| | | |
|---|---|---|
| | **Specifické posouzení vysoce rizikových podmínek požární bezpečnosti s využitím postupů požárního inženýrství**<br>Kód projektu VG20122014074 | |
| Příloha č.<br>**8.3** | **VÝBUCHY** | |
| Datum vydání/aktualizace:<br>**05. 01. 2014/09. 07. 2014** | Počet stran:<br>**36** | Zpracovatel:<br>**M. Mynarz** |

# Obsah


Úvod ..... 2

1 Výbuch ..... 2

2 Hoření za konstantního objemu nebo tlaku ..... 3

3 Výbuchová křivka ..... 4

4 Parametry tlakových vln ..... 5

5 Přehled metod a postupů pro modelování výbuchu plynných směsí ..... 6

5.1 Obecný popis modelování výbuchů plynných směsí ..... 7

5.2 Empirické modely ..... 9

5.3 Fenomenologické modely ..... 15

5.4 Pokročilé CFD modely ..... 22

5.5 Shrnutí ..... 25

6 Metoda TNT ekvivalentu - aplikace ..... 26

6.1 Výpočet parametrů tlakové vlny ..... 27

7 Výpočtová aplikace ..... 31

Závěr ..... 33

Použitá literatura ..... 34

# Úvod

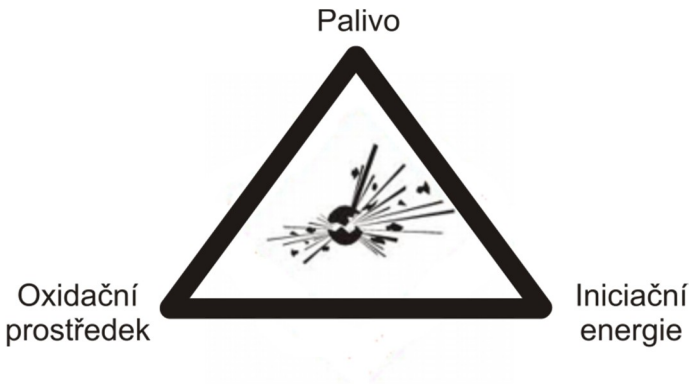
Havárie spojené s výskytem výbuchu se vyskytují od té doby, co lidstvo začalo používat jako palivo hořlavé kapaliny nebo plyny. Přítomnost hořlavých plynů může vyústit ve vnější nebo vnitřní výbuch. Znalost následků výbuchu hořlavých plynů v různých geometriích vzrostla především důsledkem mnoha domácích, ale především zahraničních snah. Nicméně s ohledem na všechny tyto znalosti může k havárii dojít a následkem mohou být úmrtí nebo vážná zranění osob a poškození zařízení a objektů.

Zkoumání účinků výbuchů, které jsou způsobené rychlými ději, jako jsou např. výbuchy hořlavých plynů nebo par, patří mezi jedny z nejnáročnějších inženýrských činností. Jejich řešení vyžaduje dostatečné odborné znalosti a současně praktické zkušenosti, na jejichž základě je možné stanovit předpoklady pro bezpečný návrh. Z tohoto důvodu je zapotřebí hledat postupy, které dokáží věrohodně popsat zatížení a následně i chování konstrukce. Předpoklady řešení a vstupní údaje se musí blížit skutečnosti a přitom musí být dostatečně jednoduché pro uživatele. Jedním ze způsobů, jak tyto předpoklady splnit, jsou empirické metody, konkrétně metoda TNT ekvivalentu.

# 1 Výbuch

Výbuch je náhlá oxidace nebo rozkladná reakce vyznačující se vzrůstem teploty, tlaku nebo vzrůstem obou těchto veličin současně. Vzniká tlaková nebo rázová vlna s potencionální energií, která je schopna konat práci na základě své expanze či stlačování.

Výbuch tedy představuje velmi rychlé hoření hořlavých látek. K výbuchu na bázi hoření může dojít všude tam, kde je v prostoru přítomna hořlavá látka ve směsi s oxidačním prostředkem, která je iniciována. Podmínky vzniku výbuchu znázorňuje obr. 1.




Obr. 1 - Podmínky vzniku výbuchu

Základní rozdělení výbuchů lze provést na jaderný (k uvolnění energie dochází přestavbou atomových jader), fyzikální (k uvolnění energie dochází změnou skupenství nebo hybnosti dané látky) a chemický (energie je uvolněna odpovídající změnou vazeb mezi atomy). Dle typu prostředí je možné chemické výbuchy dělit na výbuch kondenzované výbušniny, výbuch plynu, výbuch par hořlavých kapalin, výbuch prachových disperzí a výbuch mlh. Samozřejmě

mohou nastat jejich různé kombinace, v případě, že dojde k interakci jednotlivých výbušných souborů nebo látek. Výbuchy je dále možné dělit dle geometrie prostředí na výbuch ve volném prostranství (v neohraničeném prostoru), v ohraničeném prostoru, v částečně ohraničeném prostoru a v potrubí nebo tunelech (1D geometrie). Toto dělení ovšem není jednoznačné, poněvadž jeden druh výbuchu může přecházet v jiný.

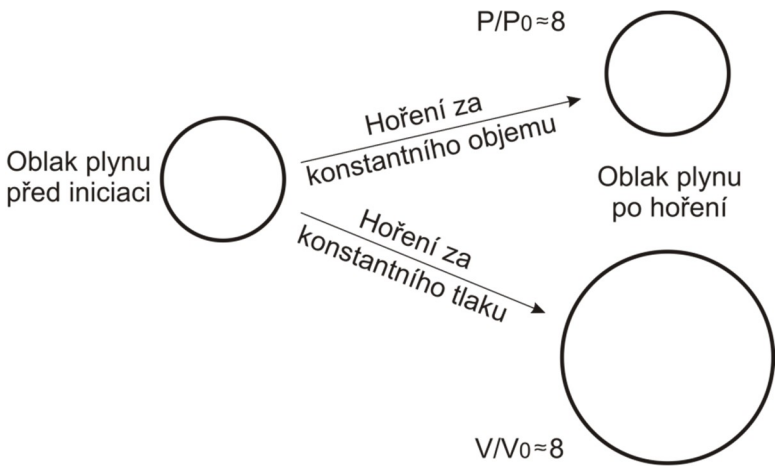
Výbuch může mít různou rychlost průběhu, a to od poměrně pomalého v řádu několika metrů za sekundu až k vysokým rychlostem několika tisíc metrů za sekundu. Rychlost výbuchu nezávisí pouze na rychlosti vlastní reakce, ale i na řadě dalších faktorů, jako jsou fyzikální podmínky, geometrie prostředí, druh iniciace, atd. Z tohoto hlediska lze výbuchy rozdělit na deflagrace, nestabilní detonace (přechod deflagrace do detonace) a detonace.

## 2 Hoření za konstantního objemu nebo tlaku

Při hoření promíchaného oblaku např. plynu se vzduchem dochází k nárůstu teploty produktů hoření (spalin). Ze zákona ideálního plynu:

$$\frac{p}{\rho \cdot T} = konst. \tag{1}$$

lze dovodit, že zvýšená teplota T způsobuje zvýšení tlaku p, nebo snížení hustoty ρ, čímž dochází k expanzi nebo kombinaci obou dějů, viz obr. 2.

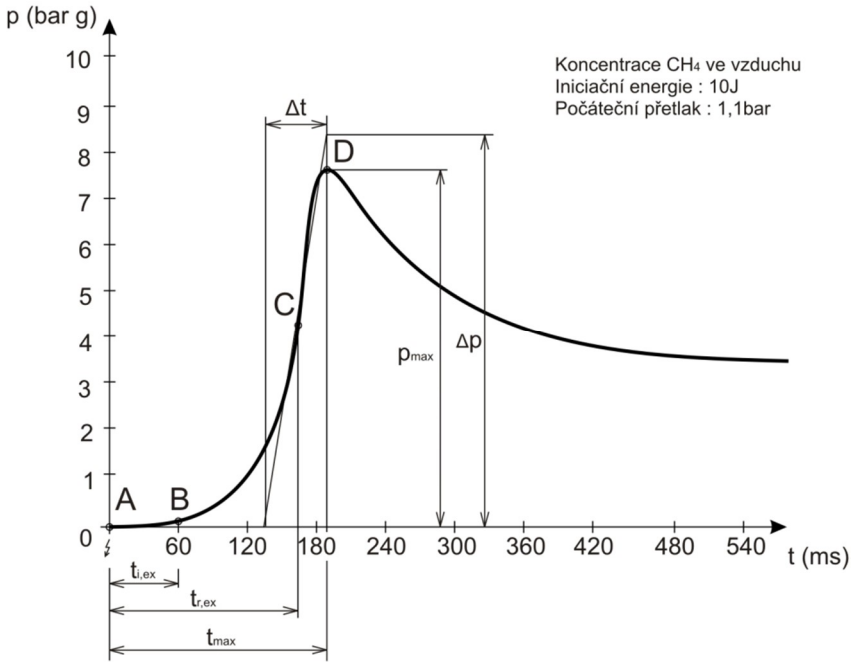



Obr. 2 - Hoření v konstantních podmínkách

Pokud je oblak plynu při stechiometrické koncentraci směsi dostatečně iniciován, při následném hoření dojde k nárůstu objemu, pokud se oblak plynu nachází v neohraničené oblasti, nebo tlaku, v případě, že směs se nachází v uzavřeném prostoru. Tyto změny jsou popisovány expanzním faktorem. Pro většinu uhlovodíků a vodík ve směsi se vzduchem je expanzní poměr roven přibližně hodnotě 8.

# 3 Výbuchová křivka

Po iniciaci výbušné směsi se v důsledku exotermické reakce hoření vyvíjí větší množství tepla, než které je odváděno. V uzavřeném prostoru se nárůst teploty projeví zvýšením tlaku. Časový průběh vývoje tlaku při výbuchu znázorňuje tzv. výbuchová křivka, viz obr. 3 [4].



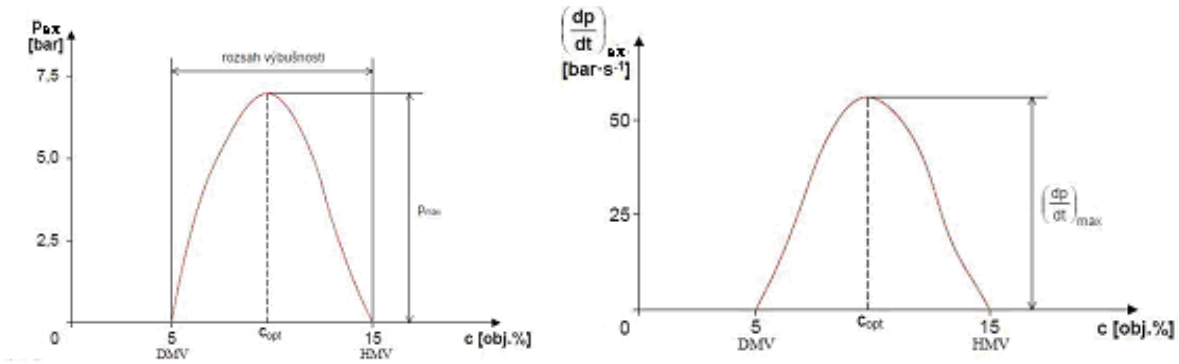

Obr. 3 - Výbuchová křivka směsi metanu se vzduchem

Po iniciaci v bodě A uplyne doba $t_{i,ex}$, než se projeví narůstání tlaku. Je to přípravná doba výbušné směsi k hoření, tzv. indukční perioda. Od bodu B dochází k narůstání tlaku a v důsledku zvyšování teploty se reakční rychlost zvyšuje až do bodu C. V bodě C je rychlost narůstání výbuchového tlaku nejvyšší. Od bodu C do bodu D se rychlost narůstání výbuchového tlaku zmenšuje v důsledku ubývaní reakčních složek až do bodu D, kdy je nulová. Od bodu D tlak klesá vlivem snižování teploty spalin a kondenzace par [4].

## *3.1 Výbuchová charakteristika*

Tvar výbuchové křivky, a tím také hodnoty výbuchového tlaku $p_{ex}$ a rychlost narůstání výbuchového tlaku $(dp/dt)_{ex}$, se výrazně mění s koncentrací výbušné směsi. Nejvyšších hodnot výbuchového tlaku a rychlosti narůstání výbuchového tlaku je dosaženo při optimální koncentraci $c_{opt}$, jak znázorňuje obr. 4. Tyto hodnoty se nazývají maximální výbuchový tlak $p_{max}$ a maximální rychlost narůstání výbuchového tlaku $(dp/dt)_{max}$.

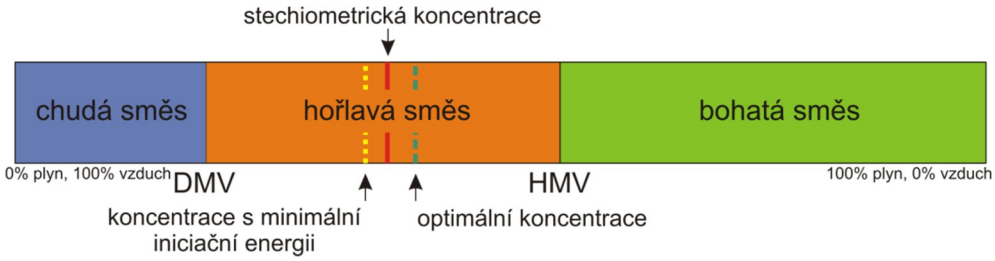
Se zvyšováním nebo snižováním koncentrace od $c_{opt}$ se výbuchový tlak i rychlost narůstání výbuchového tlaku snižují až k mezím výbušnosti [4]. Optimální koncentrace, při které má směs nejvyšší výbuchové parametry je u plynů o málo vyšší než stechiometrická.




