

KHOA HỌC CƠ BẢN (trang 77-80)

PHƯƠNG TRÌNH TRUYỀN TẢI BỤI VÀ KHÍ THẢI CÔNG NGHIỆP TRONG KHÔNG KHÍ

VŨ BÁ DŨNG, ĐINH VĂN THIÊN, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*

Tóm tắt: Bụi và khí thải công nghiệp là nguyên nhân chủ yếu gây ô nhiễm không khí và khí quyển trái đất. Quá trình truyền tải chúng trong khí quyển rất phức tạp, phụ thuộc vào các yếu tố khí hậu và thời tiết khác nhau. Trên cơ sở lý thuyết nhiệt động lực học không thuận nghịch, quá trình truyền tải bụi và khí thải vào không khí đã được các tác giả mô tả bằng một phương trình đạo hàm riêng loại parabolic. Đây là một phương trình không quá khó để tìm được nghiệm giải tích hoặc nghiệm số, từ đó tìm được phân bố nồng độ bụi và khí thải công nghiệp trong khí quyển đối với các nguồn ô nhiễm xác định.

1. Mở đầu

Ô nhiễm môi trường không khí ngày càng trở nên nặng nề, không những ảnh hưởng lớn tới sức khỏe và chất lượng cuộc sống của loài người trên trái đất, mà còn là nguyên nhân gây ra những hiệu ứng tác động làm biến đổi khí hậu toàn cầu. Việc kiểm soát ô nhiễm không khí và khí quyển là cần thiết và quan trọng. Ô nhiễm không khí và khí quyển chủ yếu là do bụi và các khí thải công nghiệp như C, CO₂, CO, CH₄... được đưa vào khí quyển do hoạt động và sản xuất công nghiệp của con người gây ra. Muốn hạn chế ô nhiễm khí quyển, cần phải nghiên cứu bản chất của quá trình truyền tải vào khí quyển xảy ra như thế nào, từ đó có thể kiểm soát được mức độ ô nhiễm và cuối cùng là tìm ra được phương pháp khống chế được ô nhiễm bụi và khí thải công nghiệp đối với khí quyển.

Để nghiên cứu sự truyền tải các chất gây ô nhiễm khí quyển một cách tổng quát có thể sử dụng phương pháp Berliand với việc mô tả quá trình truyền tải bụi và khí thải bằng phương trình có dạng truyền nhiệt tổng quát như sau [1]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + v_x \frac{\partial C}{\partial x} + v_y \frac{\partial C}{\partial y} + v_z \frac{\partial C}{\partial z} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} (D_x \frac{\partial C}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (D_y \frac{\partial C}{\partial y}) + \\ + \frac{\partial}{\partial z} (D_z \frac{\partial C}{\partial z}) + \alpha C - \beta C + w_c \frac{\partial C}{\partial z} \end{aligned} \quad (1)$$

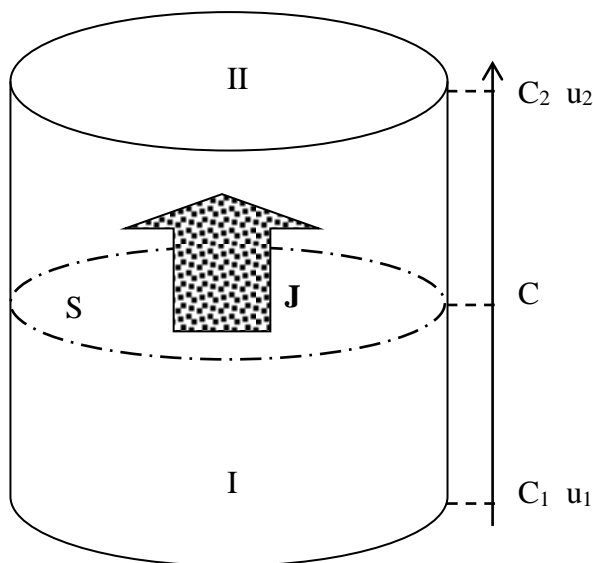
trong đó: C là nồng độ chất ô nhiễm; t là thời gian; x, y và z là các tọa độ theo trục Ox, Oy và Oz; v_x, v_y và v_z là các thành phần của vận tốc gió theo trục Ox, Oy và Oz; D_x, D_y và D_z là các thành phần của hệ số khuếch tán của chất ô nhiễm theo trục Ox, Oy và Oz; w_c là vận tốc lắng đọng của chất ô nhiễm; α là hệ số sinh chất ô nhiễm trong quá trình truyền tải; β là hệ số phân hủy chất ô nhiễm. Do phương trình này quá phức tạp nên việc tìm nghiệm của phương trình rất khó khăn và ít được áp dụng. Vì vậy có thể áp dụng lý thuyết nhiệt động lực học không thuận nghịch để mô tả quá trình truyền tải chất ô nhiễm vào không khí và khí quyển bằng một phương trình đạo hàm riêng dạng parabolic dạng truyền tải khuếch tán và có thể tìm nghiệm giải tích hoặc nghiệm số trong các điều kiện khác nhau [2 ÷ 5].

