

LƯƠNG ĐỨC PHẨM

(Tổng Chủ biên kiêm Chủ biên)

NGUYỄN XUÂN NGUYỄN - PHẠM HỒNG HẢI

Cơ sở khoa học trong công nghệ bảo vệ môi trường

TẬP BỐN

**MÔ HÌNH HOÁ CÁC QUÁ TRÌNH
THIẾT BỊ CÔNG NGHỆ MÔI TRƯỜNG**



NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC VIỆT NAM

LUONG ĐỨC PHẨM (Tổng Chủ biên kiêm Chủ biên)
NGUYỄN XUÂN NGUYỄN – PHẠM HỒNG HẢI

CƠ SỞ KHOA HỌC
TRONG CÔNG NGHỆ BẢO VỆ MÔI TRƯỜNG

TẬP BỐN

MÔ HÌNH HOÁ CÁC QUÁ TRÌNH THIẾT BỊ
CÔNG NGHỆ MÔI TRƯỜNG

NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC VIỆT NAM

Công ty cổ phần Dịch vụ xuất bản Giáo dục Hà Nội - Nhà xuất bản Giáo dục Việt Nam
giữ quyền công bố tác phẩm

268-2009/CXB/6-472/GD

Mã số : 7K637H9 - NĐN

LỜI NÓI ĐẦU

Sự phát triển như vũ bão của khoa học kĩ thuật trong vòng nửa thế kỉ gần đây đã làm cho môi trường sống của chúng ta ngày càng xấu đi. Trái Đất - ngôi nhà chung của chúng ta, cái nôi của sự sống muôn loài không còn bình yên và xanh tươi nữa. Hằng ngày, hàng ngàn cánh rừng bị tàn phá, lũ lụt, bão tố hoành hành cuốn trôi màu mỡ của đất, bầu khí quyển trở nên ngột ngạt với các khí thải độc hại. Các chất thải của con người cũng như sản xuất công nghiệp, nông nghiệp càng ngày càng gây ô nhiễm nhiều hơn cho môi trường đất, môi trường nước.

Nước ta trong thời kì công nghiệp hoá và hiện đại hoá cũng đang gặp những vấn đề bức xúc về môi trường như sự bùng nổ dân số, nạn phá rừng, sử dụng phân hoá học và hoá chất bảo vệ thực vật ...

Để công tác bảo vệ môi trường có kết quả, một trong những nhiệm vụ chủ yếu là triển khai công nghệ xử lí ô nhiễm môi trường. Trong những năm gần đây, có một số ấn phẩm về công nghệ bảo vệ môi trường, song vấn đề khoa học của lĩnh vực này chưa được đề cập đầy đủ và hệ thống. Vì vậy, chúng tôi - tập thể các nhà khoa học thuộc các viện nghiên cứu và các trường đại học - biên soạn bộ sách "Cơ sở khoa học trong công nghệ bảo vệ môi trường". Bộ sách gồm 4 tập :

Tập một : Sinh thái học và môi trường

Tập hai : Cơ sở vi sinh học trong công nghệ môi trường

Tập ba : Các quá trình hoá học trong công nghệ môi trường

Tập bốn : Mô hình hoá các quá trình thiết bị công nghệ môi trường

Theo quan điểm phân tích hệ thống, khi xây dựng các hệ công nghệ không chất thải và tiết kiệm năng lượng, viện sĩ Kafarov ... đã đề xuất ứng dụng các phương pháp mô hình hoá toán học và tối ưu hoá của điều khiển học trong nghiên cứu và triển khai các quá trình công nghệ. Việc ứng dụng các phương pháp nghiên cứu hiện đại trên vào lĩnh vực công nghệ môi trường đã cho những kết quả bước đầu tốt đẹp.

Khi biên soạn Tập bốn "Mô hình hoá các quá trình thiết bị công nghệ môi trường", chúng tôi dựa trên cơ sở những tài liệu mới nhất của thế giới công bố kết quả nghiên cứu trong khoảng 20 năm gần đây. Tập sách này nhằm truyền bá và đưa vào ứng dụng mô hình hoá quá trình thiết bị công nghệ môi trường trong điều kiện Việt Nam, góp phần giải quyết tình trạng ô nhiễm môi trường ở nước ta. Những tài liệu mà chúng tôi khai thác được phần lớn nói về nước thải, một phần về khí thải cho nên kết cấu của cuốn sách này cũng phản ánh mối tương quan trên.

Cuốn sách gồm 7 chương:

Chương I. Phương pháp mô hình hoá toán học

Chương II. Những mô hình cơ sở của quá trình xử lý nước thải

Chương III. Mô hình hoá quá trình xử lý nước thải bằng phương pháp sinh học hiếu khí

Chương IV. Mô hình hoá quá trình xử lý nước thải bằng phương pháp sinh học kỵ khí

Chương V. Xây dựng mô hình toán học của các sơ đồ công nghệ tối ưu làm sạch nước thải

Chương VI. Giám sát sự ô nhiễm môi trường nước do nước thải

Chương VII. Mô hình kiểm soát ô nhiễm không khí

Kết cấu của cuốn sách có thể chưa hẳn đã bao quát toàn bộ những vấn đề mà bạn đọc quan tâm. Tuy nhiên, theo chúng tôi bước đầu cũng giới thiệu được những thành tựu cơ bản của thế giới trong việc áp dụng phương pháp mô hình hoá toán học vào lĩnh vực công nghệ môi trường.

Để có thể hiểu rõ và vận dụng vào thực tiễn, bạn đọc cần có những kiến thức cơ bản về quá trình thiết bị công nghệ hoá học, đại số tuyến tính, lý thuyết xác suất và thống kê toán học, toán học tính toán, ngôn ngữ thuật toán và kỹ thuật tin học.

Trong quá trình biên soạn cuốn sách này có thể còn những thiếu sót, rất mong được bạn đọc thông cảm và góp ý. Thư từ xin gửi về:

– Nhà xuất bản Giáo dục, 81 Trần Hưng Đạo – Hà Nội

– Liên hiệp Khoa học – Sản xuất Công nghệ hoá học, 18 Hoàng Quốc Việt – Hà Nội

– Trung tâm Tư vấn chuyển giao công nghệ Nước sạch và Môi trường, 1001 Hoàng Quốc Việt – Hà Nội

Các tác giả

Chương I

PHƯƠNG PHÁP MÔ HÌNH HOÁ TOÁN HỌC

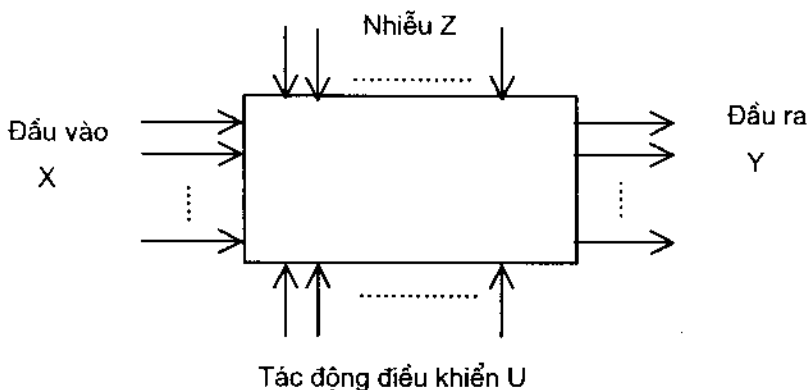
Mô hình hoá toán học được sử dụng rộng rãi trong việc nghiên cứu, thiết kế và xây dựng các hệ thống công nghệ hoá học, sinh học và môi trường. Dưới đây, ta sẽ xem xét các khái niệm cơ bản liên quan đến phương pháp mô hình hoá toán học.