Obr. 4 - Výbuchové charakteristiky směsi metanu se vzduchem

## 3.2 *Meze výbušnosti*

Meze výbušnosti ohraničují rozsah výbušnosti. Mimo tyto meze není možné samostatné šíření výbuchu ve směsi. Dolní mez výbušnosti DMV představuje nedostatek hořlavé látky ve směsi s oxidačním prostředkem. Nezávisí na množství kyslíku ve směsi. Naopak horní mez výbušnosti HMV představuje nedostatek oxidačního prostředku ve směsi, proto HMV silně závisí na podílu kyslíku ve vzduchu. Na obr. 5 je znázorněn rozsah výbušnosti (hořlavosti) směsi včetně významných koncentrací směsi.



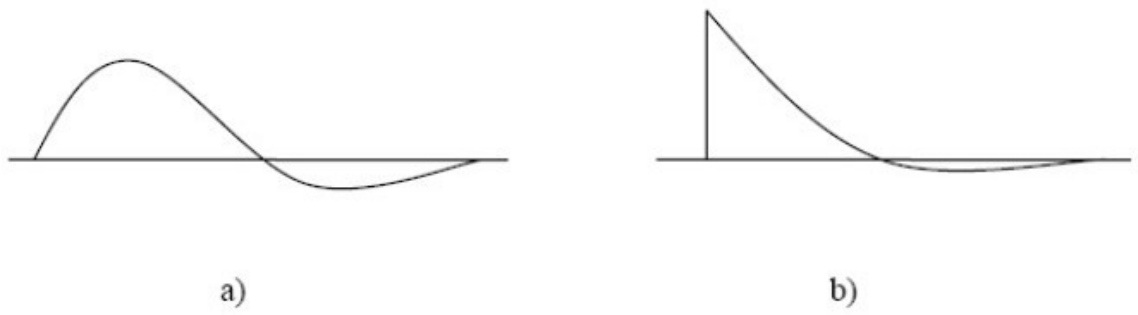

Obr. 5 - Rozsah výbušnosti (hořlavosti) směsi

Meze výbušnosti mají velký praktický význam a je důležité znát možné vlivy, kterými jsou tyto meze ovlivněny. Mezi nejvýznamnější vlivy lze zařadit velikost iniciační energie, počáteční tlak v okamžiku iniciace, počáteční teplotu, obsah kyslíku a vlhkost.

# 4 Parametry tlakových vln

Tlaková vlna je rychle se šířící vlna zhuštěného vzduchu v atmosféře charakterizovaná postupnou změnou tlaku, hustoty a teploty na jejím čele. Trajektorie šíření této vlny je ve směru od epicentra výbuchu a pohybuje-li se kontinuálním prostředím, pak její rychlost je ve všech směrech stejná [5].

Rozlišujeme dva základní typy tlakových vln, a to vlny spojité a vlny nespojité - rázové, viz obr. 6.




Obr. 6 - Průběh tlaků a) spojité vlny b) rázové vlny

Obecné vlastnosti rázové vlny v plynech mohou být popsány takto:

- rázovou kompresí roste teplota rychleji než při adiabatické isoentropické kompresi, kde z tlaku 1 bar na 30 bar stoupne teplota plynu asi o 450 °C, při stejném tlaku v rázové vlně stoupne teplota asi o 1300 °C. Je to způsobeno tím, že v rázové vlně se značná část mechanické energie nevratně přemění na teplo a současně roste entropie,
- hustota plynného prostředí působením rázové vlny roste pomaleji než při adiabatické isoentropické kompresi a při průchodu velmi silné rázové vlny limituje k určité hodnotě (asi dvacetinásobku počáteční hustoty),
- rychlost šíření rázové vlny v plynech je tím vyšší, čím je vyšší tlak na čele vlny a je vždy větší než rychlost zvuku v původním prostředí,
- relativní rychlost částic za čelem tlakové vlny jevům čelu menší než rychlost zvuku ve stlačeném plynu,
- v plynném prostředí přechází spojitá vlna vyvolaná deflagrací za určitou dobu ve vlnu rázovou,
- při velmi malých tlacích se rychlost rázové vlny blíží rychlosti zvuku v plynném prostředí [4].

# 5 Přehled metod a postupů pro modelování výbuchu plynných směsí

Pro výbuchy plynů existuje celá řada dostupných modelů - od empirických přes fenomenologické až po ty, které jsou založeny na výpočtové dynamice tekutin (CFD). Poslední jmenovanou kategorii lze rozdělit na dvě oblasti: "jednoduché" CFD modely (překážky malých rozměrů nejsou při řešení zohledňovány) a "pokročilé" CFD modely (všechny překážky jsou řešeny ve 3-D sítích).

Obecně při přechodu od empirických k pokročilým CFD modelům dochází k většímu propojení modelů s fyzikální podstatou zkoumaných dějů. Modely jsou tak schopny přesněji reprezentovat skutečnou geometrii a probíhající procesy, ale vyžadují vyšší nároky na výpočetní techniku a erudici při interpretaci výsledků. Modely v každé výše zmíněné kategorii obsahují řadu zjednodušení a předpokladů, což omezuje jejich možnost použití jako spolehlivého prediktivního nástroje mimo rozsah jejich validace s experimentálně zjištěnými

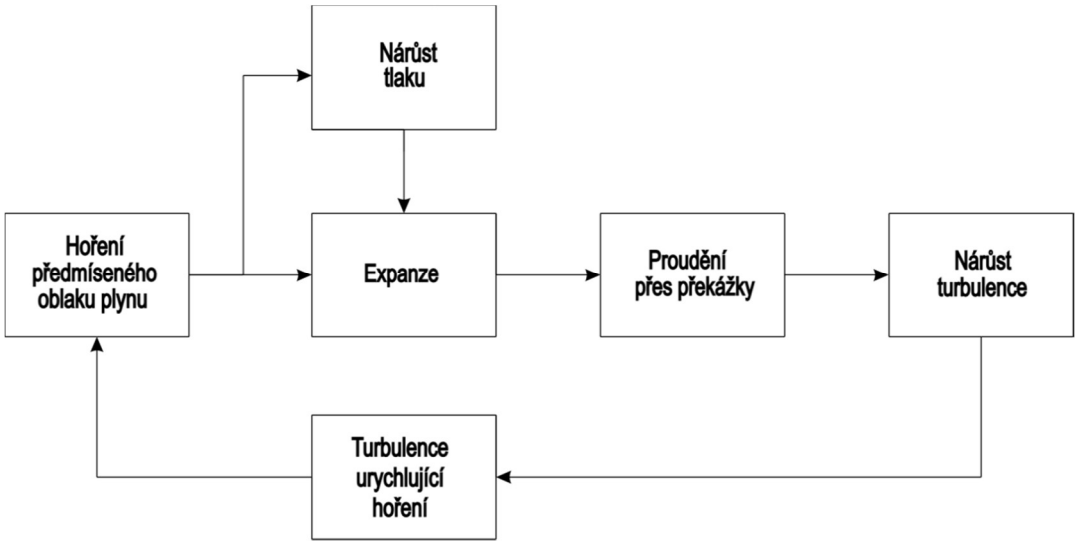
daty. Mnoho metod založených na CFD modelech výbuchových dějů používá poměrně hrubé aproximace modelované geometrie a spoléhá se na kalibrované podsíťové modely. Většina "jednoduchých" CFD modelů i některé " pokročilé" CFD modely běžně používané pro predikci výbuchu používají jednoduchá a již překonaná numerická schémata, a to jak v oblasti síťování, tak diskretizace modelů, která mohou vést k numerickým nepřesnostem.

Očekávaná přesnost od fenomenologických a "jednoduchých" CFD modelů je obecně dostačující, např. výsledky řešených modelů jsou srovnatelné s daty získanými z experimentů, ale co je důležité, platí to pouze pro scénáře, pro které byly parametry modelů vyladěny. To omezuje použitelnost těchto modelů jako spolehlivých prediktivních nástrojů.

## *5.1 Obecný popis modelování výbuchů plynných směsí*

Pokud je výbuchu plně ohraničen, tj. pokud nedochází k odlehčení nebo k tepelným ztrátám, pak bude hodnota generovaného přetlaku vysoká, a to až zhruba osmkrát vyšší, než byl původní tlak. Zvýšení tlaku je určeno především poměrem teplot spálených a nespálených plynů. Výbuchy v ohraničených, ale prázdných (bez překážek) oblastech jsou obecně charakterizovány nízkou počáteční úrovní turbulence, a tudíž i nízkou rychlostí plamene. Jestliže oblast obsahuje překážky, úroveň turbulence se při překonávání překážek zvýší, což způsobuje zrychlení plamene. Pokud ohraničený prostor je odlehčený, jak bývá často např. u stavebních objektů obvyklé, pak odolnost a plocha odlehčení budou faktory s rozhodujícím vlivem na generovaný maximální tlak.

Míra nárůstu tlaku je spojena s rychlostí plamene, která je zase funkcí turbulence. Generovaný přetlak neohraničené exploze je funkce rychlosti šíření plamene, která je spjata s úrovní turbulence v médiu (plynu), jehož prostřednictvím se plamen šíří. Při nárůstu rychlosti plamene se tlaková vlna generovaná zónou plamene postupně přetransformuje v rázovou vlnu s nárůstem rychlosti a energie. Pokud dojde k výbuchu v médiu s nízkou počáteční turbulencí v prostoru, který je plně ohraničený, a nejsou v něm žádné překážky, pak generovaný přetlak je velmi nízký. Pokud jsou přítomny překážky, tak při expanzi způsobené hořením prochází nespálený plyn přes překážky a generuje turbulence. Tím se zvýší rychlost hoření a s nárůstem plochy plamene dochází ke zrychlení procesu molekulární difúze a vedení tepla, což způsobí nárůst expanzního proudění, který dále zvyšuje turbulenci, viz obr. 7. Tento cyklus generuje vyšší rychlost hoření a zvýšení přetlaku.




Obr. 7 – Mechanismus výbuchu plynu [7]

Výbuchy jsou nežádoucí události. Modely, které zahrnují fyzikální popis výbuchových jevů, jsou dodatkem k experimentům při hodnocení rizik nebo při navrhování nebo posuzování omezení účinků výbuchu. Komplexnější modely mohou být použity v širokém spektru mimořádných situací za předpokladu, že poskytují přesnější výsledky [23].

Účinky výbuchu závisí na celé řadě faktorů, jako je maximální výbuchový tlak, doba interakce tlakové vlny s konstrukcí, atd. Tyto faktory závisí na mnoha proměnných, např.:

- druh paliva,
- stechiometrie paliva,
- zdroj iniciace a jeho umístění,
- odlehčení (umístění a velikost),
- počáteční úroveň turbulence,
- poměr zaplnění prostoru překážkami,
- velikost, tvar a umístění překážek,
- počet překážek,
- měřítko experimentu.

Reaktivita paliva má zásadní vliv na vytvoření přetlaku v dané geometrii. Nejméně reaktivní plyn je metan, zatímco acetylen a zejména vodík generuje velmi vysoké tlaky.

Stechiometrie oblaku plynu je rovněž důležitá. Chudé směsi produkují nižší přetlaky než bohaté nebo stechiometrické směsi. Mírně obohacené směsi, v oblasti optimální koncentrace, produkují nejvyšší přetlaky. Iniciační zdroj také ovlivňuje intenzitu výbuchu, tryskové nebo objemové iniciační zdroje vedou k vyšším přetlakům než rovinné nebo bodové zdroje. Umístění iniciace je také důležité. Musí však být posuzováno ve spojitosti s informacemi o geometrii prostoru, např. jak je prostor ohraničený nebo zaplněný překážkami. Ohraničení vede k nárůstu tlaku a ovlivňuje způsob šíření zóny plamene.

Odlehčení je jedním ze způsobů, jak snížit přetlak generovaný při výbuchu. Vhodně umístěné odlehčovací otvory mohou výrazně snížit účinky výbuchu. Exploze probíhající v klidném prostředí obecně povedou k nižším přetlakům než ty, které nastanou v prostředí turbulentního proudění. To je především způsobeno zvýšením rychlosti hoření vlivem proudění [15].

Poměr zaplnění prostoru je měřítkem toho, jak hustě je prostor, ve kterém dojde k výbuchu, zaplněný překážkami. Výbuchy v zařízeních s velkým poměrem zaplnění prostoru obvykle mají vyšší přetlaky než s poměrem malým. Nicméně velikost a tvar překážek jsou také důležitými faktory, které je potřeba brát v úvahu. Obecně platí, že pro daný poměr zaplnění prostoru generuje mnoho malých překážek vyšší tlaky než překážky větší v menším počtu. Navíc má umístění překážek rovněž vliv na výsledný tlak. S komplikovanější cestou plamene skrz řešenou oblast je generován vyšší tlak, poněvadž v důsledku turbulence dochází ke zvýšení rychlosti hoření. A konečně, velikost prostoru nebo měřítko experimentu je také důležitým faktorem. Velkorozměrové experimenty obecně přinášejí vyšší tlaky než experimenty v malém měřítku. Je velmi obtížné předvídat z experimentů v malém měřítku, jaké budou pravděpodobně tlaky ve skutečných rozměrech [20].

V ideálním případě by mělo být riziko výbuchu uvažováno ve fázi projektování, ale z různých důvodů to nemusí být vždy možné. Výzkumy procesu výbuchu skládající se z experimentů v interakci s matematickým modelováním by snad mohly vést k lepšímu porozumění těchto dějů. V případě nehod pak bude možné odpovědět na otázky typu, proč k nehodě došlo a jak mohou být účinky výbuchu minimalizovány, případně zdali nebezpečí výbuchu může být zmírněno nebo zcela eliminováno. Ve většině případů je zapotřebí prošetřovat velké množství scénářů, což je jeden důvod pro vývoj a používání modelů různého stupně složitosti.

