

# **Manuál k programu Toxicita**

## Obsah

Úvod .....	2
Systémové požadavky .....	2
Funkcionality programu .....	2
Záložka „Výpočet toxicity“ (úvodní formulář) .....	2
Záložka „Kalibrace“ .....	3
Záložka „Naměřená data“ .....	5
Záložka „Výsledky měření“ .....	5
Nastavení mezí detekce .....	6
Kalkulačky pro převod jednotek .....	7
Formulář pro zobrazování grafů spekter .....	8

## Úvod

Tento manuál popisuje ovládání počítačového programu Toxicita, vyvinutého Technickým ústavem požární ochrany MV- Generálního ředitelství Hasičského záchranného sboru. Program slouží pro výpočet koncentrace sledovaných toxikantů, konvenčního indexu toxicity, celkovou frakční účinnou látku a letální koncentraci dle Metodiky TUPO č. 01-09, postup B „Stanovení toxické vydatnosti plyných zplodin tepelného rozkladu/hoření s fyzikálním požárním modelem kouřové komory s plynovou kytou FTIR“.

## Systémové požadavky

Počítačový program se skládá ze souborů:

Setup.ini

Toxicita.exe

helpToxicita.pdf

Počítačový program Toxicita se spouští přes soubor Toxicita.exe (neinstaluje se). Program vyžaduje operační systém Windows (XP, Vista, 7, 8, 10).

## Funkcionalita programu

Načte naměřená spektra ve formátu „csv“ nebo „jdx“ a spočítá koncentraci vybraných toxikantů (CO, CO<sub>2</sub>, HCl, HF, HBr, HCN, SO<sub>2</sub>, NO<sub>2</sub>, NO).

Spočítá průměrné hodnoty vybraných toxikantů (CO, CO<sub>2</sub>, HCl, HF, HBr, HCN, SO<sub>2</sub>, NO<sub>2</sub>, NO).

Spočítá konvenční index toxicity (CIT), celkovou frakční účinnou látku (FED) a letální koncentraci (LC)

Součástí programu jsou převodní kalkulačky mezi hmotnostní a objemovou koncentrací [mg/m<sup>3</sup>] a [ppm], a dále kalkulačka na převod tlaku mezi jednotkami tlaku [bar], [torr] a [pascal].

Zobrazuje grafy spekter.

## Záložka „Výpočet toxicity“ (úvodní formulář)

Po spuštění programu se zobrazí úvodní formulář (viz. Obr. 1), kde lze z aritmetického průměru hodnot koncentrací vybraných toxikantů ve 4. a v 8. minutě toxické vydatnosti plyných zplodin tepelného rozkladu/hoření předmětu zkoušky. Konvenční index toxicity (CIT), celková frakční účinná látka (FED) a letální koncentraci (LC) se spočítá pomocí následujících vzorců:

$$CIT_G = 0,0805 \times \sum_{i=1}^n \frac{c_i \left( \text{mg} / \text{m}^3 \right)}{C_i \left( \text{mg} / \text{m}^3 \right)}$$

$$FED(t_{príp}) = \frac{(CIT_4 + 0,5 \times CIT_8) \times 4 + CIT_8(t_{príp} - 8)}{30}$$

$$LC_{50,celk} \left( \text{g} / \text{m}^3 \right) = \frac{\Delta m}{(FED_{celk} \times V_{celk})}$$

kde  $c_i$  je koncentrace i-tého analytu/toxikantu v kouřové komoře ve 4. a 8. min.  
jako aritmetický průměr ze tří měření za podmínek opakovatelnosti

$C_i$  je referenční koncentrace i-tého analytu/toxikantu (pevná konstanta)

$t_{prip}$  je přípustná doba působení expoziční dávky, obvykle je 30 min

$\Delta m$  je (průměrný) úbytek hmotnosti zkušební vzorku při zkoušce

$V_{celk}$  je celkový objem vzduchu v  $m^3$  za standardní teploty a atmosférického tlaku (tj. 25 °C a 101,325 kPa)

CIT je konvenční index toxicity (bezrozměrná veličina)