Hệ thống là bộ phận cần nghiên cứu của một không gian, liên hệ với phần còn lại của không gian đó (môi trường) bởi các liên kết (thông tin). Hệ thống có cấu trúc nội tại nhất định, gồm những phần tử thuộc nhiều thể loại được liên hệ với nhau bởi các mối liên kết cũng thuộc nhiều thể loại.

Một định nghĩa hệ thống như thế cho ta khả năng thực hiện hình thức hoá toán học đối tượng nghiên cứu đảm bảo cho việc tìm hiểu sâu bản chất của nó và nhận được những quy luật về lượng có khả năng hiểu rõ hơn về đối tượng nghiên cứu.

Hệ thống công nghệ hoá học là tập hợp các quá trình hoá lí xảy ra trong một hệ thống và các phương tiện để thực hiện chúng. Như vậy, hệ thống công nghệ hoá học bao gồm bản thân quá trình hoá học và thiết bị để tiến hành quá trình hoá học, các phương tiện để kiểm tra và điều khiển quá trình hoá học, các mối liên hệ giữa chúng.

Hệ thống tác động qua lại với môi trường bên ngoài và có thể được đánh giá thông qua các đầu vào X và đầu ra Y (hình 1.1).



Hình 1.1. Cấu trúc đơn giản nhất của hệ thống

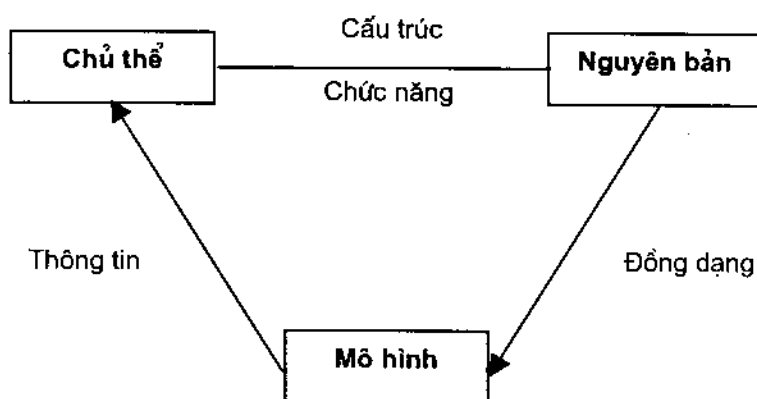
Đầu vào có thể là nguyên liệu để chế biến, số lượng, thành phần, nhiệt độ của nó... . Đầu ra có thể là lượng sản phẩm, tính chất, nhiệt độ của nó... Thường thì hệ thống bị tác động của nhiều Z và để điều khiển nó sao cho hệ thống hoạt động theo hướng mong muốn, ta sử dụng tác động điều khiển U .

Tương tự, khái niệm trên dễ dàng chuyển sang áp dụng trong công nghệ sinh học, công nghệ môi trường.

Để triển khai công nghệ, cần phải nắm được bản chất của hệ thống qua các hàm số toán học. Nhưng để có được các hàm số toán học đó, chúng ta không thể sao chép nguyên si tất cả mọi nét mà chúng ta chỉ chọn lọc những nét cơ bản nhất phản ánh các đặc điểm công nghệ của hệ thống. Vì vậy, chúng ta phải sử dụng phương pháp mô hình hoá.

Theo viện sĩ Stoff *"Một mô hình là một đối tượng được một chủ thể nào đó trên cơ sở của sự đồng dạng về cấu trúc và chức năng dùng thay thế cho một nguyên bản tương ứng để giải quyết một nhiệm vụ nhất định"*.

Như vậy, cùng một nguyên bản có thể có nhiều mô hình. Tùy theo nhiệm vụ cần giải quyết, chủ thể sẽ tạo ra những mô hình khác nhau từ cùng một nguyên bản. Quan hệ giữa chủ thể, nguyên bản và mô hình được biểu diễn trên hình 1.2.



Hình 1.2. Quan hệ giữa chủ thể, nguyên bản và mô hình

Để có mô hình cần phải có các bước trừu tượng hoá đối tượng thực. Bước trừu tượng hoá thứ nhất là mô tả cấu trúc mô hình. Bước trừu tượng hoá thứ hai là đưa ra các hàm số toán học mô tả hành vi của hệ thống, mô tả chức năng của hệ thống. Chỉ khi đưa ra được các hàm số toán học, chúng ta mới có thể định lượng được hệ thống.

Kết quả của bước trừu tượng hoá thứ hai là hàm số toán học hay mô hình toán học. Vậy mô hình toán học là gì? Theo Stoff *"Mô hình toán học là biểu diễn toán học những mặt chủ yếu của một đối tượng theo một nhiệm vụ nào đó, trong một phạm vi giới hạn, với một độ chính xác vừa đủ và ở một dạng thích hợp cho sự vận dụng."*

Điều đó có nghĩa là mô hình toán học gắn với một nguyên bản nhất định với 4 điều kiện kèm theo:

- Chỉ mô tả những mặt chính mà chủ thể (con người) quan tâm;
- Mô tả trong một phạm vi giới hạn;
- Đòi hỏi độ chính xác vừa đủ chứ không đòi hỏi độ chính xác cao nhất;
- Đòi hỏi khả năng vận dụng của mô hình đã được lập trong điều kiện cụ thể.

Mô hình hoá toán học được thực hiện trong 3 giai đoạn liên quan chặt chẽ với nhau:

- Xây dựng mô hình toán học;
- Lập chương trình bằng một ngôn ngữ thuật toán để giải tìm giá trị của các thông số;
- Xác lập tính tương hợp của mô hình với quá trình thực.

1.1. XÂY DỰNG MÔ HÌNH TOÁN HỌC

Xây dựng mô hình toán học là bước hệ trọng nhất và tinh vi nhất. Ở đây đòi hỏi không chỉ kiến thức toán học mà còn cả sự hiểu biết sâu sắc bản chất của các hiện tượng cần mô tả. Việc nắm vững các phương pháp của điều khiển học là cơ sở để hiểu rõ những nguyên tắc xây dựng mô hình toán học của các quá trình công nghệ.

Người ta bắt đầu xây dựng mô hình toán học từ việc mô tả hình thức đối tượng mô hình hoá. Ở đây cần phải mô tả đối tượng bằng ngôn ngữ toán học, thể hiện nó ở dạng một hệ phương trình nào đó biểu diễn quan hệ hàm giữa các thông số riêng biệt của mô hình.

Một thủ thuật xây dựng mô hình toán học là nguyên lí khối. Theo nguyên lí này, sau khi đã xác định được tập hợp các quá trình cơ sở thì từng quá trình đó sẽ được khảo sát riêng biệt (theo các khối) trong những điều

kiện gắn nhất với điều kiện hoạt động của đối tượng mô hình hoá. Kết quả tương ứng với mỗi quá trình cơ sở là một toán tử hàm cơ sở với những thông số đủ gần với giá trị thực.