## *5.2 Empirické modely*

Empirické modely jsou založeny na korelaci dat získaných z experimentů. Níže popisované modely představují výběr všeobecně používaných metod v průmyslu pro stanovení a posouzení možných rizik.

**Metoda TNT ekvivalentu**

Tato metoda je založena na předpokladu, že výbuch plynu se podobá výbuchu kondenzované výbušniny, jako například TNT, ačkoliv jsou mezi nimi značné rozdíly. Hlavním rozdílem je, že místní tlak při výbuchu plynu je mnohem nižší než při explozi TNT. Výbuch plynu se dále odlišuje pomalejším poklesem tlaku v přetlakové fázi výbuchu, než je tomu u kondenzovaných výbušnin. Nicméně tento model je v praxi značně rozšířen.

TNT ekvivalent lze pokládat za konverzní faktor, který vyjadřuje, jaká část dostupného spalného tepla je převedena na energie tlakové vlny. TNT ekvivalent vyjadřuje účinnost

procesu přeměny chemické energie, která je definována spalným teplem, na mechanickou energii působení tlakové vlny [7].

Postupů výpočtu je několik, tudíž pro názornost jsou zvoleny tři velmi jednoduché postupy. V prvním představeném modelu je dostupná energie při vyhoření oblaku plynu převedena na ekvivalentní hmotnost TNT dle rovnice (2). Pokud je hmotnost plynné směsi známá, pak mohou být výbuchové charakteristiky a možné účinky výbuchu odvozeny z velkého množství dat, která jsou dostupná z výbuchu TNT.

$$W_{TNT} = \alpha_e \cdot \frac{W_f \cdot H_f}{H_{TNT}} = \alpha_m \cdot W_f \,, \tag{2}$$

kde

$W_{TNT}$ je ekvivalentní hmotnost TNT (kg),

$\alpha_e$ je účinnostní faktor pro TNT ekvivalent založený na energii (-),

$W_f$ je hmotnost dostupné plynné směsi (kg),

$H_f$ je spalné teplo uvažované plynné směsi ($J.kg^{-1}$),

$H_{TNT}$ je výbuchová energie TNT ($J.kg^{-1}$),

$\alpha_m$ je účinnostní faktor pro TNT ekvivalent založený na hmotě (-).

Vztah mezi skutečnou hmotností uhlovodíků v oblaku plynu a ekvivalentní hmotností TNT při zanedbání geometrie vyjadřuje rovnice (3).

$$W_{TNT} = 10 \cdot \eta \cdot W_{HC} \,, \tag{3}$$

kde

$W_{TNT}$ je ekvivalentní hmotnost TNT (kg),

konstanta 10 vyjadřuje skutečnost, že většina uhlovodíků má až desetkrát větší výbuchovou energii (spalné teplo ve vztahu k výbuchovému teplu) než TNT (-),

$\eta$ je koeficient založený na zkušenostech (-),

$W_{HC}$ je skutečná hmotnost uhlovodíků (kg).

Pro vyjádření ekvivalentní hmotnosti TNT při stechiometrické koncentraci zemního plynu se zohledněním geometrie je dostupný vztah (4).

$$W_{TNT} = 0{,}16 \cdot W_{eff} \,, \tag{4}$$

kde

$W_{TNT}$ je ekvivalentní hmotnost TNT (kg),

$W_{eff}$ je minimální hodnota z celkového objemu ohraničeného prostoru nebo z celkového objemu oblaku plynu přepočteno na kg zemního plynu.

Použití metody TNT ekvivalentu však není nejvhodnějším postupem pro řešení problematiky výbuchů plynů. Výbuch kondenzované výbušniny (např. TNT) je z hlediska tvaru výbuchové křivky a doby trvání přetlakové fáze tlakové vlny špatným reprezentantem charakteristik výbuchu plynných směsí. Metoda TNT ekvivalentu je s mnoha připomínkami použitelná pro výbuchy plynů s intenzitou větší než 1 bar a pro vzdálené oblasti [7].

Výhodou metody TNT ekvivalentu je jednoduchost výpočtu. Nevýhodou metody je nedostatečná reprezentace „slabých“ výbuchů (mimo oblast stechiometrické nebo optimální koncentrace směsi). Mezi další nevýhody patří možnost získat informace pouze o přetlakové fázi tlakové vlny, složitost definovat skutečný bod iniciace, používání nespecifických koeficientů, a další.

**Metoda TNO – Multi Energy**

Metoda TNO se podobá metodě Multi Energy, která je popsaná níže. Tato metoda předpokládá, že veškerá přítomná energie hoření v hořlavé části oblaku přispívá k výbuchu. Pokud je zapotřebí definovat charakteristickou dobu exploze, tlakové parametry, maximální tlak a trvání pozitivní tlakové fáze v určité vzdálenosti od středu oblaku plynu, tak je lze odvodit z grafu. Na rozdíl od modelu TNT ekvivalentu tento graf zahrnuje účinek reaktivity paliva na výbuchové charakteristiky. Hlavní rozdíl mezi oběma metodami je ten, že metoda TNO předpokládá, že celý oblak páry nebo plynu přispívá k celkovému přetlaku, zatímco metoda Multi Energy předpokládá, že se výbuchu účastní jen jeho část v uzavřené nebo ohraničené podoblasti. Nevýhodou metody je komplikované posuzování několika ohraničených oblastí a nemožnost řešit složité geometrie [40].

Metoda Multi-Energy [6] může být použita pro odhad výbuchu plynu s proměnnou energií. Metoda předpokládá, že pouze ta část oblaku plynu, která je omezena nebo ohraničena, přispěje k výbuchu. Důvodem je, že u neohraničeného oblaku plynu při iniciaci dochází k pouze malému nárůstu tlaku. Přetlak roste s rostoucím ohraničení oblaku plynu. V podstatě je metoda založena na numerických simulacích tlakové vlny z centrálně umístěné iniciace směsi sférického oblaku s konstantní rychlostí šíření plamene. Existují dva parametry vstupující do modelu. Prvním parametrem je energie hoření vyjádřená bezrozměrnou vzdáleností od epicentra výbuchu, a to v ohraničeném oblaku plynu, definovaná rovnicí (5).

$$\overline{R} = R \cdot \left(P_0 / E\right)^{0,33}, \tag{5}$$

kde

$\overline{R}$ vyjadřuje bezrozměrnou vzdálenost od epicentra (m),

$R$ vyjadřuje skutečnou vzdálenost od epicentra (m),

$P_0$ je okolní (atmosférický) tlak (Pa),

*E* je celkové množství energie hoření (J), např. energie hoření vynásobená objemem $V_c$, kde $V_c$ je objem oblaku plynu v ohraničené oblasti.

Celkové množství energie pro stechiometrický poměr směsi uhlovodíků se vzduchem se s typem uhlovodíku významně nemění. Pro směs uhlovodíků se vzduchem může být celková energie hoření odhadnuta vztahem (6).

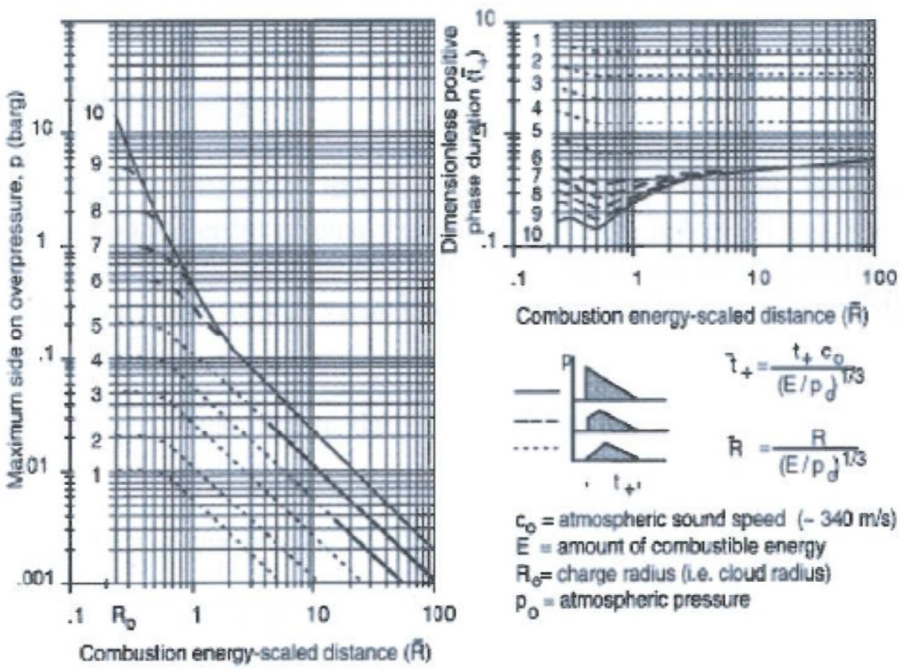
$$E \approx 3{,}5 \cdot V_c \,, \tag{6}$$

kde

*E* vyjadřuje celkové množství energie hoření (J),

$V_c$ je objem oblaku plynu ($m^3$).

Počáteční množství energie tlakové vlny závisí na počtu, typu a orientaci překážek stejně jako na reaktivitě paliva. Je důležité si uvědomit, že pouze omezené nebo ohraničené oblasti přispívají k výbuchu. Druhým parametrem je intenzita exploze, která může být odhadnuta s přihlédnutím k umístění zdroje výbuchu. Počáteční energie může být v rozsahu mezi 1 a 10, kde 10 znamená detonaci. Tyto dva parametry pak mohou být použity k získání bezrozměrného maximálního přetlaku a bezrozměrné přetlakové fáze výbuchu odečtením z diagramů, kde počáteční energie je reprezentována souborem křivek, viz obr. 8.




Obr. 8 – Model výbuchu plynů založený na energii směsi hořlaviny se vzduchem [6]

Výhodou metody je její rychlost a možnost aproximace mezi jednotlivými křivkami. Nevýhodou je obtížný odhad počáteční energie hořlavého oblaku plynu a obtížné stanovení přijatelné velikosti hodnoty pro celkovou energii hoření. Tato metoda není ideální pro „slabé“ výbuchy, tj. částečně ohraničená oblaka směsi. Rovněž je obtížné přesně definovat

složité geometrie a není zcela jasné, jak se vypořádat s několika ohraničenými oblastmi a vícenásobnými výbuchovými vlnami.

Ve světle výše uvedených nedostatků musí být volba počáteční energie výbuchu v ideálním případě založena na základě jiných simulací, experimentálních dat nebo na konzervativním předpokladu. Hodnota $V_c$ by měla být zvolena tak, aby zahrnovala celkový objem oblaku plynu. Nevhodně zvolená hodnota $V_c$ v mnoha případech může vést k nadhodnocení přetlaku, který je způsoben výbuchem [6].

**Metoda Baker-Strehlow**

Metoda Baker-Strehlow byla vyvinuta s cílem získání odhadů výbuchových tlaků při výbuchu oblaků plynů a par a je založena na podobných principech jako TNO – Multi Energy model. Tato metoda byla dále rozšířena dalšími autory [3]. Metodika výpočtu se skládá z několika kroků:

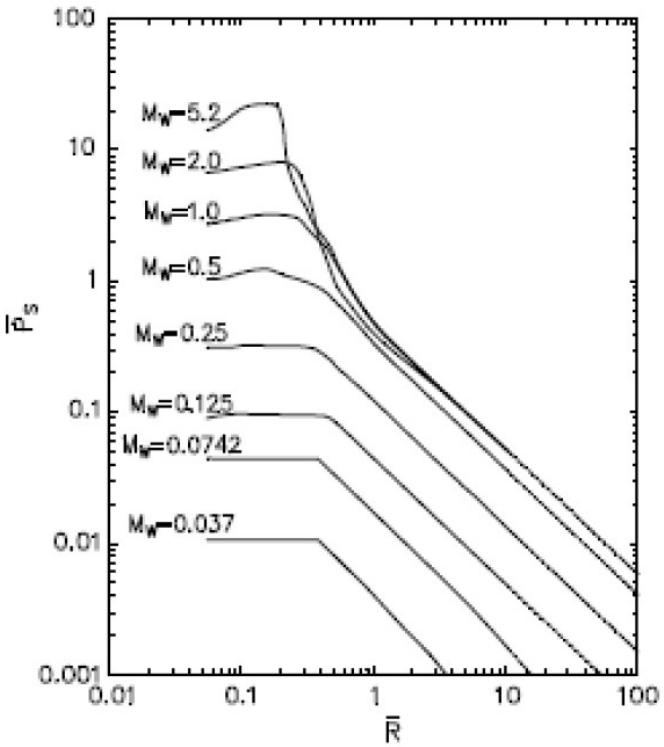
- identifikace potenciálních oblastí výbuchu,
- stanovení rozměrů uzavřených oblastí pro definování rychlosti plamene,
- výpočet rychlosti hoření směsi paliva.

Výbuchový tlak a impuls lze pak odečíst ze souboru grafů.