FED je celková frakční účinná dávka (bezrozměrná veličina)

LC50 je letální koncentrace [g/m<sup>3</sup>]

**Toxicita**

Soubor Konfigurace Nápověda

Výpočet toxicity Výsledky měření Naměřená data Kalibrace

Vstupní hodnoty

	Referenční koncentrace $C_i$	$c_4$ z kyvety [mg/m <sup>3</sup> ]	$c_8$ z kyvety [mg/m <sup>3</sup> ]
CO	1380	417	673
CO <sub>2</sub>	72000	23636	31563
HCl	75	101	101
HBr	99	93	93
HF	25	18	18
HCN	55	31	31
SO <sub>2</sub>	262	54	54
NO <sub>x</sub> (=NO+NO <sub>2</sub> )	38	26	40

Přípustná doba působení expoziční dávky  $T_{prip}$  [min] 30

Objem vzduchu  $V_{celk}$  [m<sup>3</sup>] 0,5092

Koeficient 0,0805

Průměrný hmotnostní úbytek vzorku 19,14

Chyba [%] 30

Výsledky

CIT4 ± FED ±

CIT8 ± LC50 [g/m<sup>3</sup>] ±

Počítej

Obr. 1 Záložka „Výpočet toxicity“ (úvodní obrazovka)

### Záložka „Kalibrace“

Na Obr. 2 je znázorněna záložka „Kalibrace“, které slouží k definování parametrů při kalibračních parametru. Jedná se o definování průměrné teploty, tlaku a referenční délky kyvety spekter

kalibračních plynů. Dále je nutné zadat dolní a horní mez pásu, z které byl počítán obsah plochy včetně hraničních bodů baseline. Poslední nutnou položkou je zadání kalibračních rovnic vypočítané pomocí lineární a kvadratické regrese. U lineární kalibrační rovnice je formát zadání rovnice následující:

Číslo\*x +/- číslo. Při zápise se používá pro oddělení desetinných míst desetinná čárka. Například 3,5\*x-0,2.

Kvadratická kalibrační rovnice má formát zápisu:

Číslo\*x<sup>2</sup> +/- číslo\*x +/- číslo. Například 3,5\*x<sup>2</sup> +20,1\*x-0,2.

Číslo (oddělené desetinnou čárkou)\*x +/- číslo (oddělené desetinnou čárkou). Například 3,5\*x-0,2.

**Kalibrační spektra**

Plyn	Délka kyvety [m]	Průměrná teplota [°C]	Průměrný tlak [kPa]
CO	2	166,5	86,659
CO2	2	166,5	86,659
HCl	4	148,65	115,283
HBr	4	165	115,550
HF	4	92,5	109,724

**Kalibrační pásy a baseline**

Plyn	Dolní mez pásu	Horní mez pásu	Dolní mez baseline	Horní mez baseline
CO	2161,09	2163,02	2145,18	2177,48
CO2	2260,65	2261,85	2260,4	2261,85
HCl	2774,48	2777,13	2770,14	2780,5
HBr	2469,04	2471,93	2463,01	2479,65

**Kalibrační rovnice**

Plyn	Lineární kalibrace	Kvadratická kalibrace
CO	7266,5*x-152,83	19440*x <sup>2</sup> +2126,8*x+8,2204
CO2	114903*x-1489,6	658897*x <sup>2</sup> +6006,6*x+429,81
HCl	5408,8*x-410,97	4610*x <sup>2</sup> +2682,4*x-137,67
HBr	4718,7*x-194,67	4542,1*x <sup>2</sup> +2274,1*x+34,425
HF	1813,5*x-708,8	120,57*x <sup>2</sup> +1605,1*x-631,47
HCN	2122,1*x-32,923	2909,8*x <sup>2</sup> +1296,6*x+7,0088
SO2	11666*x-2,2502	145978*x <sup>2</sup> +10233*x+0,1792
NO	15115*x-27,243	68737*x <sup>2</sup> +10648*x+5,0052

Uložit nastavení kalibrace

Obr. 2 Záložka Kalibrace

### Záložka „Naměřená data“

Záložka „Naměřená data“ (viz. Obr. 3) slouží pro načtení naměřených spekter a spočtení koncentrace vybraných toxikantů (za využití kalibračních rovnic ze záložky „Kalibrace“). Ke spočítání koncentrací lze využít lineární kalibrační rovnici, kvadratickou či jejich kombinaci.