Trong quá trình mô hình hoá, người ta bắt đầu từ việc khảo sát phần thuỷ động – cơ sở của mô hình tương lai. Phần này phản ánh đối tượng "lạnh" – tức là đối tượng chưa có các biến đổi hoá lí nhưng đã xét tới tải trọng thực tế theo các pha lên thiết bị. Cần nhấn mạnh rằng, toán tử hàm cơ sở ở đây thường là tuyến tính và đó là các phương trình vi phân tuyến tính hay các phương trình tích phân tuyến tính với hạt nhân ở dạng hàm phân bố các phần tử của dòng theo thời gian lưu trong thiết bị.

Sau đó, nghiên cứu động học của các phản ứng hoá sinh học, tốc độ của các quá trình truyền nhiệt và chuyển khối, động học chuyển pha ở các điều kiện gần với điều kiện vận hành thiết bị và thành lập những toán tử hàm cơ sở tương ứng.

Giai đoạn tiếp theo của xây dựng mô hình toán học là hợp thể hoá các toán tử hàm cơ sở thành một toán tử hàm kết quả chung tạo nên mô hình toán học của đối tượng. Một yếu tố quan trọng của hợp thể hoá là sự phối hợp tương hỗ đúng đắn của các toán tử riêng biệt. Đây là điều không phải bao giờ cũng làm được do khó tính tới tất cả các quan hệ nhân quả giữa các quá trình cơ sở riêng biệt.

Trong thành phần *mô tả toán học* xây dựng trên cơ sở bản chất vật lí của đối tượng mô hình hoá có thể chia ra các nhóm phương trình sau:

1. Các phương trình cân bằng vật chất và năng lượng được viết trên cơ sở cấu trúc thuỷ động của các dòng. Nhóm phương trình này đặc trưng cho sự phân bố trong các dòng của nhiệt độ, thành phần và của cả các tính chất liên quan đến chúng như khối lượng riêng, độ nhớt, nhiệt dung...

2. Các phương trình của các quá trình "cơ sở" cho phần tử cục bộ của dòng. Thuộc nhóm này là mô tả các quá trình trao đổi chất, trao đổi nhiệt, các phản ứng hoá sinh học...

3. Các hệ thức lí thuyết, bán kinh nghiệm và thực nghiệm giữa những thông số khác nhau của quá trình như sự phụ thuộc của hệ số truyền khối vào tốc độ dòng của các pha, sự phụ thuộc của nhiệt dung dung dịch vào thành phần...

4. Các ràng buộc lên các thông số của quá trình, chính xác hơn là các ràng buộc tồn tại khách quan trên khoảng thay đổi của một loạt tham số mà ta cần lưu ý khi mô hình hoá quá trình.

Trong trường hợp không có hoặc có rất ít lượng thông tin lí thuyết về đối tượng mô hình hoá, khi mà thậm chí không biết được sơ bộ dạng các hệ thức mô tả các tính chất của đối tượng thì các phương trình của mô tả toán học có thể biểu diễn ở dạng một hệ các quan hệ thực nghiệm nhận được trên cơ sở khảo sát thống kê đối tượng thực. Những mô hình này thường được gọi là *mô hình thống kê*. Chúng có dạng của những hệ thức tương quan và hồi quy giữa các biến vào và biến ra của quá trình. Để có những hệ thức đó, điều kiện cần là tiến hành khảo sát thực nghiệm trên đối tượng nghiên cứu. Ngoài nhược điểm trên đối với các mô hình thống kê còn nhược điểm nữa là chúng chỉ đúng trong một khoảng thay đổi hẹp của các thông số, nếu mở rộng phải chọn hàm mô tả phức tạp hơn. Tất nhiên, trong cấu trúc của những mô hình thống kê không phản ánh rõ các tính chất vật lí của đối tượng nghiên cứu nên khó khái quát hoá kết quả nhận được để sử dụng sau này.

Khác với mô hình thống kê, những mô hình toán học được xây dựng có tính tới những quy luật cơ bản của quá trình xảy ra trong đối tượng mô hình hoá, phản ánh chính xác hơn về chất kể cả trong trường hợp thiếu những quan hệ không đủ chính xác về lượng giữa các thông số của mô hình. Do đó có thể sử dụng những mô hình toán học đó để nghiên cứu những tính chất chung của đối tượng mô hình hoá thuộc một nhóm nhất định.

Khi chọn mô hình cần phải tính tới các điểm sau:

- Mô hình phải phản ánh tương đối đầy đủ tính chất của các dòng vật chất và năng lượng trong một mô tả toán học tương đối đơn giản.
- Các thông số của mô hình có thể xác định được bằng thực nghiệm hay bằng một phương pháp khác.
- Trong trường hợp các hệ dị thể mô hình được chọn cho từng pha riêng biệt, hơn nữa đối với 2 pha chúng có thể như nhau hoặc khác nhau.

Cần chú ý rằng, với việc thay đổi chế độ thuỷ động của hệ thì dạng của mô hình có thể thay đổi. Khi xây dựng mô hình toán học, các phương trình ở những dạng khác nhau được sử dụng. Đó là :

Các phương trình đại số mô tả toán học các chế độ ổn định của đối tượng, xem xét nó như là đối tượng với các tham số tập trung. Ví dụ có thể là thiết bị phản ứng trộn lí tưởng.

Các phương trình vi phân thường được sử dụng để mô tả các chế độ không ổn định (động) của các đối tượng với các tham số tập trung và cả các chế độ ổn định của các đối tượng với những tham số phân bố, trong đó giá trị của tham số chỉ phụ thuộc vào một tọa độ không gian. Trong trường hợp thứ nhất với tư cách là biến độc lập trong phương trình vi phân, ta chọn thời gian, trong trường hợp thứ hai – tọa độ không gian.

Các phương trình vi phân đạo hàm riêng được sử dụng để mô tả động lực học của đối tượng với các tham số phân bố và để mô tả cả các chế độ ổn định của những đối tượng mà sự phân bố theo hơn một tọa độ không gian. Khi mô tả động lực học của đối tượng thì đối với các phương trình vi phân đạo hàm riêng ngoài các điều kiện ban đầu còn phải cho trước cả các điều kiện là hàm số của thời gian. Đối với chế độ ổn định của các đối tượng mô tả bằng các phương trình vi phân đạo hàm riêng thì chỉ cho trước các điều kiện biên phụ thuộc tọa độ.

Trong một loạt trường hợp cần xét quá trình dưới góc độ là quá trình có bản chất *xác định* và có bản chất *ngẫu nhiên*. Khi đó, mô tả toán học của đối tượng thường biểu diễn ở dạng *các phương trình vi tích phân*. Ví dụ, hình thức trên đặc trưng cho phương trình cân bằng tính chất của các phần tử của pha phân tán trong thiết bị, nơi mà các hiệu ứng tác động lẫn nhau (phân nhỏ – tụ hợp) được ghi ở dạng những tích phân trong phương trình vi phân đối với hàm phân bố đa chiều của các phần tử theo những tính chất hoá lí. Một ví dụ khác có thể là phương trình vi phân mô tả quá trình khuếch tán hay trao đổi nhiệt, chuyển tọa độ thời gian thành hàm phân bố các phần tử của dòng theo thời gian lưu trong thiết bị.