Výhodou metody je snadné a rychlé použití, bere v úvahu některé geometrické informace s ohledem na dělení prostoru a lze uvažovat i vícenásobnou iniciaci. Nevýhodou je její konzervativnost. Tato metoda je založena na zjištění bezrozměrného přetlaku a impulsu pozitivní fáze výbuchu v závislosti na energii bezrozměrné vzdálenosti od středu výbuchu oblaku plynu. Maximální rychlost šíření plamene je zjišťována při použití metody založené na reaktivitě paliva, stupni ohraničení a hustotě překážek. Metoda Baker-Strehlow pro výbuchy se sférickou geometrií si je do jisté míry podobná s metodou Multi Energy pro výbuchy s hemisférickou geometrií. V obou metodách je počáteční energie definována pro stechiometrický oblak plynu, který se nachází v celkově nebo částečně uzavřené oblasti. Rychlost šíření plamene pro metodu Baker-Strehlow nebo počáteční energie pro metodu Multi Energy je určena empirickým přístupem založeným na stupni ohraničení prostoru a na množství překážek v oblasti výbuchu, jakož i na vzdálenosti, která je k dispozici pro narůst rychlosti šíření plamene. Problémem metody Baker-Strehlow je stanovení rychlosti šíření plamene. Hodnota rychlosti šíření plamene se odhaduje na základě reaktivity látky a množství překážek, které šíření brání [38].

Hlavní rozdíl mezi oběma metodami je, že metoda Multi Energy používá grafické vyjádření mezi bezrozměrným přetlakem a energií hoření, resp. bezrozměrnou vzdáleností.

Křivky používané v metodě Baker-Strehlow jsou založeny na numerickém modelování konstantních rychlostí šíření plamene a nárůstu rychlostí plamene šířícím se sférickým oblakem par nebo plynu, viz obr. 9.




Obr. 9 – Graf závislosti bezrozměrné vzdálenosti na bezrozměrném přetlaku [36]

S využitím této metody je síla tlakové vlny úměrná rychlosti šíření plamene, která je reprezentována v podobě Machova čísla dosaženého v oblaku hořlavé směsi [3, 40].

**Metody „Venting guidelines“**

Odlehčení výbuchu je široce používaná technika zmírnění negativního dopadu výbuchů v technologických zařízeních a budovách. Zásadním problémem při odlehčení je návrh vhodné odlehčovací plochy nezbytné pro efektivní uvolnění přetlaku. Porozumění tohoto děje, při kterém je generovaný tlak výbuchu odváděn mimo objekt nebo zařízení, je nezbytné pro bezpečný návrh odlehčovacích prvků. Pochopení těchto dějů dává základ pro rozvoj prediktivních modelů [7].

Existuje řada empirických a poloempirických metod, které mohou být použity pro dimenzování odlehčení ohraničeného výbuchu [4, 5, 8, 12, 13, 26, 27, 28, 32, 33, 34, 35 a 43]. Většina z těchto metod byla odvozena z experimentálních dat naměřených v malorozměrových a středněrozměrových zařízeních (nádobách). Uplatňované vzorce jsou platné pouze v rámci rozsahu provedených experimentů. Aplikace běžně používaných metod pro výpočet plochy odlehčovacích prvků, kde poměr délky k šířce nebo průměru je větší než 3:5, může vést k vážnému poddimenzování požadované odlehčovací plochy [23, 29].

## *5.3 Fenomenologické modely*

Fenomenologické modely jsou zjednodušené fyzikální modely, které reprezentují pouze základní fyzikální děje při výbuchu. Hlavní myšlenka zjednodušení je, že skutečná geometrie se převede na modelovou geometrii. Obecně platí, že není možné namodelovat skutečnou geometrii, ale pouze idealizovaný systém, např. jednoduchou odlehčenou komoru obsahující určitý počet mřížek, které slouží ke generování turbulence. To je přijatelné přiblížení určitých typů geometrií (například ropných plošin), ale nemusí být dostačující pro složitější situace. Fyzikální podstata výbuchového děje může být popsána buď empiricky, nebo teoreticky. Fenomenologické modely z hlediska složitosti spadají někam mezi empirické korelace a CFD modely. V CFD modelech mohou ve skutečnosti být zahrnuty některé procedury fyzikálních dějů z fenomenologických modelů, ale nepochybně jsou schopné lépe modelovat libovolně složité geometrie. Doba výpočtu u fenomenologických modelů je krátká, v řádu několika sekund. Tento typ modelů se dobře hodí pro výpočet velkého množství různých scénářů, ze kterých pak mohou být vybrány některé konkrétní případy, které pak mohou být detailně zkoumány pomocí CFD metod k získání dalších podrobností. Fenomenologické modely mohou poskytnout přijatelné výsledky, pokud má skutečná geometrie skladbu s opakovanými řadami podobných překážek, ale tyto modely nemusí být dostatečné pro složitější geometrie [23].

**SCOPE**

SCOPE (Shell Code for Over-pressure Prediction in gas Explosions) model je v trvalém vývoji na Shell´s Thornton Research Centre a již bylo představeno několik vylepšených verzí tohoto softwaru. SCOPE model byl původně vyvinut pro modelování explozí na ropných plošinách. Nicméně tento model lze aplikovat na jakoukoli geometrii, kde dochází k šíření plamene.

Program SCOPE je určen především k řešení výbuchů plynů. Modely tohoto typu se liší od empirických modelů, které jsou více napojeny na experimentální data a mají poměrně omezenou použitelnost. Jednorozměrný model je založen na idealizované geometrii odlehčené oblasti, která obsahuje řadu mřížek. Proudění přes každou z těchto mřížek způsobuje vznik turbulence, a tedy dochází k nárůstu průtokové rychlosti turbulentního hoření na mřížce. Proudění směsi a spalin přes odlehčovací otvory je modelováno pomocí standardních vztahů pro proudění stlačitelných tekutin. V software SCOPE je možné modelovat i otevření odlehčovacího otvoru. Plocha odlehčovacího otvoru je rovná nule do okamžiku, kdy je dosažen reakční tlak, od tohoto okamžiku plocha odlehčovacího otvoru lineárně roste v čase až do úplného otevření nebo do přednastavené hodnoty doby otevírání odlehčovacího otvoru [10].

Vnější výbuch, způsobený hořením nezreagovaného plynu vytlačeného z komory nebo místnosti, může významně ovlivnit vnitřní tlak v místnosti. Vytlačovaný plyn tvoří plamen hřibovitého tvaru a nejvyšší vnější tlak je generován, když plamen hoří ve víru (úplavu) hlavy

hřibu. Zbytek vytlačeného plynu přes odlehčovací otvor tvoří stopku hřibu, proto plyn, který byl vytlačen v posledním stadiu výbuchu, přispívá jen málo na vnější přetlak.

Vnější přetlak vypočtený modelem je vztažen k proudění při odlehčení (což úzce souvisí s vnitřním tlakem v komoře), kdy plamen překročí 70 % délky komory. Poměr vnějšího a vnitřního tlaku také závisí na ploše odlehčení; tento poměr je uvažován jako

$$\frac{P_{ext}}{P_{0,7}} = 3{,}75 \cdot \left( \frac{A_v}{V^{2/3}} \right)^{0{,}85} , \qquad (7)$$

kde

$A_v$ je plocha odlehčení ($m^2$),

$V$ je objem komory ($m^3$),

$P_{ext}$ je vnější výbuchový tlak (Pa),

$P_{0,7}$ je maximální vnitřní tlak pro $X/L$ < 0,7 (Pa).

Maximální vnitřní tlak je určen jako

$$P_{max} = P_{emerg} + 0{,}7 \cdot \mathrm{P}_{\mathrm{ext}} , \qquad (8)$$

kde

$P_{max}$ je maximální vnitřní tlak (Pa),

$P_{emerg}$ je vnitřní tlak v okamžiku, kdy plamen vystupuje z komory (Pa).

Model SCOPE byl podroben rozsáhlé experimentální kalibraci s experimenty, které měly obdobné geometrie. Výhodou tohoto modelu je, že umožňuje modelovat výbuchy s odlehčením i vnější výbuch, je to rychlý nástroj pro hodnocení různých scénářů během fáze návrhu, u předepsaných limitů zrychlení plamene uvažuje přijatelné rychlosti plamene, zahrnuje různé plyny a různé stupně zaplnění prostoru, je ověřený na velkém počtu malo-, středně- a velkorozměrových experimentů. Nevýhodou je, že neposkytuje stejné množství informací o poli proudění tekutiny jako CFD modely, obsahuje méně geometrických detailů než CFD modely a dokáže řešit pouze prostory s jednoduchou geometrií [31].

**CLICHE**

CLICHE (Confined LInked CHamber Explosion) software byl vytvořen v Advantica Technologies Ltd. CLICHE byl vyvinut ke zkoumání odlehčených výbuchů v budovách, ale jeho použití bylo rozšířeno i na modelování výbuchů na ropných plošinách. Základem programu je dobrá použitelnost v praktických aplikacích odlehčených výbuchů jednoduchých prostor, nicméně CLICHE kód představuje zobecnění tohoto pojetí a lze jej využívat i při postupně se šířícím výbuchu propojených komor nebo zařízení. Je vhodný pro typické technologické

provozy skládající se z částečně uzavřených oblastí, které jsou propojeny potrubím a technologickým zařízením. Expanze vyvolaná prouděním při výbuchu v takovýchto geometriích bude způsobovat velký tlakový gradient způsobený odporem překážek. Řešené oblasti jsou zastoupeny sérií propojených komor, tlakové gradienty jsou modelovány za použití vhodných podmínek odporu proudění při průchodu jednotlivými otvory a prostupy. Nezbytné parametry pro modelování odporu proudění a plamene při interakci s překážkou se stanoví z numerické databáze obsahující podrobný popis geometrie. Sub-model hoření založený na místních vlastnostech proudění se používá ke stanovení jak laminární, tak turbulentní rychlosti hoření. Jakékoliv vnější hoření způsobené vytlačenými plyny z komory je řešeno samostatným externím modelem hoření [14].

Formulace výbuchového modelu použitá v programu CLICHE byla vytvořena s použitím zákonů zachování objemu jak pro nezreagované, tak pro zreagované objemy plynných směsí. Model předpokládá, že vlastnosti v každém objemu jsou stejné a že všechny změny hybnosti se vyskytují pouze na jeho obvodu. Tento předpoklad neumožňuje predikci rozložení proudění uvnitř objemů, a tím dochází ke zkreslení plamene. V důsledku toho je tvar plamene empiricky předepsán, v závislosti na geometrii a objemu spalin. Rovnice popisující sérii komor tvoří systém vázaných obyčejných diferenciálních rovnic, které jsou řešeny numericky. Program CLICHE používá numericky generovanou plochu plamene, která umožňuje simulaci iniciace v jakémkoliv bodě s počátečním rozvojem plamene do kulového tvaru. Účinky zkreslení plamene jsou ošetřeny pomocí empirických korelací. Když se plamen dostane do kontaktu s překážkami, vyvíjí se "záhyby" nebo "svraštění", které postupně rostou, jak plamen prochází překážkami. V těch jsou parametry hoření lokálně vyšší, a to z důvodu turbulence generované na překážkách.

V programu se vypočítává rychlost růstu plamene z průměrné rychlosti nezreagovaného plynu na předchozích překážkách. Celkové rychlosti hoření je přiřazena hodnota maxim laminárních a turbulentních rychlostí hoření, která se vypočítávají ze známého poloměru plamene, střední kvadratické rychlosti turbulence a integrální vzdálenosti turbulence. Iniciace v primární směsi v klidovém stavu má za následek šíření laminárního plamene, dokud plamen neprotne překážku, na které dojde ke změně proudění se vznikem turbulence. Parametry turbulence jsou založeny na střední rychlosti proudění a na charakteristikách vzniklé turbulence při průchodu překážkou. Model také umožňuje pracovat s počáteční nenulovou turbulencí. Laminární rychlost hoření je založena na empirických korelacích rychlosti plamene jako funkce poloměru plamene. Model je založen na předpokladu, že turbulentní plamen je souborem dílčích laminárních plamenů, a bere v úvahu ochlazování těchto plamenů vlivem turbulence. Hoření v částečně uzavřené oblasti způsobuje, že část nespálených plynů před plamenem je vytlačena přes odlehčovací otvory. Pokud plamen prochází přes odlehčovací otvor, může iniciovat vnější výbuch. Tento vnější zdroj tlaku pak může způsobit zvýšení tlaku uvnitř řešené ohraničené oblasti například i tím, že zabrání úniku dalšího plynu z oblasti. Vnější výbuch a šíření tlakové vlny směrem k otvoru jsou

popsány v akustickém modelu [37] a [11] pro maximální přetlak do 30 kPa. Je předpokládán sférický plamen a empiricky odvozený maximální výbuchový tlak a rychlost plamene.

Výhodami metody je, že umožňuje umístění iniciace směsi kdekoliv v řešené oblasti, uplatňuje jednoduchý model hoření, který je založený na směsici vybraných základních fyzikálních parametrů a empirické korelaci, zahrnuje účinky zdeformování plamene způsobené otvory, překážkami atd., umožňuje řešit vnější exploze, dokáže používat své vlastní vstupní parametry z databáze překážek a umožňuje rychlý výpočet. Nevýhodou je zjednodušená reprezentace geometrie a neposkytnutí stejného množství informací o rozložení proudění jako CFD modely [19].

**CFD MODELY**

Numerické modelování různých fyzikálních jevů je úzce spojeno s modelováním určité formy pohybu matematickými prostředky. Pohyb tekutin souvisí s řešením různorodých problémů reprezentovaných fyzikálním modelem, který simuluje řadu dějů, jako např.:

- laminární a turbulentní proudění v jednoduchých i složitých geometriích,
- stlačitelné a nestlačitelné proudění,
- stacionární, nestacionární a přechodové proudění,
- přenos tepla, přirozená a smíšená konvekce, radiace,
- přenos chemické příměsi včetně chemických reakcí,
- vícefázové proudění, proudění s volnou hladinou, proudění s pevnými částicemi, bublinami, resp. kapkami,
- hoření a chemické reakce, atd.