The screenshot shows the 'Toxicita' application window with the 'Naměřená data' tab selected. The window has a menu bar with 'Soubor', 'Konfigurace', and 'Nápověda'. Below the menu bar is a tab bar with 'Výpočet toxicity', 'Výsledky měření', 'Naměřená data', and 'Kalibrace'. The main content area is divided into two sections: 'Měření 4. minuta' and 'Měření 8. minuta'. Each section contains a table with columns: 'Měření', 'Soubor', 'Teplota [°C]', 'Tlak [kPa]', and 'Délka kyvety [m]'. To the right of each table are buttons 'Přidej soubor' and 'Odeber soubor'. Below the tables is a 'GroupBox11' containing a text input field. At the bottom, there are radio buttons for 'Kalibrační rovnice pro výpočet koncentrace': 'Lineární regrese', 'Kvadratická regrese', and 'Vlastní'. A 'Spočti koncentrace' button is at the very bottom.

Obr. 3 Záložka „Naměřená data“

### Záložka „Výsledky měření“

Záložka „Výsledky měření“ (viz. Obr. 4) slouží pro zobrazení koncentrací jednotlivých měření (možnost uživatelské editace). Při kliknutí pravým tlačítkem myši na oblast tabulky zobrazí se popup menu s možností vložení hodnoty meze detekce pro daný plyn.

Veličiny teplota a tlak jsou průměrné hodnoty z naměřených a načtených spekter (ze záložky „Naměřená data“). Případně lze hodnoty uživatelsky editovat.

Checkbox (ikona zaškrtnutí) s jednotlivými plyny umožňuje, aby program spočítal aritmetický průměr hodnot koncentrací a tuto hodnotu vložil do příslušného pole v záložce „Výpočet toxicity“.

Rámeček „Hmotnostní úbytek“ slouží pro vložení hmotnostního úbytku jednotlivých měření. Pro výpočet hmotnostního úbytku lze užít i jednoduchou kalkulačku, kde pro výpočet se vloží počáteční (hmotnost vzorku před zkouškou) a konečná hmotnost (hmotnost vzorku po spálení).

**Toxicita**

Soubor Konfigurace Nápověda

Výpočet toxicity Výsledky měření Naměřená data Kalibrace

Výsledky koncentrací měření ve 4. minutě

Měření	CO [ppm]	CO2 [ppm]	HCl [ppm]	HBr [ppm]	HF [ppm]	HCN [ppm]	SO2 [ppm]	NO [ppm]	NO2 [ppm]
1. měření	0	0	0	0	0	0	0	0	0

☒ Přenes CO2  
 ☒ Přenes CO  
 ☒ Přenes HCl  
 ☒ Přenes HBr  
 Teplota [°C] 25  
 Tlak [kPa] 101,325  
☒ Přenes HF  
 ☒ Přenes HCN  
 ☒ Přenes SO2  
 ☒ Přenes NOx

Výsledky koncentrací měření ve 8. minutě

Měření	CO [ppm]	CO2 [ppm]	HCl [ppm]	HBr [ppm]	HF [ppm]	HCN [ppm]	SO2 [ppm]	NO [ppm]	NO2 [ppm]
1. měření	0	0	0	0	0	0	0	0	0

☒ Přenes CO2  
 ☒ Přenes CO  
 ☒ Přenes HCl  
 ☒ Přenes HBr  
 Teplota [°C] 25  
 Tlak [kPa] 101,325  
☒ Přenes HF  
 ☒ Přenes HCN  
 ☒ Přenes SO2  
 ☒ Přenes NOx

Hmotnostní úbytek

Přidej hodnotu

Odeber hodnotu

Počáteční hmotnost vzorku

Konečná hmotnost vzorku

Vlož rozdíl

Spočti průměr a přenes hodnoty

Obr. 4 Záložka „Výsledky měření“

### Nastavení mezí detekce

Formulář slouží k uložení parametru meze detekce používaného spektrometru (viz. Obr. 5).