Cần nhấn mạnh rằng, đôi khi khảo sát đối tượng bằng phương pháp mô hình hoá toán học mô tả bằng các phương trình vi phân, tích phân hay vi tích phân là một nhiệm vụ tính toán rất phức tạp. Do đó, trong một loạt trường hợp thay vì các phương trình kể trên, người ta sử dụng hệ các phương trình hữu hạn, từ một đối tượng liên tục với các tham số phân bố chuyển thành đối tượng gián đoạn với các tham số tập trung. Đó chính là *cấu trúc dây hộp* gồm một chuỗi hộp nối tiếp nhau. Trong thực tế cũng tồn tại những cấu trúc như thế, ví dụ, các thiết bị phản ứng phân chia thành các ngăn, tháp đĩa...

1.2. THUẬT TOÁN HOÁ MÔ HÌNH TOÁN

Sau khi đã lập mô tả toán học và chọn các điều kiện biên, điều kiện ban đầu tương ứng cần tiến hành giai đoạn hai của mô hình hoá: đưa nhiệm vụ đến đích tức là chọn phương pháp giải và lập chương trình tính (thuật toán).

Tuy giai đoạn này rất công kênh nhưng nó lại được máy tính hỗ trợ và nhờ sự phát triển của công nghệ, máy tính cá nhân hiện nay gọn, bộ nhớ lớn, tốc độ tính toán cao. Vấn đề còn lại là con người chọn phương pháp giải và lập chương trình bằng ngôn ngữ thuật toán.

*** Chọn phương pháp số**

Khi chọn phương pháp để giải các phương trình của mô tả toán học thường chú ý tới việc đảm bảo tính nhanh nhưng chiếm bộ nhớ ít nhất. Lẽ dĩ nhiên, yêu cầu độ chính xác cần thiết phải được đảm bảo.

Phần lớn các phương pháp số là phương pháp lặp. Điều này có nghĩa là lời giải là giới hạn của một chuỗi phép tính gần đúng nào đó. Nếu chuỗi phép tính đó đi đến một giới hạn thì quá trình gọi là *hội tụ* có nghĩa là tốt, còn ngược lại *không hội tụ* là không đạt yêu cầu.

Việc sử dụng các phương pháp lặp đáp ứng yêu cầu dùng ít nhất bộ nhớ của máy bởi vì các phép tính gần đúng liên tiếp được thực hiện theo cùng những công thức nhưng chỉ với những giá trị số khác nhau.

Trước khi chọn một phương pháp số nào đó cần phải phân tích những hạn chế của phương pháp đó. Thường thì một hàm số hay hệ phương trình ban đầu cần được biến đổi một cách tương ứng để thích hợp cho việc sử dụng hiệu quả phương pháp số.

Khi chọn một phương pháp số thì điểm chủ yếu là kích cỡ của bài toán. Có những phương pháp chỉ thích ứng với những bài toán nhỏ. Việc chọn một phương pháp thích hợp sẽ làm giảm thời gian tính toán và bộ nhớ máy tính mà nó chiếm giữ. Ví dụ, nếu N – số ẩn số của hệ phương trình đại số tuyến tính thì nếu giải bằng phương pháp chính xác (ví dụ phương pháp Gauss) khối lượng tính toán sẽ tỉ lệ thuận với N^3 , còn nếu giải bằng phương pháp lặp đơn giản thì chỉ còn N^2 .

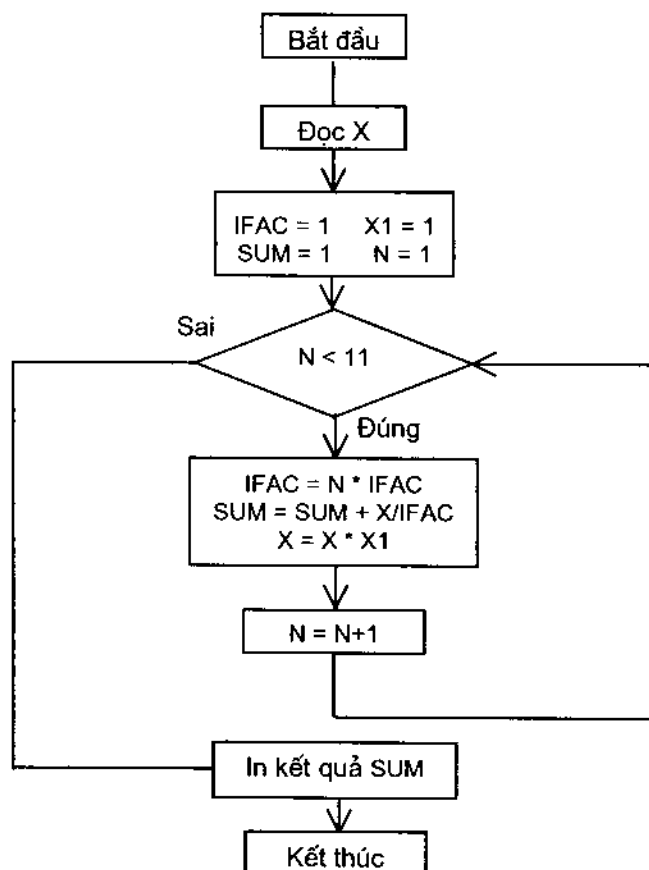
Quá trình tính toán của máy thường dẫn đến làm tròn sau một loạt các phép tính số học. Do đó có dẫn đến sai số và trong một số trường hợp lại không chấp nhận được. Vì thế, có những thủ thuật trong quá trình tính đòi hỏi người sử dụng phải biết mà tích lũy kinh nghiệm.

*** Thành lập thuật toán để giải**

Sau khi đã chọn được phương pháp số cần phải xác lập được rõ ràng tuần tự các phép tính thông thường và phép tính logic cho máy tính thực hiện. Đó là việc lập thuật toán để giải.

Những yêu cầu cơ bản đối với hình thức và nội dung của bản ghi thuật toán là rõ ràng, gọn và sinh động. Sơ đồ khối (còn gọi là lưu đồ) là một dạng biểu diễn thuật toán. Người ta sử dụng các khối đặc trưng cho những phép tính cụ thể, kèm theo là các quan hệ giữa chúng. Ví dụ trên hình 1.3 là sơ đồ khối của thuật toán tính tổng 11 số hạng đầu tiên của chuỗi:

$$1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots + \frac{x^{10}}{10!} + \dots + \frac{x^n}{n!}$$



Hình 1.3. Sơ đồ khối của thuật toán

* Chọn ngôn ngữ lập trình

Có nhiều ngôn ngữ lập trình. Với các bài toán kĩ thuật hiện nay, người ta vẫn dùng các ngôn ngữ thuật toán BASIS, FORTRAN, PL1, PASCAL...

Máy tính nhờ có chương trình dịch của ngôn ngữ mà hiểu được tuần tự các phép tính mà người lập yêu cầu nó thực hiện ở chương trình đã viết.

1.3. SỰ TƯƠNG HỢP CỦA MÔ HÌNH TOÁN HỌC VỚI ĐỐI TƯỢNG THỰC

Cấu trúc mô hình toán học của một quá trình công nghệ bất kì được quyết định trước hết bởi các thông số thủy động học và cấu trúc đó thể hiện trong tính chất của *phân bố* thời gian lưu các *phần tử* của dòng trong hệ thống.