Matematický model spočívá v definici rovnic popisujících výše uvedené děje. Vzhledem k tomu, že se jedná o děje rovinné dvourozměrné, osově symetrické nebo obecně trojrozměrné a časově závislé, jsou popsány soustavou parciálních diferenciálních rovnic, kterou je nutné řešit numerickými metodami. Jejich využívání je podmíněno rozšířením znalostí z oblasti proudění, turbulence, numerických metod, atd. Neméně významnou částí je vyhodnocení výsledků, které je obzvlášť obtížné u trojrozměrných úloh [22].

Řešení získané pomocí CFD obsahují velké množství informací o poli proudění, tj. rychlostech, tlaku, hustotě, koncentracích, atd. Údaje o tlaku působícím na plochu mohou být dále použity pro strukturní analýzu. CFD simulace mohou nabídnout pohled na chování proudění v situacích, kdy je nepraktické nebo nemožné provést pokusy. V zásadě je možné modelovat mnoho různých scénářů s malou námahou. CFD modely a experimenty by měly být považovány za doplňkové prostředky vyšetřování proudění v různých reálných situacích. Je velmi důležité, aby použité výpočtové modely byly řádně validovány s dobře definovanými a opakovatelnými experimenty. Pokud výpočtové modely nejsou dostatečně ověřeny, důvěra v získané výsledky z výpočtů pomocí CFD může být nízká, a výsledky musí být v praxi použity s opatrností, pokud vůbec. Je zapotřebí zdůraznit význam řešení správně

definovaného problému, tj. při použití správné geometrie a správných počátečních a okrajových podmínek. CFD kódy jsou velmi výkonné a užitečné nástroje, pokud jsou použity správně.

Mezi hlavní nevýhody spojené s použitím CFD modelů lze řadit omezené možnosti použitého hardwaru počítače, například je velmi náročné přesně simulovat turbulentní proudění při hoření. Proto pro modely hoření a turbulentního transportu hmoty byly vyvinuty zjednodušující postupy výpočtu. Malé překážky, vzhledem k oblasti výbuchu, mohou při výbuchu plynu způsobit značně velký výbuchový tlak, a to v důsledku generované turbulence. Explicitní modelování malých objektů je náročné, jak z hlediska paměti počítače, tak výpočetní rychlosti. Proto byl vyvinut alternativní způsob modelování turbulence generované malými překážkami, a to tzv. odpor distribuovaný pórovitostí neboli PDR metoda. CFD modely uvedené v této části práce používají sub-modely pro reprezentaci malých objektů, které jsou spojené s relativně jednoduchými numerickými schématy pro řešení řídicích rovnic proudění [23].

Pokrok ve vývoji modelů v této oblasti je relativně pomalý. Turbulence zůstává stále velmi aktuálním tématem výzkumu. V matematickém chápání této oblasti nastalo zlepšení, ale stále existuje řada problémů, které nebyly zcela vyřešeny, jako například přechod z laminárního do turbulentního proudění. Mimo to, samotný proces začlenění nových zjištění do stávajících modelů turbulence je pomalý. Některé nevyřešené problémy jsou spojeny s numerickými aspekty, např. diskretizace transportní rovnice atd. Zdá se, že plně simulovat turbulentní proudění hoření v reálném prostředí, tedy se všemi spojenými časovými a rozměrovými měřítky, se zahrnutím velkého počtu překážek a dalších konfiguračních složitostí, bude ještě nějakou dobu trvat. Nicméně rychlý vývoj výkonnějších procesorů s nárůstem paměti a aplikace paralelních výpočtů může do určité míry tento proces urychlit [23].

**EXSIM**

Program EXSIM je v trvalém vývoji na Telemark technology R & D Centre (Tel-Tek) v Norsku a v Centre Shell Global Solutions ve Velké Británii. Současná verze softwaru EXSIM má strukturovanou kartézskou síť, je částečně implicitní, používá metodu konečných objemů, která je založena na PDR metodě pro modelování malých objektů. S použitím přístupu PDR jsou malé překážky zastoupeny objemovou pórovitostí, pórovitostí plochy a součinitelem odporu. Překážkami generovaný odpor vstupuje do k-ε modelu turbulence přes modifikovaný vztah úrovně turbulence a následně do Navier-Stokesových rovnic. Skalární proměnné jsou uchovávány uvnitř kontrolních objemů, zatímco rychlost a plocha pórovitostí jsou uloženy na hranicích kontrolních objemů. Pro generování numerických aproximací řídicích rovnic může být použit první nebo druhý řád přesnosti systému. Časová integrace se provádí pomocí implicitního Eulerova schématu prvního řádu přesnosti. Výsledný systém nelineárních algebraických rovnic je řešen použitím tri-diagonálního maticového algoritmu ve třech souřadných směrech. Pre-procesor ve starších verzích programu EXSIM umožňuje

modelovat pouze geometrie se standardními překážkami. Podporuje základní geometrie ve tvaru krychle nebo kvádru. Jiné geometrie je potřeba vytvořit z různých variant osmi základních objektů. Pre-procesor dále umožňuje převádět data z několika různých CAD formátů, což umožňuje rychlejší vytvoření geometrie [18].

Výhodou tohoto programu je, že umožňuje uživateli zadat libovolné prostorové rozložení překážek, lze jej použít v zaplněné, ale neuzavřené geometrii, lze jej použít pro vnější exploze, dokáže pracovat s daty z CAD a byl ověřován s malo-, středně- a velkorozměrovými experimenty. Nevýhodou je, že používá standardní k-ε modely turbulence a nemá zapracovány algoritmy pro místní zahušťování a zřeďování sítě.

**FLACS**

FLACS (FLame ACceleration Simulator) byl vyvinut v Christian Michelsen Research Institute v Norsku, nyní CMR-GEXCON. Program FLACS je založen na metodě konečných objemů a používá strukturovanou kartézskou mřížku. Transport skalárních veličin a hybnosti turbulentních procesů je prováděn pomocí k-ε modelu turbulence. Diskretizace řídicích rovnic vyplývá z váženého středového diferenčního schématu prvního řádu přesnosti. Pro rozvoj reakční proměnné je použit druhý řád přesnosti dle Van Leer schématu [24], aby bylo zabráněno umělému zhušťování plamene, které je způsobené numerickou difúzi.

Reakční rychlost a turbulentní viskozita je definována v transportní rovnici pro rozvoj reakčních proměnných k zajištění korelace rychlosti hoření. FLACS používá pokročilé uživatelské rozhraní. To se skládá z návrhu scénáře (CASD) a postprocesoru Flowvis. CASD se používá ke generování scénáře události. Pomocí Flowvisu lze prezentovat výsledky z provedených simulací. Scénář je definován zjednodušenou geometrií - například trubky jsou reprezentovány dlouhými válci, nosníky, které mají obecný směr, jsou reprezentovány horizontálními nebo vertikálními prvky s blokací prostoru původních nosníků. Obecně všechny objekty s rozměrem větším než 0,03 m lze zahrnout do modelu, ačkoli oblasti s vysokou hustotou menších překážek nejsou reprezentovány tak výstižně. Překážky, které nelze zahrnout do této mřížky, jsou modelovány pomoci zablokování příslušné plochy nebo objemu. Stěny mohou být modelovány čtyřmi různými způsoby, jako tuhý povrch, porézní povrch, plocha s odlehčením výbuchu nebo otevřená oblast. K výhodám programu patří používání schématu diskretizace druhého řádu přesnosti a Van Leerova schématu [24], aplikace na zaplněnou, ale neohraničenou geometrii, použití pro vnější exploze, práce s daty z CAD a byl ověřován s malo-, středně- a velkorozměrovými experimenty. Mezi nedostatky lze zařadit uplatňování překonaného k-ε modelu turbulence, používání prvního řádu přesnosti, aplikace váženého středového diferenčního schématu pro všechny proměnné (s výjimkou schématu rozvoje reakční proměnné) [1].

Van Wingerden [44] na praktických případech porovnal program FLACS pro 3-D simulace se dvěma tradičními predikčních modely, jako je model TNT equivalentu a Multi-Energy model. Výsledky ukázaly, že s ohledem na zjednodušení u obou empirických modelů byly účinky

výbuchů oblaku par v blízkosti epicentra exploze buď podhodnoceny nebo nadhodnoceny. Hodnoty poklesu výbuchového tlaku v různých směrech spočteny pomocí programu FLACS byly větší než podle modelu Multi-Energy. Pokles výbuchového tlaku se zdá být větší v blízkém okolí epicentra výbuchu, ale FLACS a model TNT ekvivalentu byly přesnější ve větší vzdálenosti od epicentra [7, 16, 25].

**AUTOREAGAS**

Program AutoReaGas je výsledkem spolupráce mezi Century Dynamics Ltd a TNO, která začala v roce 1993. Kód integruje vlastnosti programů REAGAS a BLAST vyvinutých TNO a byl začleněn do interaktivního prostředí programu AUTODYN-3D, který je vyvinutý Century Dynamics Ltd. REAGAS je simulátor výbuchu plynu, v němž program BLAST řeší šíření tlakových vln. Programy REAGAS a BLAST byly implementovány do prostředí AutoReaGas jako řešiče výbuchu plynu či řešiče výbuchu obecně. AutoReaGas je založen na trojrozměrné metodě konečných objemů a používá strukturovanou kartézskou síť. Diskretizace řešené oblasti je dosaženo použitím Power Law schématu prvního řádu přesnosti se zapracovaným SIMPLE algoritmem pro korekci tlaku. Turbulentní transport je modelován pomocí standardního dvourovnicového k-ε modelu. Velké objekty mohou být řešeny ve standardní síti a na podsíti jsou modelovány překážky, a to jako zdroj turbulence a odporu prostředí (PDR). Program také umožňuje použití odlehčovacích panelů při výpočtu odlehčených výbuchů. Model hoření předpokládá, že hoření probíhá jako jednofázový proces. Transportní rovnice jsou řešeny pro podíl hmoty paliva a směsi, která nezreagovala (tj. pro množství, které nebylo ovlivněno chemickými reakcemi). Přidáním rovnic transportního podílu frakcí směsi je umožněno modelování výbuchů u směsných plynných směsí. Reakční rychlost je stanovena z empirické korelace rychlosti plamene [9], kde přechod od laminárního k turbulentnímu hoření je založen na podmínkách místního proudění. Řešič programu řeší trojrozměrné Eulerovy rovnice pro šíření tlakové vlny pomocí tokově korigované transportní techniky. Automatické přemapování umožňuje z výstupu z provedených simulací výbuchu plynu zjistit i účinky výbuchu v rozsáhlejší oblasti. Scénáře geometrie mohou být dodávány do programu definováním kombinací objektových primitiv, jako jsou válce, krychle a roviny nebo alternativně mohou být importovány z CAD softwarů.

Novější verze programu obsahují řadu nových funkcí: pre- a post-procesor byl vylepšen a bylo implementováno vylepšené řešení proudění a vizualizace geometrie, bylo vylepšeno objektové modelování a byly implementovány plochy rozložení tlaku (při použití odlehčovacích panelů), atd. [2].

Výhodou tohoto programu je, že umožňuje pracovat s velkým množstvím objektů díky dynamickému přidělování paměti z objektové databáze, zahrnuje modely smáčení (skrápění) vodou, dokáže pracovat s daty z CAD programů a byl ověřován s malo-, středně- a velkorozměrovými experimenty. Nevýhodou je, že používá standardní k-ε modely turbulence a používá první řád přesnosti diskretizačního schématu pro všechny proměnné.

## *5.4 Pokročilé CFD modely*

CFD modely prezentované v této části se snaží provést komplexní popis výbuchového procesu. Rozdíly mezi těmito modely a modely uvedenými v předchozí části jsou především v oblasti zobrazení geometrie a přesnosti použitých numerických schémat. CFD programy prezentované v této části (s výjimkou programu COBRA) umožňují přesné geometrické reprezentace scénáře výbuchu a jsou omezeny pouze dostupnou pamětí počítače. Paměťové omezení počítače může omezit využitelnost programu pouze na konfiguraci méně složitých geometrií nebo může nutit uživatele, aby nezahrnul některé objekty do modelu, aby mu tak zůstal k dispozici dostatek paměti. Všechny programy uvedené v této části používají numerická schémata s vyšší přesností ve srovnání s CFD programy popsanými v části předchozí [21].

**CFX**

ANSYS CFX software má své kořeny v programech CFX-TASCflow, který byl vyvinut Advanced Scientific Computing Waterloo, Ontario, a CFX-4 vyvinutý na AEA Technology Engineering Software Harwell. CFX-4 je založen na metodě konečných objemů a používá nestrukturovanou mřížku. Pro usnadnění modelování složitých tvarů program nabízí použití víceblokových neortogonálních sítí. Mohou být použity různé řešiče společně s širokým výběrem prvního a ohraničeným množství druhého řádu přesnosti diferenčních schémat. Stejně jako v běžně používaných k-ε modelech turbulence program také obsahuje úplný Reynoldsův napěťový model turbulence. Pro řešení přenosu tepla je v programu použito implicitní Eulerovo schéma prvního řádu přesnosti a Crank-Nicolsonovo schéma druhého řádu přesnosti. Crank-Nicolsonovo schéma je omezeno na kladně definované proměnné, a proto mohou být použity velmi malé časové kroky při aplikaci modelu turbulence (turbulence kinetické energie a její stupeň disipace jsou striktně kladné veličiny). Časové diferenční schéma je adaptivní, takže pokud dojde k nesplnění konvergenčních kritérií v konkrétním časovém kroku, má to za následek úpravu parametrů, tak aby v dalším kroku došlo ke konvergenci. Po úspěšné konvergenci v pěti po sobě následujících časových krocích dochází ke zvýšení časového kroku [30, 41].