**Nastavení meze detekce**

Mez detekce CO [ppm]	0
Mez detekce CO2 [ppm]	0
Mez detekce HCl [ppm]	68
Mez detekce HBr [ppm]	28
Mez detekce HF [ppm]	22
Mez detekce HCN [ppm]	28
Mez detekce SO2 [ppm]	22
Mez detekce NO [ppm]	26
Mez detekce NO2 [ppm]	0
Mez detekce NOx [ppm]	26

Ulož      Zavřít

Obr. 5 formulář pro definování meze detekce daného spektrometru

### Kalkulačky pro převod jednotek

Do programu byly zakomponovány tři pomocné kalkulačky pro převod jednotek. Jedná se o kalkulačku pro převod mezi jednotkami koncentrace [mg/m<sup>3</sup>] a [ppm] (viz. Obr. 6) a o kalkulačku pro převod mezi jednotkami tlaku [bar], [torr] a [Pa] (viz. Obr. 7) a kalkulačka pro výpočet koncentrace v závislosti na teplotě a tlaku (viz. ).

**Převod jednotek**

	[mg/m <sup>3</sup> ]	[ppm]
Koncentrace CO	0	0
Koncentrace CO2	0	0
Koncentrace HCl	0	0
Koncentrace HBr	0	0
Koncentrace HF	0	0
Koncentrace HCN	0	0
Koncentrace SO2	0	0
Koncentrace NO	0	0
Koncentrace NO2	0	0

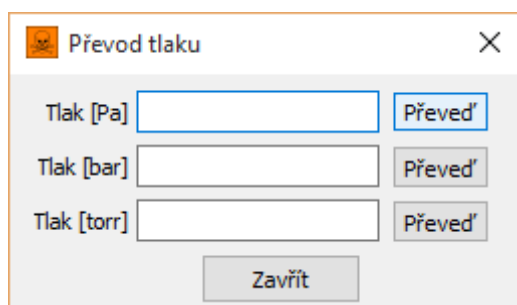
Teplota [°C]      25

Tlak [kPa]      101,325

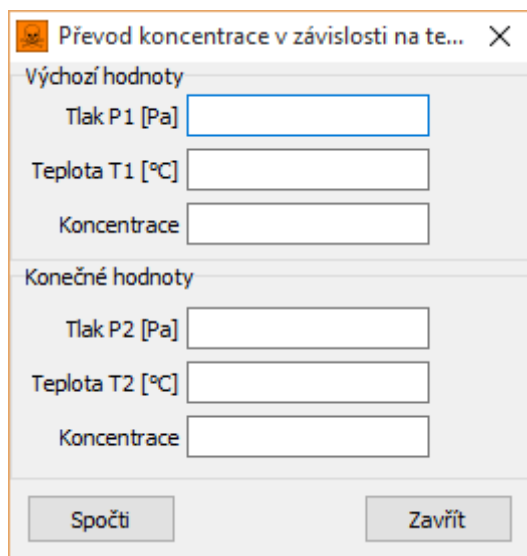
Koncentrace [ppm] = Koncentrace [mg/m<sup>3</sup>] \* K<sub>pt</sub> / M<sub>r</sub>  
 Koncentrace [mg/m<sup>3</sup>] = Koncentrace [ppm] \* M<sub>r</sub> / K<sub>pt</sub>  
 K<sub>pt</sub> = 8,314 \* (273,15 + Teplota) / Tlak

[mg/m<sup>3</sup>] -> [ppm]      Zavřít      [ppm] -> [mg/m<sup>3</sup>]