Mọi tính chất của phân bố như thế tuân theo các quy luật thống kê và được quyết định bởi dạng của tín hiệu đi qua hệ thống. Người ta thường sử dụng tín hiệu của chất chỉ thị (tracer) đưa vào hệ thống ở dạng nhiễu bậc, nhiễu xung hay nhiễu hình sin. Đây là thủ thuật cơ bản để xác lập sự tương hợp của mô hình toán học với đối tượng cần nghiên cứu. Có các phương pháp đánh giá bằng toán học các tín hiệu khác nhau.

* Hàm phân bố

Ta kí hiệu xác suất để đại lượng ngẫu nhiên X nhỏ hơn hoặc bằng một giá trị x_1 nào đó là $P(X \leq x_1)$. Khi đó, quan hệ chỉ sự tăng xác suất $P(X \leq x)$ khi tăng x gọi là *hàm phân bố* và được kí hiệu như sau:

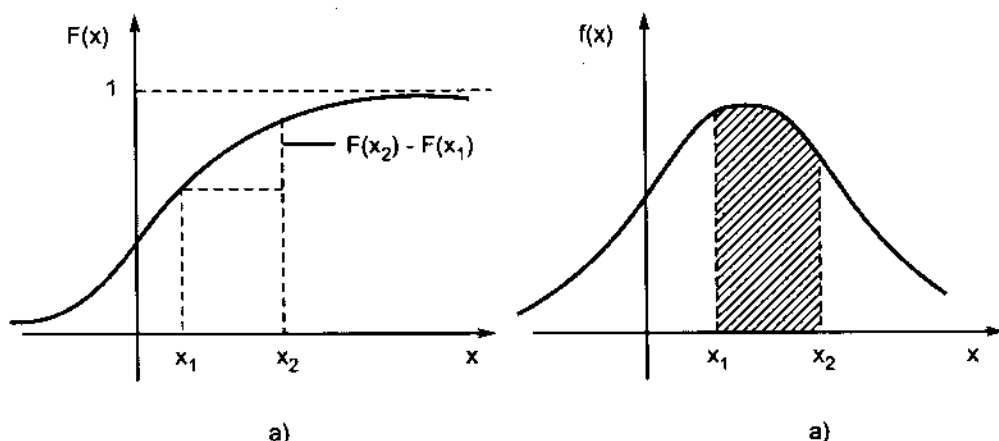
$$F(x) = P(X \leq x) \quad (1.1)$$

Đối với đại lượng ngẫu nhiên liên tục, người ta thường dùng *mật độ phân bố*

$$f(x) = F'(x) \quad (1.2)$$

tức đạo hàm của hàm phân bố nếu $F(x)$ liên tục và khả vi. Mật độ phân bố $f(x)$ cũng hoàn toàn xác định đại lượng ngẫu nhiên.

Đồ thị biểu diễn hàm phân bố và mật độ phân bố của đại lượng ngẫu nhiên trên hình (1.4).



Hình 1.4. Hàm phân bố (a) và mật độ phân bố (b)

* Phương pháp mômen

Các tính chất cơ bản của phân bố của đại lượng ngẫu nhiên có thể mô tả rất đơn giản bằng một vài đặc trưng số. Đó là các trị số quyết định những đặc điểm đáng kể nhất của phân bố. Các mômen của đại lượng ngẫu nhiên chính là hệ thống các đặc trưng đó.

Các mômen được hệ thống hoá theo 3 dấu hiệu: bậc của mômen β , gốc (điểm khởi đầu) của đại lượng ngẫu nhiên và dạng của đại lượng ngẫu nhiên.

Bậc mômen β có thể là một số nguyên bất kì nhưng thực tế chỉ xem xét các mômen bậc không, bậc một, bậc hai, bậc ba và bậc bốn tức là $\beta = 0, 1, 2, 3, 4$.

Theo điểm khởi đầu tính của đại lượng ngẫu nhiên có các mômen gốc và mômen trung tâm, còn theo dạng của đại lượng ngẫu nhiên có đại lượng ngẫu nhiên gián đoạn và đại lượng ngẫu nhiên liên tục. Dưới đây, ta chỉ xem xét đại lượng ngẫu nhiên liên tục.

Mômen bậc β của đại lượng ngẫu nhiên liên tục bằng

$$\alpha_{\beta} = \int_A^B x^{\beta} f(x) dx \quad (1.3)$$

Trong đó, A và B là các giá trị nhỏ nhất và lớn nhất của đại lượng ngẫu nhiên X.

Ta sẽ xem xét các mômen gốc. Mômen gốc bậc không

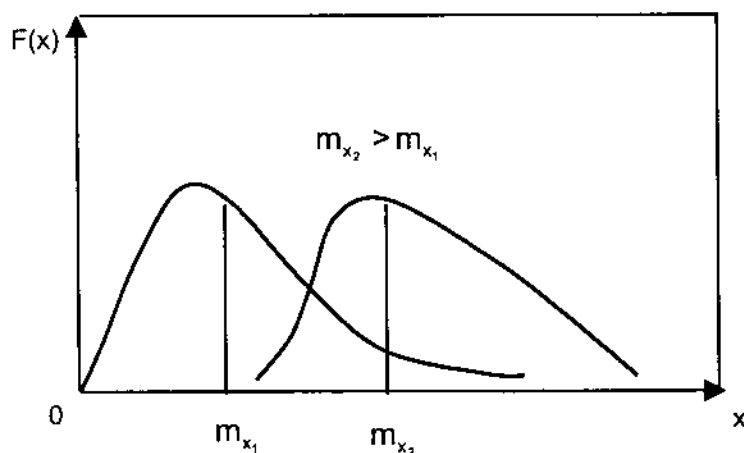
$$\alpha_0 = \int_A^B x^0 f(x) dx = \int_A^B f(x) dx = 1 \quad (1.4)$$

luôn luôn bằng 1 và nó đặc trưng cho diện tích dưới đường cong mật độ phân bố.

Mômen gốc bậc một

$$\alpha_1 = \int_A^B x f(x) dx \quad (1.5)$$

đặc trưng cho giá trị của đại lượng ngẫu nhiên mà quanh giá trị đó, nhóm tụ tất cả những giá trị khả dĩ của đại lượng ngẫu nhiên, tức là xác định vị trí trung tâm nhóm tụ. Người ta gọi mômen gốc bậc một là *giá trị trung bình* hay *kì vọng toán* của đại lượng ngẫu nhiên. Đối với đại lượng ngẫu nhiên X kì vọng toán kí hiệu là m_x . Đại lượng m_x có thứ nguyên như đại lượng X. Đồ thị phân bố có $m_{x_2} > m_{x_1}$ biểu diễn trên hình 1.5.



Hình 1.5. Hàm mật độ phân bố và kì vọng toán

Nhìn vào hình trên ta thấy, kì vọng toán hay giá trị trung bình là đặc trưng số xác định trung tâm nhóm tụ của đại lượng ngẫu nhiên. Trung tâm này thường chấp nhận là điểm đầu để tính, tức là chuyển gốc toạ độ vào điểm m_x .

Những đại lượng ngẫu nhiên tính từ tâm nhóm hay kì vọng toán gọi là đại lượng ngẫu nhiên trung tâm. Mômen của đại lượng này gọi là các *mômen trung tâm*.