Výhodou programu je spolehlivý výpočet bez ohledu na velikost nebo rozsah úlohy, možnost použít jeden řešič pro všechny aplikace, možnost aplikovat paralelizaci výpočtu, značná pružnost při vytváření vlastních postupů a modelů, možnost použití plné matice umožňující kombinace fyzikálních modelů mezi jednotlivými oblastmi, široký výběr diskretizačních schémat, velké množství modelů turbulence na výběr a možnost pracovat s daty z CAD programů. K nedostatkům patří horší shoda s experimenty pro jiné plyny než metan a vodík, na které je model vyladěn, používání modelu tenkého plamene, který není zcela vhodný k modelování výbuchů, a používání ne zcela výstižného modelu iniciace [30].

**COBRA**

Univerzální program COBRA byl vyvinut Mantis Numerics Ltd., a to především pro průmyslové aplikace. Program COBRA je založen na řešení rovnic proudění tekutin metodou integrace konečných objemů ve spojení s algoritmem adaptivní mřížky. Program aplikuje řešení zprůměrovaného souboru váhových hustot tvořící transportní rovnice hmoty, hybnosti, celkové energie a rozvoje reakční proměnné. Difúze a počáteční podmínky jsou aproximovány z centrálních diferencí a konvekční a tlakové proudění jsou získány pomocí metody druhého řádu přesnosti Godunovovou variantou. Základní síť se používá pro velké překážky, zatímco malé překážky jsou zastoupeny na úrovni podsíťového modelu. COBRA využívá PDR metodu pro modelování překážek v podsíťovém měřítku. Turbulence, která se tvoří před šířícím se plamenem, je modelována pomocí k-ε modelu turbulence. Předmísený proces hoření je modelován pomocí poloempirického přístupu, který připouští jak vlivy chemické kinetiky, tak vlivy proudění na rychlost hoření a šíření plamene při zachování realistické tloušťky plamene. Metoda PDR má své nedostatky, ale pokud je potřeba provést simulace pro reálné, často velmi složité geometrie, pak aplikace metody PDR je v mnoha případech jediným schůdným řešením. Použitá síť v programu může být pravoúhlá, cylindrická nebo křivočará, a pokud je zapotřebí, může být zhuštěná s postupným překrytím zhuštěných vrstev. Každá vrstva je generována z předchozí vrstvy zdvojnásobením počtu buněk v každém souřadnicovém směru. Síť může být i zpětně zředěná, ale pouze do jejího původního stavu [11].

Výhodou tohoto programu je snadné používaní ortogonální sítě, s možností pracovat rovněž s cylindrickými nebo libovolnými hexagonálními sítěmi, zahrnuje pokročilé zhušťování a zřeďování sítě umožňující sledování šíření plamene nebo tlakové vlny, dokáže pracovat s daty z CAD programů a poskytuje druhý řád přesnosti pro prostorové a časové diskretizace. Nevýhodou je, že používání standardních k-ε modelů turbulence a modelování geometrie může být časově náročné a obtížné, program nedisponuje modelem přechodu od laminárního k turbulentnímu proudění, který by mohl mít vliv na počáteční růst plamene, a vizualizace výsledků simulací je poměrně pomalá a pracná [11, 14].

**REACFLOW**

Program REACFLOW je vyvinutý v průběhu posledních let ve výzkumném středisku Evropské unie v Ispře v Itálii. Program je navržen tak, aby umožňoval simulaci proudění plynů v interakci s probíhajícími chemickými reakcemi. REACFLOW je založen na metodě konečných objemů, používá nestrukturovanou mřížku pro modelování dvou nebo třírozměrné geometrie. Výhodou nestrukturované sítě je to, že program zvládne geometrie libovolné složitosti. Program REACFLOW v první fázi dělí modelovanou oblast do prvků, které jsou tvořeny trojúhelníky ve 2-D geometrii a tetraedry v 3-D geometrii. Kontrolní objemy jsou definovány středními hodnotami (mediány) těchto prvků. Uvnitř každého kontrolního objemu jsou známy pouze průměry jednotlivých proměnných proudění. Tyto průměrné hodnoty mohou být deklarovány jako konstanty nebo lineárně se měnící funkce uvnitř kontrolního objemu. První způsob vede při aplikaci diskretizační metody na první řád

přesnosti, zatímco druhý způsob vede na druhý řád přesnosti. REACFLOW zahrnuje řešič se dvěma typy diskretizačních schémat. Diskretizace v čase se měnícího výrazu se provádí jednoduchou metodou konečných diferencí, která může být buď explicitní, nebo implicitní. Při simulaci výbuchu jsou oblasti zájmu obecně mnohem menší než celková řešená oblast. Je proto výhodné mít možnost koncentrovat výpočetní úsilí právě na tyto oblasti. REACFLOW má možnost využití adaptivní sítě, která umožňuje lokální zhuštění nebo zředění sítě v závislosti na místních podmínkách. Například prudká změna reakčních proměnných v reakční zóně znamená, že je zapotřebí v této oblasti zvýšit množství buněk pro větší přesnost výpočtu. Adaptace sítě v REACFLOW je dynamická a plně reverzibilní. Nicméně má omezení, aby se předešlo nadměrnému zhuštění sítě [23, 42].

Výhodou programu je použití nestrukturované sítě pro snadnější síťování modelu, možnost adaptivního síťování pro lepší reprezentaci překážek a pro lepší rozlišení zóny plamene a použití řešiče druhého řádu přesnosti s Van Leerovým schématem diskretizace [24]. Nedostatky jsou v používání jednoduchého modelu hoření a používání standardních k-ε modelů turbulence.

**NEWT**

Program NEWT používá nestrukturovanou adaptivní síť a trojrozměrnou metodu konečných objemů. Nestrukturovaná síť umožňuje přístupnější modelování velmi složitých tvarů. NEWT byl původně vyvinut pro problémy proudění ve strojírenství, ale pak byl na Cambridge University upraven pro predikci explozí. Vzhledem ke své schopnosti používání adaptivní mřížky program NEWT umožňuje predikci výbuchu v silně zaplněném prostředí, ve kterém se mohou nacházet stovky překážek. Druhého řádu přesnosti diskretizačního schématu je použito pro konvekční proudění. Umělá disipace (kombinace druhého a čtvrté řádu derivací) je přidána k zachycení rychlých účinků hoření při modelování výbuchu. Program NEWT používá upravenou variantu k-ε modelu turbulence, kde útlumová funkce v blízkosti stěny je závislá na hodnotě Reynoldsova čísla a nikoliv na vzdálenosti od stěny. Hoření je modelováno pomocí modelu přerušení víření nebo laminárním modelem plamene. Model přerušení víření může vést k nežádoucí iniciaci směsi plamenem. Toto je vyvažováno potlačením náběžné hrany plamene v každém časovém kroku. Pro program NEWT byl rovněž proveden vývoj rozhraní CAD. Toto rozhraní automaticky generuje síť na CAD geometrie k umožnění modelování složitějších scénářů [9, 39].

Výhodou tohoto programu je aplikace algoritmu adaptivní sítě a použití nestrukturované sítě, která snižuje pracnost při síťování složitých geometrií, může být použit jakýkoliv 3D generátor sítě, která je tvořena tetraedry, pokud má výstup do formátu, se kterým program NEWT spolupracuje. Nevýhodou je používání standardních k-ε modelů turbulence a prostého iniciačního modelu [39].

## 5.5 Shrnutí

Omezení empirických modelů jsou dvojího druhu. Za prvé, geometrická reprezentace řešeného subjektu je poměrně prostá, a za druhé, nedostatečné začlenění fyzikální podstaty řešeného děje do těchto modelů udává povinnost kalibrovat model pro každé palivo zvlášť. Jeden z těchto modelů, model TNT ekvivalentu, předpokládá, že výbuchy plynu se chovají jako výbuchy TNT, což není zcela přesný případ. Je nezbytné předpokládat, že intenzita výbuchu a stupeň ohraničení atd. při použití některého z empirických modelů vede k řadě možných nejistot. Tyto modely definují postupy jak odhadnout intenzitu výbuchu, ale poskytují nepřesné a velmi zjednodušené výsledky. Tyto modely jsou mnohdy nesprávně používány nezkušenými uživateli nebo jsou extrapolovány mimo hranice jejich použitelnosti, ale i přes mnohá omezení vynucená použitím těchto metod jsou vyváženy minimálním úsilím při výpočtu.

Ve fenomenologických modelech je obsaženo více fyzikální podstaty modelovaných dějů, než u empirických modelů. Mimo to je nezbytné provádět kalibrace pro všechna paliva, která jsou v zájmu řešení. Geometrie je reprezentována velmi podrobně jako v CFD modelech, ačkoliv u programu CLICHE jsou vstupní parametry počítány z databáze překážek, která principiálně umožňuje přesnější reprezentaci geometrie. I přes specifickou reprezentaci překážek je při použití tohoto programu zavedena nejistota v tom, že výběr reprezentace překážky závisí na zkušenosti uživatele.

U metod CFD je výpočtová oblast diskretizovaná do mřížky výpočetních buněk. První omezení se u této metody vztahuje na reprezentaci modelované geometrie. Toto se netýká empirických a fenomenologických modelů, neboť tyto nepoužívají podrobnou reprezentaci skutečné geometrie. Omezeny jsou pamětí a výkonem počítačů, které mají omezené možnosti. Pokud je zapotřebí snížit nároky na paměť počítače, je možné provést rozdělení sítě na několik menších částí, případně použít paralelizovanou verzi CFD programu. V případě modelů velkých areálů nebo rozsáhlých technologických zařízení vyžaduje velký počet buněk sítě. To vedlo k vývoji různých technik, zejména metody odporu distribuovaného pórovitostí (PDR). Tato metoda umožňuje formou geometrické reprezentace překážek řešit rozsáhlé scénáře. Nicméně menší oblasti mohou být plně řešeny pomocí současných počítačů.

Empirické modely jsou založeny na korelacích experimentálních dat. Hlavní výhodou jejich používání je ušetření rozhodování o podrobnostech. Jakmile za různé parametry jsou dosazeny přijatelné hodnoty, jsou výpočty výbuchových charakteristik rychlé. Pokud je reprezentace řešené oblasti dobrá a je vázaná na empirické poznatky, pak výsledky mohou být dostačující. Není výjimkou, že při volbě a zadání hodnot vstupních parametrů mohou různí posuzovatelé dospět k velmi rozdílným výsledkům. Mnoho empirických modelů má tendenci být více než konzervativní. Přes všechny své nedostatky mají empirické modely svůj význam. Doba výpočtu je krátká, v řádu sekund, což znamená, že může být rychle otestováno velké množství různých scénářů. Scénáře zvláštního významu pak mohou být vybrány pro další analýzu pomocí programů CFD nebo fenomenologických modelů. Požadovaná míra

přesnosti a požadovaná úroveň modelu může být taková, že tyto jednoduché modely budou postačovat. Rozsáhlé kalibrace převážně na velkorozměrových experimentech potvrzují, že přesnost je v mnoha případech přijatelná.

Fenomenologické modely byly rozsáhle kalibrovány na středně- a velkorozměrových experimentech. Měly by být vhodné pro výpočty scénářů, které jsou podobné těm, na které byly modely kalibrovány. Tyto modely mohou být použity ve spojení jak s empirickými, tak CFD modely.

Odhady přetlaku u fenomenologických modelů jsou prováděny pro nejhorší scénář, tedy že prostor výbuchu je vyplněn homogenní směsi plynu odpovídající stechiometrické koncentraci. Obecnější případy s nehomogenním oblakem paliva a vzduchu nemohou být modelovány. Jednou z výhod CFD programů je, že mohou být řešeny výbuchy nehomogenního oblaku plynu. V zásadě jsou CFD programy rovněž schopny provést výpočet disperze před iniciací.

Tak zvané jednoduché CFD modely byly rozsáhle kalibrovány na středně- a velkorozměrových experimentech. Jsou vhodné pro výpočty scénářů, které jsou podobné těm, na které byly kalibrovány. Tyto modely mohou být rovněž použity ve spojení s pokročilými CFD modely, například pro získání představy o charakteristikách proudění. Výhodou jednoduchých modelů je relativně krátká doba výpočtů, ve srovnání s pokročilými CFD modely, u kterých výpočet může trvat i několik dní.

Hlavní omezení jednoduchých modelů CFD spočívá v poměrné jednoduchosti sítí používaných pro diskretizaci výpočetní oblasti. Všechny jednoduché CFD modely uvedeny v této práci používají kartézskou síť s podsíťovými objekty reprezentovanými PDR metodou. Kartézskou síť lze snadno vytvořit a nevyžaduje velké výpočetní režie. Avšak objekty velikosti buněk sítě nebo dokonce menší pak mohou být reprezentovány pouze hrubě. Například v případě modelování koule, při použití kartézské sítě, může být objem koule reprezentován pouze ekvivalentem krychle nebo pomocí objemu nebo plochy pórovitosti. Je zřejmé, že ani jeden z těchto popisů neodpovídá přesné reprezentaci koule a důsledek tohoto zjednodušení se samozřejmě promítá do přesnosti výsledných dat v modelované oblasti. Pokročilé CFD modely používají složitější numerická schémata pro zlepšení reprezentace geometrie a reakční zóny. Programy umožňují použití adaptivních nestrukturovaných sítí, které umožňují podrobnou reprezentaci modelované geometrie a reakční zóny hoření.