2. Phương trình truyền tải bụi và khí thải công nghiệp trong không khí

Trong trường hợp tốc độ gió không quá lớn thì quá trình truyền tải bụi và khí thải vào không khí theo hai cơ chế chính là khuếch tán và đối lưu [6, 7]. Quá trình khuếch tán và đối lưu là các quá trình bất thuận nghịch, tuân theo nguyên lý cơ bản của nhiệt động lực học không thuận nghịch là nguyên lý tăng entropi. Áp dụng cho quá trình truyền tải vật chất nói chung, mật độ dòng truyền tải J(m²/s) theo phương Ox được xác định qua tốc độ chuyển

động trung bình u (m/s) của các phân tử theo phương Ox và nồng độ phân tử C (m^{-3}) [8 ÷ 11]:

$$J = uC . \quad (2)$$



Hình 1. Dòng truyền tải vật chất J giữa hai vùng I và II qua tiết diện S do chênh lệch nồng độ phân tử và chênh lệch tốc trung bình của phân tử

Xét hai lớp chất khí I và II (hình 1) có nồng độ phân tử và tốc độ chuyển động nhiệt là C_1, u_1 và C_2, u_2 với $C_1 \neq C_2$ và $u_1 \neq u_2$, với giả thiết:

$$u_1 = u + nu \quad (n > 0) \quad (3)$$

$$u_2 = u \quad (4)$$

$$C_1 = C - \frac{\Delta C}{2} \quad (5)$$

$$C_2 = C + \frac{\Delta C}{2} \quad (6)$$

thì mật độ dòng các phân tử từ lớp I sang lớp II là:

$$J_1 = u_1 C_1 = (u + nu) \left(C - \frac{\Delta C}{2} \right), \quad (7)$$

và mật độ dòng các phân tử từ lớp II sang lớp I là:

$$J_2 = u_2 C_2 = u \left(C + \frac{\Delta C}{2} \right). \quad (8)$$

Mật độ dòng phân tử chuyển qua tiết diện S là:

$$J = J_1 - J_2 = -\frac{(n+2)u}{2} \Delta C + nuC. \quad (9)$$

Trong những mô tả vĩ mô thì ta có [11]:

$$\Delta C = \lambda \frac{\partial C}{\partial x}, \quad (10)$$

với λ (m) là quãng đường tự do trung bình của các phân tử khí. Sử dụng công thức (10) thì phương trình (9) trở thành:

$$J = -\frac{(n+2)u\lambda}{2} \frac{\partial C}{\partial x} + nuC. \quad (11)$$

Có thể viết phương trình (11) dưới dạng sau:

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial x} + vC, \quad (12)$$

ở đây, D (m^2/s) là hệ số khuếch tán và v (m/s) là vận tốc dòng đối lưu được xác định bởi các biểu thức sau:

$$D = \frac{(n+2)u\lambda}{2}. \quad (13)$$

$$v = nu. \quad (14)$$

Các đại lượng u và λ phụ thuộc vào nhiệt độ T theo các công thức sau:

$$u = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}, \quad (15)$$

$$\lambda = \frac{kT}{\sqrt{2}\pi\sigma^2 p}, \quad (16)$$

ở đây, k là hằng số Boltzmann, T (K) là nhiệt độ tuyệt đối, m (kg) là khối lượng của phân tử, σ (m) là đường kính phân tử và p (N/m^2) là áp suất.