Mômen trung tâm bậc không:

$$\mu_0 = \int_A^B (x - m_x)^0 f(x) dx = \int_A^B f(x) dx = 1 \quad (1.6)$$

Mômen trung tâm bậc một:

$$\mu_1 = \int_A^B (x - m_x) f(x) dx \quad (1.7a)$$

Dễ dàng nhận thấy

$$\int_A^B (x - m_x) f(x) dx = \int_A^B x f(x) dx - m_x \int_A^B f(x) dx = m_x - m_x = 0$$

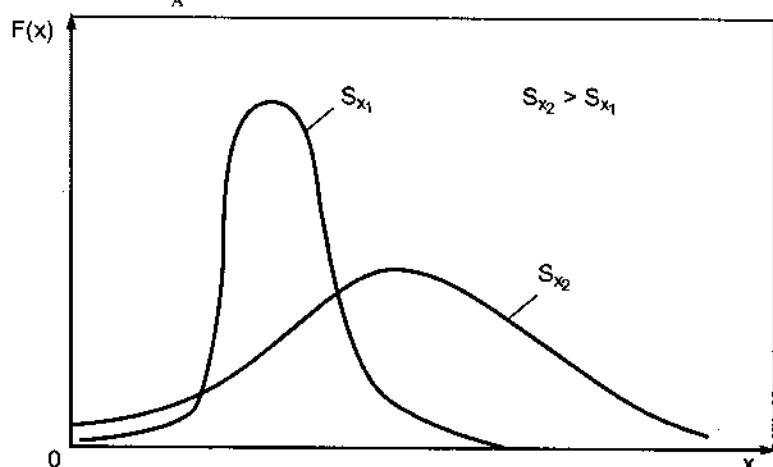
Vậy mômen trung tâm bậc một

$$\mu_1 = 0 \quad (1.7b)$$

tức là kì vọng toán của đại lượng ngẫu nhiên trung tâm bằng không.

Mômen trung tâm bậc hai (hình 1.6)

$$\mu_2 = \int_A^B (x - m_x)^2 f(x) dx \quad (1.8)$$



Hình 1.6. Hàm mật độ phân bố
đối với những mômen trung tâm bậc hai (phương sai) khác nhau

Mômen trung tâm bậc hai đặc trưng cho sự phân tán của đại lượng ngẫu nhiên so với giá trị trung bình và gọi là *phương sai*, kí hiệu như sau:

$$\mu_2 = s_x^2 \quad (1.9)$$

bởi vì có thứ nguyên là bình phương của đại lượng ngẫu nhiên.

Lấy căn bậc hai của phương sai ta được *độ lệch quân phương* của đại lượng ngẫu nhiên X:

$$s_x = \sqrt{s_x^2} \quad (1.10)$$

Trên hình 1.6 biểu diễn $s_{x_2} > s_{x_1}$.

Như vậy, vị trí của đường cong phân bố được đặc trưng bởi giá trị kì vọng toán m_x , còn mức độ phân tán của các thông số được đặc trưng bởi giá trị phương sai s_x^2 .

Để mô tả đầy đủ hơn phân bố của các tham số, người ta sử dụng cả những mômen bậc cao.

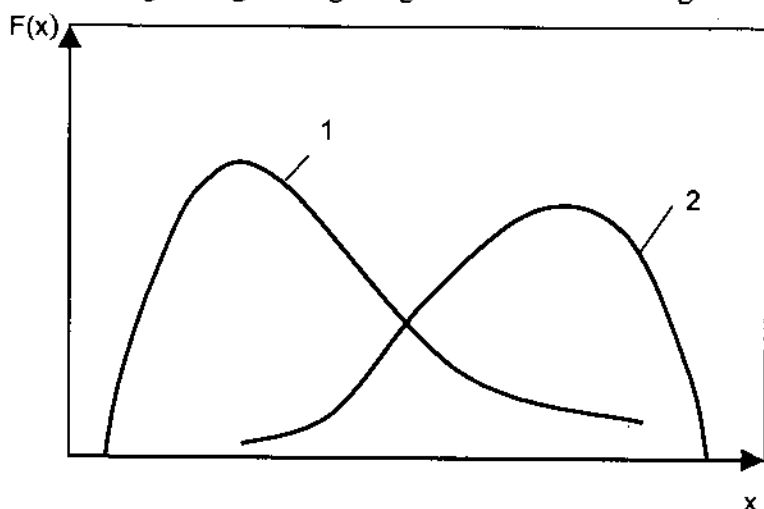
Mômen trung tâm bậc ba:

$$\mu_3 = \int_A^B (x - m_x)^3 f(x) dx \quad (1.11)$$

đặc trưng cho *tính bất đối xứng* của phân bố. Hệ số bất đối xứng vô thứ nguyên được tính như sau:

$$A_x = \frac{\mu_3}{s_x^2} \quad (1.12)$$

Trên hình 1.7 biểu diễn hai phân bố bất đối xứng trong đó đường cong 1 có tính bất đối xứng dương, đường cong 2 – tính bất đối xứng âm.



Hình 1.7. Hàm mật độ phân bố đối với những giá trị khác nhau của mômen trung tâm bậc ba

1. Tính bất đối xứng dương ; 2. Tính bất đối xứng âm.

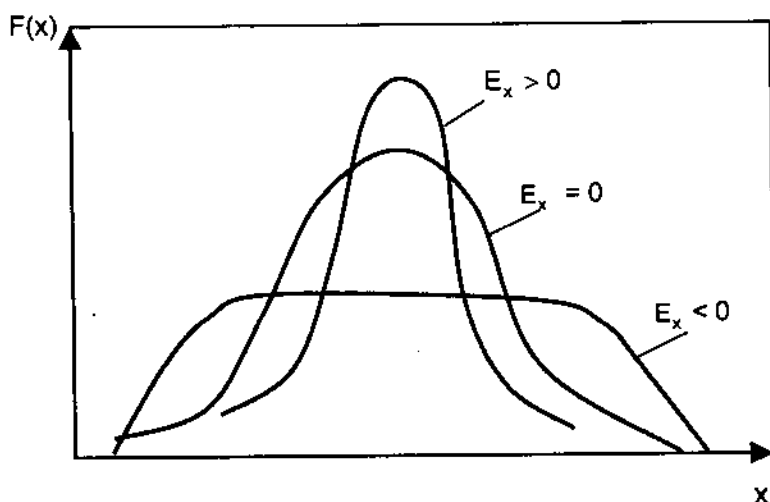
Mômen trung tâm bậc bốn:

$$\mu_4 = \int_A^B (x - m_x)^4 f(x) dx \quad (1.13)$$

đặc trưng cho "tính dốc đứng" – tức là *độ nhọn của phân bố*. Tính chất này được mô tả bằng đại lượng vô thứ nguyên gọi là hệ số *độ nhọn*.

$$E_x = \frac{\mu_4}{s_x^4} - 3 \quad (1.14)$$

Ta thấy phải trừ đi 3 bởi vì đối với phân bố chuẩn thường phổ biến trong tự nhiên thì $\frac{\mu_4}{s_x^4} = 3$. Như vậy, $E_x = 0$ đối với phân bố chuẩn. Các hàm mật độ với E_x khác nhau biểu diễn trên hình 1.8.