Obr. 6 Kalkulačka pro převod mezi hmotnostní a objemovou koncentrací



Obr. 7 Kalkulačka pro převod mezi jednotkami tlaku



Obr. 8 Kalkulačka pro výpočet koncentrace v závislosti na teplotě a tlaku

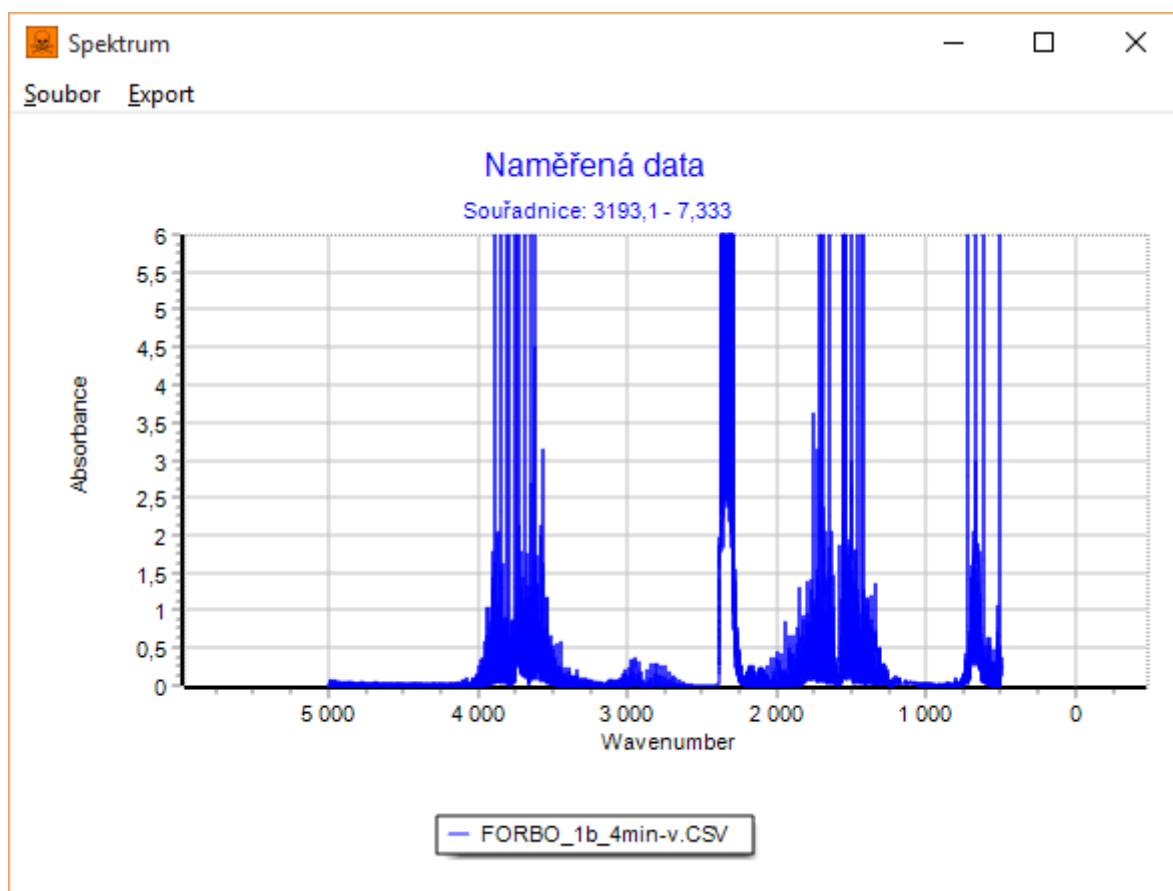
### Formulář pro zobrazování grafů spekter

Ovládání grafu: Pro přibližování nebo oddalování (zoom a unzoom) slouží převážně kolečko počítačové myši. Přibližování je též možné zmáčknutím a držením levého tlačítka myši a táhnout – vytvoří se čtverec – oblast, která bude přiblížena. Pro posunutí v grafu je nutné zmáčknout a držet pravé tlačítko myši a pohybovat se myší.

V menu – soubor lze načíst do grafu další spektrum nebo vymazat všechna doposud nahraná.

V menu – Export, lze graf vyexportovat do souboru bmp (jako obrázek) nebo vytisknout.





Obr. 9 Formulář pro zobrazení grafů spekter