Thay các biểu thức (15) và (16) vào (13) và (14) ta được biểu thức hệ số khuếch tán và vận tốc dòng đối lưu:

$$D = (n+2) \sqrt{\frac{k^3}{\pi^3 m}} \cdot \frac{T^{3/2}}{\sigma^2 p}. \quad (17)$$

$$v = 2n \sqrt{\frac{2kT}{\pi m}}. \quad (18)$$

Phương trình (12) với hệ số khuếch tán (17) và vận tốc đối lưu (18) là biểu thức của mật độ dòng phân tử J dọc theo trục Ox. Dòng phân tử J được tạo ra do khuếch tán (do chênh lệch nồng độ phân tử) và do đối lưu (do chênh lệch nhiệt độ)

3. Quá trình khuếch tán - đối lưu bụi và khí thải công nghiệp trong không khí

Với mật độ dòng phân tử dạng (12) có thể áp dụng định luật Fick II [12, 13]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x} \quad (19)$$

Thay (12) vào (19) ta có:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} \quad (20)$$

Phương trình (20) là phương trình mô tả quá trình khuếch tán – đối lưu với hệ số khuếch tán (17) và vận tốc đối lưu (18).

a. Mật độ dòng truyền tải: Quá trình truyền tải bụi và khí thải vào khí quyển bằng con đường khuếch tán và đối lưu được đánh giá định lượng bởi mật độ dòng trong phương trình (12). Mật độ dòng truyền tải này được chia làm hai phần, một phần do khuếch tán một phần do đối lưu.

- Trường hợp chỉ có chênh lệch nồng độ phân tử, không có sự chênh lệch nhiệt độ (xét trong phạm vi gần gần mặt đất), thì quá trình truyền tải chủ yếu do khuếch tán nên mật độ dòng truyền tải trở thành mật độ dòng khuếch tán dạng định luật Fick I:

$$J = -(n+2) \sqrt{\frac{k^3}{\pi^3 m} \cdot \frac{T^{3/2}}{\sigma^2 p}} \frac{\partial C}{\partial x} \quad (21)$$

- Trường hợp chỉ có sự chênh lệch nhiệt độ, không có sự chênh lệch nồng độ phân tử (ít xảy ra) thì quá trình truyền tải chủ yếu do đối lưu nên mật độ dòng truyền tải trở thành mật độ dòng đối lưu:

$$J = nuC \quad (22)$$

- Trường hợp có cả chênh lệch nồng độ phân tử và chênh lệch nhiệt độ (xét trong phạm vi rộng), thì quá trình truyền tải do cả khuếch tán và đối lưu nên mật độ dòng truyền tải có dạng tổng quát (10) (transmission – diffusion equation) [14, 15].

b. Tốc độ khuếch tán phụ thuộc vào quá trình đối lưu: Từ biểu thức của hệ số khuếch tán khi xảy ra cả hai quá trình đồng thời khuếch tán và đối lưu thì quá trình đối lưu đã làm cho tốc độ khuếch tán tăng lên.

- Khi không có đối lưu (nhiệt độ đồng đều), khi đó ta có $u_1 = u_2$ và $n = 0$, hệ số khuếch tán có dạng:

$$D = 2 \sqrt{\frac{k^3}{\pi^3 m} \cdot \frac{T^{3/2}}{\sigma^2 p}} \quad (23)$$

- Khi có đối lưu (nhiệt độ không đồng đều), khi đó ta có $u_1 = nu_2$ và $n > 1$, hệ số khuếch tán có dạng:

$$D = (n+2) \sqrt{\frac{k^3}{\pi^3 m} \cdot \frac{T^{3/2}}{\sigma^2 p}} \quad (24)$$

Phương trình (24) cho thấy hệ số khuếch tán trong môi trường có đối lưu lớn hơn hệ số khuếch tán không có đối lưu, nói cách khác là bụi và các chất thải sẽ khuếch tán vào khí quyển nhanh hơn khi có cả quá trình đối lưu.

c. Xác định nồng độ bụi và khí thải trong khí quyển: Dạng phương trình đạo hàm riêng parabolic (20), nghiệm của phương trình là nồng độ $C(x, t)$ phụ thuộc vào tọa độ x và thời gian t , phương trình (20) có nghiệm duy nhất với một điều kiện biên và điều kiện ban đầu xác định. Nghiệm $C(x, t)$ cho biết nồng độ bụi và khí thải tại tọa độ x và thời điểm t bất kỳ.