Hình 1.8. Hàm mật độ phân bố đối với những giá trị khác nhau của mômen trung tâm bậc bốn

Hệ thức giữa các mômen gốc và mômen trung tâm :

$$\begin{aligned}\mu_2 &= \alpha_2 - \alpha_1^2 \\ \mu_3 &= \alpha_3 - 3\alpha_2\alpha_1 + 2\alpha_1^3 \\ \mu_4 &= \alpha_4 - 4\alpha_1\alpha_3 + 6\alpha_1^2\alpha_2 - 3\alpha_1^4\end{aligned}\quad (1.15)$$

* Xác định các mômen theo số liệu thực nghiệm

Do số liệu thực nghiệm là những giá trị gián đoạn rời rạc nên các mômen được xác định bằng công thức của đại lượng gián đoạn, thay xác

$$\text{suất } p_i = \frac{m_i}{n} : \quad \alpha_s = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^k x_i^s m_i \quad (1.16)$$

Tính các mômen được tiến hành như sau:

1. Để giảm các giá trị số của x ta chuyển về điểm đếm $x_0 \approx \frac{x_{\max} + x_{\min}}{2}$,

hơn nữa làm tròn có thể tiến hành về bất cứ phía nào.

2. Chuyển sang biến mới $x' = (x - x_0)/h$ trong đó h được chọn sao cho x' theo khả năng là những số nguyên.

3. Tính các tổng

$$\sum_{i=1}^k x'_i m_i ; \sum_{i=1}^k x'^2_i m_i ; \sum_{i=1}^k x'^3_i m_i ; \sum_{i=1}^k x'^4_i m_i$$

4. Xác định các mômen gốc của đại lượng x'

$$\alpha'_1 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^k x'_i m_i ; \alpha'_2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^k x_i'^2 m_i$$

$$\alpha'_3 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^k x_i'^3 m_i ; \alpha'_4 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^k x_i'^4 m_i$$

5. Để kiểm tra xem tính toán có đúng không ta tìm

$$\alpha'_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^k (x'_i + 1)^4 m_i$$

phải có $\alpha'_k = \alpha'_0 + 4\alpha'_1 + 6\alpha'_2 + 4\alpha'_3 + \alpha'_4$

Trong đó $\alpha'_0 = 1$.

6. Tìm các mômen trung tâm

$$\mu'_2 = \alpha'_2 - \alpha_1'^2$$

$$\mu'_3 = \alpha'_3 - 3\alpha'_2\alpha'_1 + 2\alpha_1'^3$$

$$\mu'_4 = \alpha'_4 - 4\alpha'_3\alpha'_1 + 6\alpha_1'^2\alpha'_2 - 3\alpha_1'^4$$

7. Chuyển ngược lại từ các đặc trưng số của x' về các đặc trưng số của đại lượng x . Từ $x' = (x - x_0)/h$, ta có $x = x_0 + h x'$ và sau những phép biến đổi không phức tạp lắm ta có:

$$m_x = x_0 + \alpha'_1 ; s_x = h\sqrt{\mu'_2}$$

$$A_x = \frac{\mu'_3}{\sqrt{\mu'_2}} ; E_x = \frac{\mu'_4}{\mu'_2} - 3$$

* Xác định các đường cong đáp ứng

Trong rất nhiều trường hợp, đặc biệt là khi khảo sát cấu trúc dòng trong thiết bị thì ở các thí nghiệm, người ta xác định trực tiếp các đường cong đáp ứng, hàm phân bố của đại lượng ngẫu nhiên $F(\tau)$, mật độ phân bố $f(\tau)$ hoặc là xác định các hàm số biểu diễn chúng trong một tỉ lệ nào đó.

Trên thực tế, ví dụ, có một dòng nào đó với tốc độ theo thể tích V_c đi vào thiết bị. Thời gian lưu của các phần tử của dòng trong thiết bị sẽ là một đại lượng ngẫu nhiên τ và phụ thuộc vào một loạt yếu tố như tốc độ theo thể tích V_c , cấu tạo của thiết bị, cấu tạo và vị trí của các chi tiết trong thiết bị...

Ta "đánh dấu" các phân tử của dòng bằng cách đưa chất chỉ thị có nồng độ ở dòng vào là C_0 . Như vậy, để xác định hàm phân bố của các phân tử dòng theo thời gian lưu ở đầu ra khỏi thiết bị cần phải "cố định" được số phân tử có thời gian lưu nhỏ hơn x và coi nó là số ban đầu.

Giả sử, ở thời điểm $\tau = 0$ nồng độ chất chỉ thị thay đổi từ C_0 đến $C_0 + \Delta C_0$. Ta sẽ tìm cho thời điểm bất kì $\tau > 0$ lượng chất chỉ thị ở đầu ra thiết bị.

Ở thời điểm $\tau > 0$, trong dòng ra sẽ là các phân tử của dòng có thời gian lưu nhỏ hơn τ . Xét tới định nghĩa hàm phân bố theo thời gian lưu thì phần lượng của chúng là $F(\tau)$. Khi đó, tổng lượng chất chỉ thị được mang ra khỏi thiết bị cùng với các phân tử của dòng sẽ là: $V_c F(\tau) (C_0 + \Delta C_0)$.

Ở dòng ra sẽ có cả những phân tử với thời gian lưu lớn hơn τ đi vào thiết bị trước thời điểm $\tau = 0$. Phần lượng của chúng sẽ là $1 - F(\tau)$ và lượng chất chỉ thị do chúng mang theo sẽ là $V_c [1 - F(\tau)] C_0$.

Nếu $C(\tau)$ là nồng độ trung bình của chất chỉ thị ở đầu ra thiết bị thì cân bằng chất sẽ cho ta:

$$V_c C(\tau) = V_c [1 - F(\tau)] C_0 + V_c F(\tau) (C_0 + \Delta C_0)$$

Phương trình cuối cùng này là cơ sở để xác định bằng thực nghiệm $F(\tau)$. Từ phương trình đó ta có $F(\tau) = [C(\tau) - C_0] / \Delta C_0$. Nếu $C(\tau) = C_0 + \Delta C(\tau)$ thì $F(\tau) = \Delta C(\tau) / \Delta C_0$.

Như vậy, $F(\tau)$ được xác định như là sự thay đổi nồng độ chất chỉ thị ở đầu ra thiết bị từ mức C_0 với hệ số tỉ lệ ΔC_0 .

Những phân bố tương tự trong trường hợp đưa vào thiết bị chất chỉ thị dạng xung sẽ dẫn đến hệ thức đặc trưng cho mật độ phân bố theo thời gian lưu $f(\tau)$:

$$f(\tau) = \frac{V_c}{M} \Delta C(\tau)$$

Trong đó, M là lượng chất chỉ thị cho vào dòng ở thời điểm $\tau = 0$.

