychle promíchávají a poměrně rychle se snižuje přízemní koncentrace. Za těchto situací mohou být ale také plyny, jejichž zdroj je ve výšce, strhávány k zemi. Stabilní povětrnostní podmínky turbulence potlačují. Vyskytují se tehdy, když je půda chladnější než vzduch, typicky při klidných chladných nocích a časně z rána. Stabilní povětrnostní podmínky způsobují úzké, tenké oblaky a vlečky s vysokými koncentracemi a nízkým stupněm promíchávání. Vysoko plující obleky a vlečky mohou cestovat okolo, aniž by pod oblakem či vlečkou vznikaly vysoké koncentrace daných látek.

Pro účely modelování rozptylu znečišťujících příměsí v atmosféře navrhli Pasquill a Gifford členění sestávající ze šesti stabilitních tříd v rozsahu od A (extrémně instabilní) po F (extrémně stabilní). Třída D pak charakterizuje indiferentní zvrstvení. Obecně platí, že když je počasí stabilní (třídy E, F) nebo neutrální (třída D), pak se očekává, že uniklé látky budou putovat na delší vzdálenosti, než se jejich koncentrace významně sníží. Z tohoto důvodu se třídy stability D až F považují za „špatné“ povětrnostní podmínky pro rozptyl nebezpečných látek.

Rychlost přízemního větru [m/s]	Den			Noc	
	Dopadající sluneční záření			Oblačná pokrývka	
	silné	střední	slabé	> ½ oblohy	< ½ oblohy
< 2	A	A – B	B	E	F

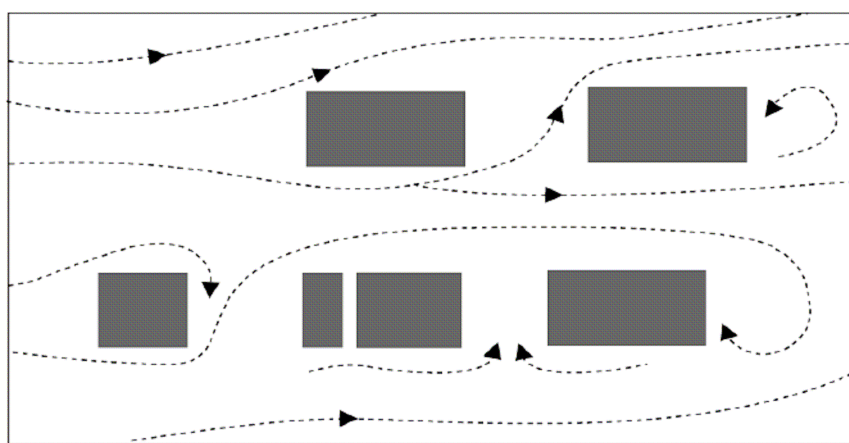
2 – 3	A – B	B	C	E	F
3 – 5	B	B – C	C	D	E
5 – 6	C	C – D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D

Tabulka: Určení třídy stability počasí podle vnějších podmínek

Důležitým parametrem, který se taktéž uplatňuje při rozptylu látek v atmosféře, je charakter terénu (místní topografie) a drsnost povrchu. Při modelování rozptylů je obvykle uvažováno pět základních kategorií drsnosti, které jsou charakterizovány konstantou nazývanou „délka aerodynamické nerovnosti“. Jedná se o tyto kategorie:

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

Tato konstanta vyjadřuje míru vlivu terénu na rozptyl oblaku plynu, která se uplatňuje v přízemní vrstvě, kde vznikají vlivem tření proudění o povrch drobné turbulence. Použití této veličiny předpokládá, že v nejbližším okolí zdroje nejsou přítomny žádné výrazné terénní překážky. Pokud tomu tak ale není, vznikají v proudění velké turbulence a nehomogenity (viz obr. 5), které není schopna většina numerických modelů řešit.



Obrázek 5: Vznik turbulencí a nehomogenit v proudění způsobených terénními překážkami. Zdroj: ALOHA® - User's manual

Nebezpečná plynná látka, která se šíří ovzduším, představuje velké riziko. Příkladem lze uvést několik historických událostí, u kterých bude stručně diskutováno, jaké modely je potřeba aplikovat na popis jejich úniku a rozptylu.