# 6 Metoda TNT ekvivalentu - aplikace

Koncept TNT-ekvivalentu je z původního využití při stanovování destrukčních účinků trhavin přizpůsoben k použití pro odhadování vzniklých škod při výbuchu plynných směsí. TNT-ekvivalent můžeme považovat za konverzní faktor, který vyjadřuje, jaký díl dostupného spalného tepla se přeměnil na energii do tlakové vlny. Vyjadřuje účinnost procesu přeměny chemické energie na mechanickou energii. Při detonaci směsi uhlovodíku se vzduchem (při

stechiometrické koncentraci) je teoretické maximum 40 %. Praktické hodnoty TNT-ekvivalentů jsou mnohem menší než teoretické maximum. Publikovaní hodnoty TNT-ekvivalentů, odvozených ze škod sledovaných při haváriích, se pohybují od 1 % do několika desítek procent. Většinou se pro výpočty používá hodnota z intervalu 1 – 10 % ze spalného tepla. Většina výpočtů se liší právě v určení hodnoty TNT-ekvivalentu.[3,15,17,25]

Doporučení ke stanovení TNT-ekvivalentu:

Brasie a Simpson: 2 – 5 % ze spalného tepla,

The UK Health and safety executive: 3 % spalného tepla,

Exxon: 3 – 10 % spalného tepla,

Industrial Risk Insurers: 2 % spalného tepla.

Metoda TNT ekvivalentu je s mnoha připomínkami použitelná pro výbuchy plynů s intenzitou větší než 1 bar a pro vzdálenější oblasti [36]. V literatuře je možno nalézt pro TNT-ekvivalent také výrazy jako stupeň konverze, účinnost nebo účinnostní faktor [23,32,44].

Výhodou metody TNT ekvivalentu je jednoduchost výpočtu. Nevýhodou metody je nedostatečná reprezentace „slabých“ výbuchů (mimo oblast stechiometrické nebo optimální koncentrace směsi). Mezi další nevýhody patří složitost definování skutečného bodu iniciace, používání nespecifických koeficientů, a další.

## *6.1 Výpočet parametrů tlakové vlny*

Postupy výpočtů výbuchových parametrů kondenzovaných výbušnin jsou založeny na tzv. redukovaných a bezrozměrných charakteristikách. Důvodem pro převod různých jednotek a parametrů na bezrozměrné a redukované je praxe. Pomocí známých a ověřených vztahů mezi parametry lze hodnotit různé rázové vlny bez pracných a náročných měření. Základem se stal "zákon třetí odmocniny“, který říká, že když dvě nálože téže výbušniny a geometrie, ale různé hmotnosti, detonují v téže atmosféře, produkují velmi podobné rázové vlny ve stejných redukovaných vzdálenostech [4].

**Balistický poměr nálože**

Pokud jsou sledovány parametry směrem od výbušiny, pak je nutné začít od toho, zda se jedná o tzv. volnou nálož nebo o nálož v obalu. Obal pak přímo ovlivňuje proces výbušné přeměny a mění parametry generované tlakové vlny. Balistický poměr KB je poměr hmotnosti obalu nálože a vlastní hmotnosti výbušiny. Je důležitý pro stanovení koeficientu těsnění nálože. Pro nálož bez obalu má balistický poměr hodnotu 0. Pro nálož, kde výbušina a její obal mají stejnou hmotnost má balistický poměr hodnotu 1. V ostatních případech lze hodnotu balistického poměru určit dle vztahu:

$k_B$ = hmotnost obalu nálože / hmotnost výbušiny

Tato hodnota je pak uplatněna při výpočtu koeficientu těsnění $k_E$.

$$k_E = 0{,}2 * \frac{0{,}8}{1+k_B} \ , \tag{9}$$

**Koeficient geometrie šíření**

Vlnění od ohniska výbuchu se šíří v kulových vlnoplochách. Při pozemním výbuchu (na kontaktu s terénem) je energie výbuchu přibližně dvojnásobná, protože při úplném odrazu od povrchu terénu se tlaková vlna šíří v polokulových vlnoplochách. Někteří autoři ve svých vzorcích pro stanovení celkové ekvivalentní hmotnosti nálože koeficient geometrie $k_G$ šíření neuvádějí. Předpokládají pouze pozemní výbuch a dosazují za ekvivalentní hmotnost nálože W zpravidla dvojnásobnou hodnotu.

V případech, kdy je epicentrum výbuchu do 20 m nad povrchem terénu, pak koeficient geometrie šíření má hodnotu 2. Výbuchem ve volném vzdušném prostoru rozumíme situaci, kdy zpoždění odražené vlny od povrchu terénu vůči čelu tlakové vlny je větší než délka přetlakové fáze tlakové vlny, potom koeficient geometrie šíření má hodnotu 1. Mezi těmito hodnotami se lineárně interpoluje [4].

**Tritolový ekvivalent a ekvivalentní hmotnost nálože**

Předpokládá se, že energie uvolněná výbuchem je úměrná hmotnosti nálože a k jejímu řešení dojdeme zavedením referenční výbušniny, za kterou byl zvolen tritol (trinitrotoluen, TNT). Proto se hmotnost trhavin vyjadřuje pomocí tzv. tritolového ekvivalentu ($k_{TNT}$). Pokud tento ekvivalent nenajdeme v odborné literatuře, může být spočten s dostatečnou přesností podle vzorce:

$$k_{TNT} = 0{,}3 \cdot Q_v - 0{,}2 \ , \tag{10}$$

kde

$Q_v$ představuje výbuchové teplo dané výbušniny ($MJ.kg^{-1}$)

Tento vztah platí pro výbušniny s výbuchovým teplem od 2 do 5 $MJ.kg^{-1}$.

Rovněž je možno uplatnit alternativní vztah:

$$k_{TNT} = \frac{Q_V}{Q_{TNT}} \ , \tag{11}$$

kde $Q_v$ je vypočítané nebo naměřené výbuchové teplo dané výbušniny a $Q_{TNT}$ je výbuchové teplo tritolu.

Celkovou ekvivalentní hmotnost lze získat ze vztahu:

$$W = W_N \cdot k_{TNT} \cdot k_E \cdot k_G \ , \tag{12}$$

kde

*W* je hmotnost ekvivalentní nálože TNT (kg),

$W_N$ je hmotnost použité trhaviny (kg),

$k_{TNT}$ je tlakový tritolový ekvivalent ($kJ.kg^{-1}$),

$k_E$ je koeficient těsnění nálože (-),

$k_G$ koeficient geometrie šíření (-).

Redukovanou vzdálenost lze spočíst podle vzorce:

$$Z = \frac{R}{W^{1/3}} \quad , \tag{13}$$

kde R je vzdálenost od centra výbuchu (m) a W je hmotnost ekvivalentní nálože (kg).

Zatěžující časový průběh přetlakové a podtlakové fáze vzdušné tlakové vlny se zpravidla zjednodušuje na trojúhelníkové průběhy obou fází zatížení. Pro výpočet hodnot přetlaku a podtlaku lze použít přibližné empirické vztahy od různých autorů. Vzorce jsou u většiny autorů velmi podobné a liší se zpravidla pouze jednotlivými součiniteli u jednotlivých členů. Velikost těchto součinitelů je závislá na tom, pro jaký typ výbuchu byly vzorce odvozeny, zda se jedná o výbuch pozemní nebo o výbuch v otevřeném prostoru a konečně na hmotnosti iniciované nálože a její složení [29,37].

**Ruské prameny (Korenev)**

Pro pozemní výbuch platí následující empirické vztahy:

$$p_+ = \frac{0{,}1}{Z} + \frac{0{,}43}{Z^2} + \frac{1{,}4}{Z^3} \tag{14}$$

$$\tau_+ = 1{,}7\,.\,10^{-3} \cdot \sqrt[6]{W} \cdot \sqrt{R} \tag{15}$$

$$\tau_- = 0{,}016 \cdot \sqrt[3]{W} \tag{16}$$

$$p_- = \frac{0{,}03}{Z} \tag{17}$$

kde

p+ přetlak na čele vlny (Mpa),

p- je podtlak podtlakové fáze vlny (Mpa),

Z je redukovaná odstupová vzdálenost ($m.kg^{-1/3}$),

R je vzdálenost epicentra výbuchu od překážky (m),

W je ekvivalentní hmotnost nálože (kg),

τ+ je doba trvání přetlakové fáze (s),

τ- je doba trvání podtlakové fáze (s).

Pro nadzemní výbuchy ve volném prostranství platí obdobné empirické vzorce s jinými koeficienty. Označení veličin a jednotky jsou obdobné jako u pozemního výbuchu.

$$p_+ = \frac{0{,}084}{Z} + \frac{0{,}27}{Z^2} + \frac{0{,}7}{Z^2} \tag{18}$$

$$\tau_+ = 1{,}5 \cdot 10^{-3} \cdot \sqrt[6]{W} \cdot \sqrt{R} \tag{19}$$

$$\tau_- = 0{,}016 \cdot \sqrt[3]{W} \tag{20}$$

$$p_- = \frac{0{,}03}{Z} \tag{21}$$

**M. A. Sadovskij**

Vzorce jsou odvozeny pro výbuch ve vzduchu, pro pozemní výbuch se za hmotnost nálože W dosazuje dvojnásobek skutečné hmotnosti.

Pro Z ≤ 1 $$\mathrm{p}_+ = \frac{1{,}07}{\mathrm{Z}^3} - 0{,}1 \tag{22}$$

Pro 1 ≤ Z ≤ 15 $$p_+ = \frac{0{,}076}{Z} + \frac{0{,}255}{Z^2} + \frac{0{,}650}{Z^3} \tag{23}$$

kde p+ je přetlak na čele vzdušné rázové vlny (MPa) a Z je redukovaná odstupová vzdálenost od epicentra výbuchu ($m.kg^{-1/3}$)

**J. Henrych**

Pro pozemní výbuch se za hmotnost nálože W dosazuje dvojnásobek skutečné hmotnosti.

Pro 0,05 ≤ Z ≤ 0,3 $$\mathrm{p}_+ = \frac{1{,}40717}{\mathrm{Z}} + \frac{0{,}55397}{\mathrm{Z}^2} + \frac{0{,}03572}{\mathrm{Z}^3} + \frac{0{,}000625}{\mathrm{Z}^4} \tag{24}$$

Pro 0,3 ≤ Z ≤ 1 $$\mathrm{p}_+ = \frac{0{,}61938}{\mathrm{Z}} + \frac{0{,}03262}{\mathrm{Z}^2} + \frac{0{,}3288}{\mathrm{Z}^3} \tag{25}$$

Pro 1 ≤ Z ≤ 10 $$p_+ = \frac{0{,}0662}{Z} + \frac{0{,}405}{Z^2} + \frac{0{,}3288}{Z^3} \tag{26}$$

Označení veličin a jejich rozměry jsou stejné jako u předchozích vztahů.

**D. Makovička**

Pro pozemní výbuch se za hmotnost nálože W dosazuje dvojnásobek skutečné hmotnosti.

Pro Z ≤ 1 $$p_+ = \frac{1{,}07}{Z^3} - 0{,}1 \tag{27}$$

Pro 1 ≤ Z ≤ 15 $$p_+ = \frac{0{,}0932}{Z} + \frac{0{,}383}{Z^2} + \frac{1{,}275}{Z^3} \tag{28}$$

$$\tau_{+} = 1{,}6 \cdot 10^{-3} \cdot \sqrt[6]{W} \cdot \sqrt{R} \tag{29}$$

$$\tau_{-} = 0{,}016 \cdot \sqrt[3]{W} \tag{30}$$

Označení veličin a jejich rozměry jsou stejné jako u předchozích vztahů.

# 7 Výpočtová aplikace

Programová aplikace na zjednodušený výpočet parametrů tlakové vlny kondenzovaných výbušnin a hořlavých plynů a par je vytvořena v programu Microsoft Office Excel. Výpočtová aplikace má v sobě integrovanou databázi výbuchových a spalných tepel nejčastěji používaných trhavin a plynů. Tato aplikace zpracovává výpočtový postupu, jehož základem se stal „zákon třetí odmocniny“ a metoda TNT ekvivalentu. Programové zpracování je uživatelsky přehledné a umožňuje tedy rychle a efektivně provést odhad působení tlakové vlny na okolí, a to i uživatelům, kteří nejsou s danou problematikou blíže seznámeni. Software je využitelný pro odhad účinků tlakové vlny při výbuchu jak kondenzovaných výbušnin, tak oblaku hořlavých plynů a par. Dále se předpokládá, že v prostoru, kde se vzniklá tlaková vlna šíří, se nevyskytují žádné překážky, se kterými by se mohla vzniklá tlaková vlna dostat do interakce. Výsledky by mohly být využity například pro návrh odstupových vzdáleností od prostor s rizikem výbuchu výbušnin, plynů a par, případně k vyhodnocování účinků výbuchu na okolí. Zadávání vstupních hodnot, postup výpočtu a průběh tlakové vlny je zobrazen na obr. 10 a 11.