5. Kết luận

Quá trình truyền tải bụi và khí thải vào khí quyển thực hiện theo hai cơ chế chính là khuếch tán và đối lưu. Có thể mô tả quá trình truyền tải bụi và khí thải vào khí quyển bằng một phương trình đạo hàm riêng cấp hai dạng parabolic tuyến tính.

Quá trình đối lưu ảnh hưởng trực tiếp đến quá trình khuếch tán và hệ số khuếch tán. Đối lưu càng mạnh thì hệ số khuếch tán càng lớn và quá trình khuếch tán càng nhanh.

Những vấn đề cần được tiếp tục nghiên cứu trong thời gian tới là: Xây dựng mô hình bài toán truyền tải bụi và khí thải, đưa ra điều kiện biên điều kiện ban đầu để tìm nghiệm của phương trình (20) từ đó tìm được phân bố nồng độ bụi C và khí thải CO_2 trong khí quyển.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. P. Solin, 2005. Partial Differential Equations and the Finite Element Method. Hoboken, NJ: J. Wiley & Sons.
- [2]. M. E. Berliand, 1974. Problems in atmospheric diffusion and air pollution. Leningrad, Gidrometeoizdat, Russian.
- [3]. L. C. Evans, 1998. Partial Differential Equations, Providence. American Mathematical Society.

- [4]. J. Jost, 2002. Partial Differential Equations. New York: Springer-Verlag.
- [5]. Y. Pinchover, J. Rubinstein, 2005. An Introduction to Partial Differential Equations. New York: Cambridge University Press.
- [6]. Luke L. M. Heaton, Eduardo López, Philip K. Maini, Mark D. Fricker and Nick S. Jones, 2012. Advection, diffusion, and delivery over a network. Phys. Rev. E 86, 021905
- [7]. Pandis Spyros N. Seinfeld John H., 2006. Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change. J. Wiley.
- [8]. Vu Ba Dung, 2001. On the simultaneous diffusion equation system of boron, arsenic and point defect in silicon material. Journal of science, Natural sciences, t. XVII, (3), pp. 1-6
- [9]. Vu Ba Dung and Dao Khac An, 2001. Preliminary Results of Numerical Profiles for Simultaneous Diffusion of Boron and Point Defect in Silicon using the Irreversible Thermodynamic Theory. Defect and Diffusion Forum. Vol. 194-199, pp. 647- 652.
- [10]. Vu Ba Dung, Dao Khac An and Nguyen Ngoc Long, 2010. The diffusivities of random walk, gradient concentration diffusion and simulation of boron diffusion in silicon based on interstitialcy mechanism. Proceedings of The first Academic Conference on Natural Science for Master and PhD Students from CLV, Laos, pp. 311-318.
- [11]. Vu Ba Dung, Dao Khac An and Nguyen Ngoc Long, 2010. Compatible investigation of the complex diffusion problem based on Fick theory, irreversible thermodynamic theory and general force law. Proceedings of The first Academic Conference on Natural Science for Master and PhD Students from CLV. Laos, pp. 319-325.
- [12]. G.D.C.Kuiken, 1994. Thermodynamics of Irreversible Processes: Applications to Diffusion and Rheology, Wiley, London.
- [13]. J. Philibert, 2006. One and half century of diffusion: Fick, Einstein before and beyond, Diffusion Fundamentals. pp.1-19.
- [14]. J. Jost, 2002. Partial Differential Equations. New York: Springer-Verlag.
- [15]. Y. Pinchover, J. Rubinstein, 2005. An Introduction to Partial Differential Equations. New York: Cambridge University Press.

SUMMARY

Transport equation of dust and industrial exhaust into the atmosphere Vu Ba Dung, Dinh Van Thien, *Hanoi University of Mining and Geology*

Air and atmosphere are polluted by dust and industrial exhaust. Transport process of dust and industrial exhaust are very complex depending on conditions of climate and weather. Based on irreversible thermodynamics, transport process of dust and industrial exhaust to atmosphere, which are described by a parabolic equation. That equation has analytic solution or digital solution and we could find distribution of dust and industrial exhaust concentration in the atmosphere. In other worlds, we can control the dust and industrial exhaust pollution in the atmosphere.

Future research: solving the equation of the dust and industrial exhaust transport.