Za nejznámější a nejtragičtější událost v dějinách chemického průmyslu je považována havárie v indickém závodě společnosti Union Carbide (UCIL) v Bhópálu, která se stala během noci z 2. na 3. prosince 1984. Její příčinou bylo vniknutí vody do zásobníku obsahujícího 40 m³ silně toxického methylisokyanátu, který začal okamžitě bouřlivě reagovat, což vedlo k prudkému nárůstu tlaku. Následně došlo k proražení bezpečnostního ventilu a jedovatá látka začala proudem vytékat ven. Během hodiny takto uniklo mezi 20 a 30 tunami methylisokyanátu. Ačkoli se incident stal v uzavřené hale, přes to se látka dostala do venkovního prostředí. Hala byla totiž ventilována prostřednictvím třiceti metrového továrního komínu, který k rozptylu nebezpečné látky do volné atmosféry výborně posloužil. Jelikož methylisokyanát vykazuje velkou afinitu k vodě, došlo v ovzduší k jeho navázání na kapičky vodního aerosolu, kterých bylo díky zvýšené vlhkosti vzduchu dostatek. Vznikl tak toxický mrak, jež se šířil při zemi. Následkem této události zemřelo bezprostředně asi 3 000 lidí (v některých pracích se uvádí až 8 000 mrtvých), 50 000 osob bylo intoxikováno a na 200 000 lidí bylo nutné ihned evakuovat (3). Celkem bylo událostí (jakýmkoli způsobem) zasaženo okolo půl milionu lidí (4). Zóna mortality přitom sahala až do vzdálenosti 2,5 km od továrny a zraňující následky se vyskytly ještě o 1,5 km dále (3). Celkem byla plynem zamořena oblast o rozloze asi 25 čtverečních mil (65 km²) ve směru větru.

Únik methylisokyanátu probíhal podle modelu kontinuálního úniku kapaliny. Vzniklá kaluž kapalného MIC se rychle odpařovala, neboť teplota látky byla blízká teplotě varu za atmosférického tlaku. Šíření plynné fáze MIC po té probíhalo podle modelu těžkého plynu, neboť molární hmotnost MIC, resp. MIC navázaného na vodní kapičky, je vyšší než molární hmotnost vzduchu.

Další průmyslovou nehodou je známá havárie v továrně Icmesso v italském Sevesu, severně od Milána, kde se vyráběl pesticid označovaný jako TCP (5). Při výrobě vznikal jako vedlejší nežádoucí produkt i dioxin TCDD. V sobotu 10. 7. 1976 došlo v továrně k poruše chemického reaktoru, ze kterého během 20 minut unikly do ovzduší plyny obsahující možná až 20 kg dioxinu a vytvořily oblak o šířce asi 700 m a délce 5 km. V Sevesu byly následně vytýčeny dvě oblasti s vysoce nebezpečnými koncentracemi TCDD. V oblasti A (rozsah asi 1 km²) žilo asi 700 obyvatel a v oblasti B (rozsah asi 2 km²) žilo asi 5000 obyvatel. Přibližně 95 % uniklého TCDD zůstalo v oblasti A, z evakuovaných obyvatel více než 200 onemocnělo jaterními a ledvinovými chorobami. Bezprostředně po nehodě nezemřel naštěstí nikdo, došlo ale k rozsáhlým úhynům hospodářských zvířat a výrazně byly také poškozeny složky životního prostředí (defoliace rostlin).

Tuto událost lze modelovat jako kontinuální únik plynu. Pokud byl přetlak plynů uvnitř reaktoru větší jak 100 kPa, což je dosti pravděpodobné, byl tento únik turbulentní. Následovalo vytvoření mraku (molární hmotnost organických plynů obsahujících i TCDD byla vyšší jak molární hmotnost vzduchu), který vlivem gravitace klesl k zemi a šířil se podle zákonitostí platných pro model těžkého plynu.

Jiná událost, která je však statisticky mnohem pravděpodobnější i v našich podmínkách se stala 11. května 1976 v 11:08 ráno na nájedzu na dálnici U.S. 59 v Texasu (6). Došlo zde k vážné nehodě autocisterny dopravní společnosti „Transport Company of Texas“ převážející 7509 galonů (asi 19 tun) bezvodého čpavku. Událost se stala při jízdě po nájedzu spojující silnici I - 610 s dálnicí č. U.S. 59, kdy autocisterna zavadila o příčku mostní konstrukce. Návěs cisterny následně vybočil ze silnice, narazil do mostního pilíře nadjezdu, prorazil ochranná svodidla a zřítíl se z nadjezdu z výšky 4,5 metru na dálnici pod ním. Nárazem došlo k totální ruptuře pláště cisterny a k okamžitému úniku veškerého množství přepravovaného čpavku. Na následky události na místě zemřelo 6 osob, 78 osob bylo nutné pro silnou intoxikaci hospitalizovat a přibližně 100 dalších utrpělo lehčí zranění. Naštěstí se tato událost nestala v obydlené zóně podél trasy, kterou tato autocisterna pravidelně projížděla. Odborníky na krizové řízení však tato událost vedla k záměru provést odhad možných následků pro zmíněnou trasu, tj. ze Stanton Energy Center v Jacksonville do místa určení. Za pomocí programu ALOHA a za využití údajů o průměrné hustotě obyvatelstva v dané oblasti bylo zjištěno, že asi 655 lidí by mohlo být vystaveno koncentracím ERPG-3, tj. takovým koncentracím čpavku, které mohou po hodinové expozici vést až k přímému ohrožení života. Dalšími výpočty podle stejného postupu pak bylo odhadnuto, že by v takovém případě bylo nutné evakuovat nebo ukrýt více jak 13000 lidí v nejbližším okolí nehody.