## *Zjednodušený výpočet tlakové vlny*

### *1. Zadané hodnoty*

| | | | |
|---|---|---|---|
| a) typ nálože / plynu | Propan | | |
| b) vzdálenost objektu od epicentra výbı | R | 10 | [m] |
| c) hmotnost nálože / plynu | $W_N$ | 20 | [kg] |
| d) balistický poměr nálože | $k_B$ | 0 | [ - ] |
| e) výška ohniska výbuchu nad terénem | h | 0,5 | [m] |

### *2. Základní údaje*

| | | | |
|---|---|---|---|
| výbuchové teplo | $Q_V$ | 50 360 | [kJ/kg] |
| tlakový tritolový ekvivalent | $k_{TNT-p}$ | 0,360 | [ - ] |
| koeficient těsnění nálože | $k_E$ | 1,00 | [ - ] |
| koeficient geometrie šíření | $k_G$ | 1,63 | [ - ] |
| **hmotnost ekvivalentní nálože** | W | 11,7 | [kg TNT] |
| **redukovaná vzdálenost pro ekvivalentní hmotnost nálože** | Z | 4,4 | [m/kg$^{1/3}$] |

### *3. Tlaková vlna*

| | | | |
|---|---|---|---|
| přetlak v tlakové vlně | p+ | ***55,52*** | [kPa] |
| podtlak v tlakové vlně | p- | ***6,81*** | [kPa] |
| doba trvání přetlaku | t+ | ***0,0076*** | [s] |
| doba trvání podtlaku | t- | ***0,0363*** | [s] |
| rychlost čela tlakové vlny | N | ***381,6*** | [m/s] |
| doba nárazu od odpálení | t | ***0,0262*** | [s] |

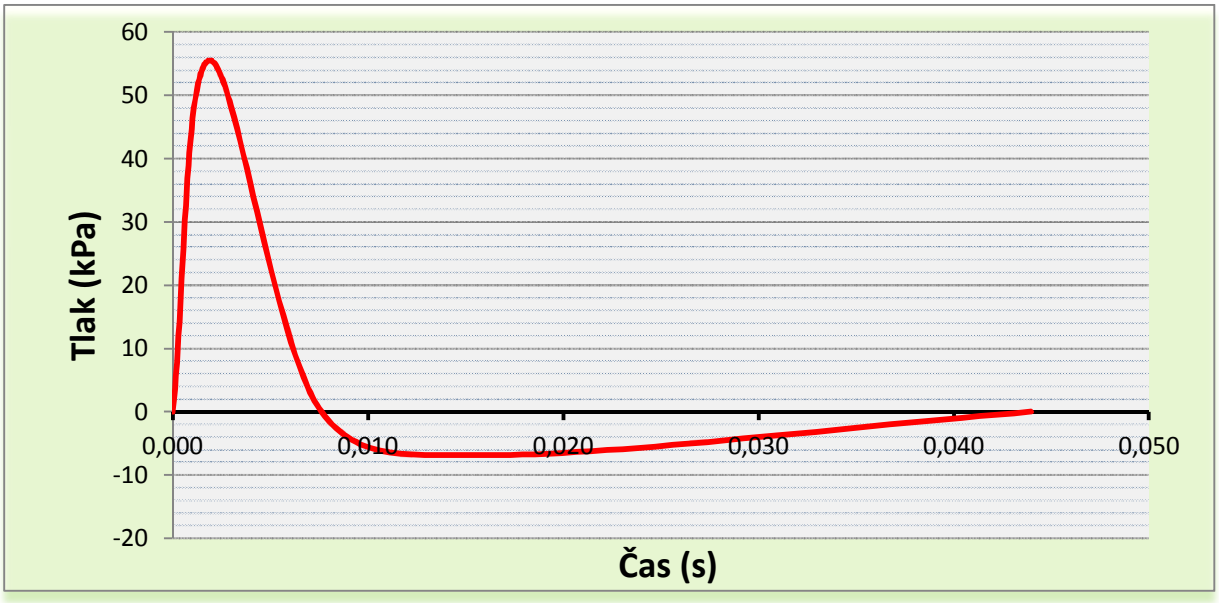
### *4. Varianty výpočtů přetlaku*

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| přetlak v tlakové vlně podle Sadovského | R_ < 1 | p+ | - | [kPa] |
| | 1 < R_ < 15 | p+ | ***38,01*** | [kPa] |
| přetlak v tlakové vlně podle Henrycha | 0,05 < R_ < 0,30 | p+ | - | [kPa] |
| | 0,30 < R_ < 1,00 | p+ | - | [kPa] |
| | 1,00 < R_ < 10,0 | p+ | ***39,72*** | [kPa] |
| přetlak v tlakové vlně podle Makovičky | R_ < 1 | p+ | - | [kPa] |
| | R_ > 1 | p+ | ***55,84*** | [kPa] |

### *5. Průběh tlakové vlny*

| | | t [s] | | p [kPa] |
|---|---|---|---|---|
| Okamžik odpálení | 0 | ***0,0000*** | | ***0,0000*** |
| Čtvrtina přetlakové fáze | t+/4 | ***0,0019*** | p+ | ***55,52*** |
| Konec přetlakové fáze | t+ | ***0,0076*** | | ***0,0000*** |
| Čtvrtina podtlakové fáze | t+ + t-/4 | ***0,0167*** | p- | ***-6,81*** |
| Konec podtlakové fáze | t+ + t- | ***0,0440*** | | ***0,0000*** |

Obr. 10 - Výpočtová aplikace




Obr. 11 - Průběh tlakové vlny

## Závěr

Se stále rostoucím rizikem výbuchu, se rozrůstá i opatření pro minimalizaci škod po výbuchu. K realizaci toho je potřeba mít alespoň představu o tom, jaké škody může výbuch napáchat a jaká odstupová vzdálenost od epicentra výbuchu již může být bezpečná. V některých situacích můžeme při této představě vycházet z předešlých zkušeností. V některých situacích ovšem tuto možnost nemáme a při určování potenciálního nebezpečí lze vycházet pouze z předpokladů a výpočtů. Náplní této práce bylo vytvořit funkční výpočtovou aplikaci, díky níž bude možné rychle a efektivně provést odhad působení tlakové vlny na okolí.

## Použitá literatura


[1] ARNTZEN, B. J. *Modelling of turbulence and combustion for simulation of gas explosions in complex geometries*. Dr. Ing. Thesis, Norges Tekniske-Naturvitenskapelige Universitet, Trondheim, Norway. 1998.

[2] *AutoReaGas.* User's Manual. Version 3.1, Century Dynamic Inc. and TNO Prins Maurits Lab.

[3] BAKER, Q. A., DOOLITTLE, C. M., FITZGERALD, G. A., AND TANG, M. J. *Recent developments in the Baker-Strehlow VCE Analysis Methodology*. Process Safety Progress 17(4). 1998. pp. 297-301.

[4] BANGASH, M. Y. H. *Shock, Impact and Explosions - Structural Analysis and Design*. Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH & Co. KG. 2009. pp. 1410.

[5] BARTKNECHT, W. *Explosions: course, prevention, protection*. New York: Springer, 1981.

[6] BERG, A. C. van den. *The Multi-Energy Method - A Framework for Vapour Cloud Explosion Blast Prediction*. Journal Hazardous Materials 12:1-10. 1985

[7] BJERKETVEDT, D., BAKKE, J. R., and WINGERDEN, K. van *Gas Explosion Handbook*. Journal Hazardous Materials 52. 1997. pp.1-150.

[8] BRADLEY, D., MITCHESON, A. *The venting of gaseous explosions in spherical vessels, I - Theory*. Combust Flame, Nr. 32. 1978. pp. 221-236.

[9] BRAY, K. N. C. *Studies of the turbulent burning velocity*. Proceedings of the Royal Society of London A431. 1990. pp. 315-325.

[10] CATES, A. T., and SAMUELS, B. *A Simple Assessment Methodology for Vented Explosions*. Journal of Loss Prevention in the Process Industries 4. 1991. pp. 287-296.

[11] CATLIN, C. A., FAIRWEATHER, M., and IBRAHIM, S. S. *Predictions of Turbulent, Premixed Flame Propagation in Explosion Tubes.* Combustion and Flame 102. 1995. pp. 115-128.

[12] CUBBAGE, P. A., SIMMONDS, W. A. *An investigation of explosion reliefs for industrial drying ovens – I Top reliefs in box ovens*. Trans. Inst. Gas Eng. 1955.

[13] ČSN EN 1991-1-7: *Zatížení konstrukcí - obecná zatížení - Mimořádná zatížení*. ČNI, Praha, 2007.

[14] FAIRWEATHER, M., HARGRAVE, G. K., IBRAHIM, S. S., and WALKER, D. G. *Studies of Premixed Flame Propagation in Explosion Tubes*. Combustion and Flame 116(4). 1999. pp. 504-518.

[15] *Fire and Explosion Guidance.* ISSUE 1. OIL & GAS UK. 2007. ISBN 1903003362.

[16] *FLACS v 9.1*. User´s Manual, Norway. GexCon AS. 2010.

[17] HJERTAGER, B. H. *Numerical Simulation of Flame and Pressure Development in Gas Explosions*. SM study no. 16. University of Waterloo Press, Ontario, Canada. 1982. pp. 407-426.

[18] HJERTAGER, B. H. *Simulation of Transient Compressible Turbulent Reactive Flows Combustion*. Science and Technology 41. 1982. pp.159-170.

[19] CHIPPETT, S. *Modeling of Vented Deflagrations.* Combustion and Flame 55. 1984. pp. 127-140.

[20] JIANG, J., LIU, Z.G., KIM, A.K. *Comparison of blast prediction models for vapor cloud explosion*. The Combustion Institute/Canada Section, Spring Technical Meeting. 2001. pp. 23.1 - 23.6.

[21] KIMINORI, T., KAZUYA, W. *Advanced Numerical Simulation of Gas Explosion for Assessing the Safety of Oil and Gas Plant.* Numerical Analysis and Scientific Computing. 2011. pp. 377-388. ISSN 978-953-307-153-4.

[22] KOZUBKOVÁ, M. *Modelování proudění tekutin*. FLUENT, CFX. Ostrava, VŠB-Technická Univerzita Ostrava. 2008. s. 142.

[23] LEA, C. J., LEDIN, H. S. *A Review of the State-of-the-Art in Gas Explosion Modelling*. Health and safety laboratory, Harpur Hill, Buton. 2002. pp. 82.

[24] LEER, B. van. *Flux Vector Splitting for the Euler Equations.* Lecture Notes in Physics, Springer-Verlag, 170. 1982. pp. 507-512.

[25] MERCX, W. P. M., and BERG, A. C. van den. *The Explosion Blast Prediction Model in the Revised CPR 14E (Yellow Book).* Process Safety Progress 16(3). 1997. pp.152-159.

[26] MOLKOV, V.V. *Explosion safety engineering: NFPA 68 and improved vent sizing technology*. Proceedings of 8th International Conference on INTERFLAM'99, vol. 2, Edinburgh. 1999. pp.1129-34.

[27] MOLKOV, V.V, DOBASHI, R, SUZUKI, M, HIRANO, T. *Venting of deflagrations: hydrocarbon-air and hydrogen-air systems*. In proceedings of the Colloquiom on Gas, Vapor, Hybrid and Fuel-Air Explosions, The International Symposium on Hazards, Prevention and Mitigation of Industrial Explosion, Schaumburg. Ill. USA. 1998. pp. 297-314.

[28] NFPA 68, *Guide for Venting of Deflagrations*. National Fire Protection Association, Quincy, MA, USA. 1998.

[29] PARK, D. J., LEE, Y. S. *A comparison on predictive models of gas explosions*. Korean Journal of Chemical Engineering, Volume 26, Issue 2. 2009. pp. 313-323. ISSN 313-323 0256-1115.

[30] PRITCHARD, D. K., FREEMAN, D. J., and GUILBERT, P. W. *Prediction of Explosion Pressures in Confined Spaces.* Journal of Loss Prevention in the Process Industries 9. 1996. pp. 205-215.

[31] PUTTOCK, J. S., YARDLEY, M. R., and CRESSWELL, T. M. *Prediction of Vapour Cloud Explosions Using the SCOPE Model*. Journal of Loss Prevention in the Process Industries 13. 2000. pp. 419-430.

[32] RASBASH, D. *The relief of gas and vapour explosions in domestic structures*. Fire research note No. 759. 1969.

[33] RAZUS, D.M. KRAUSE, U. *Comparison of empirical and semi-empirical calculation methods for venting of gas explosion*. Fire safety journal, vol. 36, issue 1, 2001. pp. 1-23. ISSN 0379-7112.

[34] RUNESS, E. *Explosion venting.* Loss Prevention, Nr. 6. 1972. pp. 63-67.

[35] SIMPSON, L.L. *Equations for the VDI and Bartknecht Nomograms.* Plant/Oper Prog 5. 1986. pp. 49-51.

[36] SOCHET, I., *Blast effects of external explosions*, Eighth International Symposium on Hazards, Prevention, and Mitigation of Industrial Explosions, Yokohama, Japan, 2010. pp. 1-32.

[37] STREHLOW, R. A., LUCKRITZ, R. T., ADAMCZYK, A. A., and SHIMPI, S. A. *The Blast Wave Generated by Spherical Flames.* Combustion and Flame 35. 1979. pp. 297-310.

[38] ŠENOVSKÝ, P., *Aplikace informačních technologií v oblasti nebezpečných látek*, Disertační práce, VŠB – Technická Univerzita Ostrava, 2008

[39] WATTERSON, J. K., CONNELL, I. J., SAVILL A. M., and DAWES, W. N. *A Solution-Adaptive Mesh Procedure for Predicting confined Explosions.* International Journal for Numerical Methods in Fluids 26. 1998. pp. 235-247.

[40] WIEKEMA, B. J. *Vapour Cloud Explosion Model*. Journal of Hazardous Materials 3. 1980. pp. 221-232.

[41] WILKENING, H., and HULD, T. *An adaptive 3-D CFD solver for explosion modelling on large scales*. 17th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Heidelberg, Germany. 1999.

[42] WROUWENVELDER, T., LEIRA, B. *Probabilistic modelling of internal gas explosions.* Joint Workshop of COST Actions TU0601 and E55, Ljubljana, Slovenia. 2009.

[43] YAO. C. *Explosion venting of low-strength equipment and structures.* Loss Prevention, Nr. 8. 1974. pp. 1-9.

[44] WINGERDEN, K. van. D*evelopments in Gas Explosion Safety in the 1990's in Norway.* FABIG Newsletter, Article R397, Issue no. 28. 2001. pp. 17-20.