V tomto případě došlo k jednorázovému úniku zkapalněného plynu a jeho par pod atmosférickým tlakem. Analytici proto pro výpočet rychlosti úniku použili model dvoufázového výtoku. Jelikož ta část kapalné fáze, která vytvořila na zemi kaluž, začala okamžitě vřít a vypařovat se (čpavek má teplotu varu za normálního tlaku – 33 °C), byl použitý model rozšířený o model úniku následovaný okamžitým varem kapalné fáze. Po vypaření vznikl mrak, který se za normálních okolností rozptyluje podle zákonitostí Gaussova modelu, neboť molární hmotnost čpavku činí jen 17 g/mol. V tomto případě ale analytici pro vysokou vlhkost vzduchu použili model rozptylu těžkého plynu. Důvodem je známá skutečnost, že čpavek se ve vodních kapičkách dobře rozpouští, čímž vzniká aerosol kapiček hydroxidu amonného (molární hmotnost 35 g/mol).

Poslední uváděná událost může být ukázkou nehody, se kterou se můžeme reálně setkat kdekoli na přepravních trasách (železnice, silnice) i u nás. Z poslední doby připomeňme například nehodu vlaků, která se stala dne 9. 2. 2007 ve 12:07 hod. poblíž Káranic na Královéhradecku (7). Zde se srazil rychlík R 957 s nákladním vlakem Pn 63440. Nákladní vlak přepravoval také cisternu se 44 tunami čpavku, která však zázrakem poškozena nebyla a zůstala stát na kolejích (viz obr. 6). Pokud by však v tomto případě k úniku nebezpečného čpavku došlo, následky by byly skutečně tragické.



Obrázek 6: Cisterna se čpavkem při nehodě vlaků 9. 2. 2007 u Káranic. Zdroj: <http://zpravy.idnes.cz>
Modelový náhled na podobu takové a celé řady jiných událostí mohou poměrně věrohodně poskytnout různé softwarové nástroje. Za zmínku stojí například vysoce ceněný program ALOHA, který je volně dostupný na webových stránkách americké agentury EPA (8).

Použitá literatura

- (1) Bumba J. a kol. (2005). Systém řízení bezpečnosti a havarijní plánování, materiály k distančnímu studiu, VÚBP.
- (2) The CAMEO[®] Software System, ALOHA[®] 5.4 (Areal Locations of Hazardous Atmospheres) (2006). User's manual, U.S. Environmental Protection Agency and National Oceanic and Atmospheric Administration.
- (3) Labunska, I. et al. (1999). The Bhopal Legacy: Toxic contaminants at the former Union Carbide factory site, Bhopal, India: 15 years after the Bhopal accident, Technical Note 04/99, Greenpeace Research Laboratories, Department of Biological Sciences, University of Exeter.
- (4) Mika O., Sabo J. (2004). Nejzávažnější chemická havárie 20. století, 112 – odborný časopis požární ochrany, IZS a ochrany obyvatelstva, č. 12.
- (5) S: Řiha M.: Nejzávažnější chemické havárie ve světě, popis průběhu a důsledků havárií v Bhopálu a Sevesu, Střední škola veřejnoprávní a Vyšší odborná škola prevence kriminality a krizového řízení Praha s.r.o., zdroj internet: <http://www.trivis.info/view.php?cisloclanku=2005123101>
- (6) Hazard analysis of anhydrous ammonia truck accident (2006). NTIS Report Number: PB-268251, zdroj internet
- (7) http://zpravy.idnes.cz/foto.asp?r=krimi&c=A070209_132757_krimi_pei
- (8) ALOHA[®] 5.4 (Areal Locations of Hazardous Atmospheres) (2006), U.S. Environmental Protection Agency and National Oceanic and Atmospheric Administration, zdroj internet: <http://www.epa.gov/swercepp/cameo/aloha.htm>
- (9) Markiewicz M.: Mathematical Modelling of the Heavy Gas Dispersion, zdroj internet: http://manhaz.cyf.gov.pl/manhaz/monography_2006_5/part02/4_M_Markiewicz_Mathematical%20Modelling%20Heavy%20Gas%20Dispersion.pdf