Việc xác định các mômen theo $f(\tau)$ được tiến hành theo công thức (1.3). Tuy nhiên, tính tới việc các số liệu thực nghiệm nhận được hoặc là ở dạng đồ thị hoặc ở dạng bảng số nên việc tính tích phân theo (1.3) phải thực hiện bằng phương pháp số. Sử dụng phương pháp xấp xỉ tuyến tính từng đoạn mật độ phân bố $f(\tau)$ đối với mômen gốc bậc không ta được:

$$\alpha_0 = \int_A^B f(\tau) d\tau \approx \sum_{i=1}^n \bar{f}(\tau_i) \Delta\tau \quad (1.17)$$

Trong đó, $\bar{f}(\tau_i) = \frac{f(\tau_{i+1}) + f(\tau_i)}{2}$

Tương tự, đối với 4 mômen gốc ta có:

$$\alpha_1 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \bar{f}(\tau_i) (\tau_{i+1} + \tau_i) \Delta\tau \quad (1.18)$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^n \bar{f}(\tau_i) [\tau_{i+1}^2 + \tau_{i+1}\tau_i + \tau_i^2] \Delta\tau \quad (1.19)$$

$$\alpha_3 = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^n \bar{f}(\tau_i) [(\tau_{i+1} + \tau_i)(\tau_{i+1}^2 + \tau_i^2)] \Delta\tau \quad (1.20)$$

$$\alpha_4 = \frac{1}{5} \sum_{i=1}^n \bar{f}(\tau_i) [\tau_{i+1}^4 + \tau_{i+1}^3\tau_i + \tau_{i+1}^2\tau_i^2 + \tau_{i+1}\tau_i^3 + \tau_i^4] \Delta\tau \quad (1.21)$$

Để tính các mômen trung tâm của hàm phân bố, ta sử dụng các công thức (1.15)

Để thiết lập quy luật của hiện tượng nghiên cứu, cần so sánh phân bố thực nghiệm được với quy luật phân bố lí thuyết (quy luật chuẩn, quy luật Pauxon, quy luật nhị thức, quy luật hàm mũ, quy luật Pirson, quy luật Student...)

Việc chọn quy luật phân bố lí thuyết được tiến hành từ tính chất của những phân bố lí thuyết; trong từng trường hợp cụ thể mà ưu tiên cho quy luật này hay quy luật kia. Những mômen tìm được theo số liệu thí nghiệm thay vào quy luật phân bố lí thuyết lựa chọn và đánh giá sự trùng lặp của phân bố thực nghiệm và phân bố lí thuyết.

Trong mô hình hoá các quá trình công nghệ hoá học, sinh học, quy luật phân bố lí thuyết có thể được đưa ra bằng những phương trình mô hình toán học mô tả cấu trúc dòng trong thiết bị của quá trình này hay quá trình khác.

Như vậy, độ tin cậy của mô hình toán học của quá trình được kiểm tra cả bằng việc so sánh phân bố lí thuyết (hay các mômen của hàm phân bố) với phân bố thực nghiệm nhận được.

Khi gây nhiễu dạng xung ở đầu vào thiết bị ta sẽ nhận được đường cong đáp ứng gọi là đường cong C và nó thường được viết ở dạng:

$$C = \bar{\tau} C(\tau) \quad (1.22)$$

Tính $C(\tau) \Delta\tau$ đặc trưng cho phân lượng chất chỉ thị trong dòng ra đã nằm ở thiết bị trong khoảng thời gian từ τ đến $\tau + d\tau$.

Thời gian lưu trung bình $\bar{\tau}$ được xác định theo công thức

$$\bar{\tau} = \frac{\int_0^{\infty} \tau C(\tau) d\tau}{\int_0^{\infty} C(\tau) d\tau} = \frac{\sum_{i=1}^n \tau_i C_i}{\sum_{i=1}^n C_i} \quad (1.23)$$

Hàm phân bố $C(\tau)$ có dạng:

$$C(\tau) = \frac{1}{\bar{\tau}} \cdot \frac{C}{C_0} = \frac{C}{\sum_{i=1}^n C_i \Delta \tau} \quad (1.24)$$

Trong đó, $\Delta \tau$ là khoảng lấy mẫu; $C(\tau)$ có thứ nguyên s^{-1} .

Thời gian lưu vô thứ nguyên

$$\theta = \tau / \bar{\tau} \quad (1.25)$$

Khi biết thời gian lưu trung bình, đường cong C có thể xác định bằng phương trình :

$$C = \frac{C}{C_0} = \bar{\tau} C(\tau) \quad (1.26)$$

Trong đó, C_0 là nồng độ ban đầu ở đầu vào.

Phương sai hay sự phân tán các giá trị của đại lượng xem xét quanh giá trị trung bình đối với các điểm cách đều nhau được xác định theo công thức.

$$s_{\tau}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2 f(x_i)}{\sum_{i=1}^n f(x_i)} - \left[\frac{\sum_{i=1}^n x_i f(x_i)}{\sum_{i=1}^n f(x_i)} \right]^2 \quad (1.27)$$

Đối với phương sai ở các đơn vị thời gian (s_{τ}^2 , c^2) ta sẽ có:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n f(x_i) &= \sum_{i=1}^n C_i ; \quad \sum_{i=1}^n x_i f(x_i) = \sum_{i=1}^n \tau_i C_i \\ \sum_{i=1}^n x_i^2 f(x_i) &= \sum_{i=1}^n \tau_i^2 C_i \end{aligned} \quad (1.28)$$

Đối với phương sai ở đơn vị thời gian vô thứ nguyên thì

$$s^2 = s_{\tau}^2 / (\bar{\tau})^2 \quad (1.29)$$

Đối với phân bố C trong thời gian vô thứ nguyên θ ta có :

$$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^n \theta^2 C_i}{\sum_{i=1}^n C_i} - 1 = \sum_{i=1}^n (\theta_i^2 C_i \Delta\theta) - 1 \quad (1.30)$$

Sự liên hệ giữa các hàm phân bố trong các trường hợp nhiều bậc và nhiều xung:

$$F = \int_0^{\theta} C d\theta \quad C = \frac{dF}{d\theta} \quad (1.31)$$

Do đại lượng C (τ) dt đặc trưng cho phần lượng chất trong dòng ra có tuổi τ và $\tau + d\tau$ nên sau khi nhân với nồng độ chất C_A còn lại ở trong phần tử của dòng có tuổi $\tau + d\tau$, ta sẽ có thể xác định nồng độ trung bình $\overline{C_A}$ của chất rời khỏi thiết bị:

$$\overline{C_A} = \int_{\tau=0}^{\tau=\infty} C_A C(\tau) d\tau \quad (1.32)$$

Thường thì trong tính toán các mômen theo đường cong thực nghiệm, người ta sử dụng phép xấp xỉ bậc tức là tính theo các công thức:

$$\alpha_0 = \sum_{i=1}^n C_i \Delta\tau ; \alpha_1 = \frac{\sum_{i=1}^n C_i \tau_i}{\sum_{i=1}^n C_i}$$

.....

.....

$$\alpha_k = \frac{\sum_{i=1}^n C_i \tau_i^k}{\sum_{i=1}^n C_i} \quad (1.33)$$

Như vậy, mô hình hoá toán học được thực hiện trong 3 giai đoạn và đòi hỏi người thực hiện phải có những kiến thức công nghệ cơ bản, hiểu biết sâu sắc quá trình, đồng thời cũng phải có những kiến thức cơ bản về Toán học, Tin học. Hiện nay, với những phương tiện kỹ thuật hiện đại, phương pháp mô hình hoá toán học đã phát huy được hiệu quả trong việc nghiên cứu triển khai, điều khiển các quá trình công nghệ. Trong lĩnh vực công nghệ môi trường ở các nước tiến tiến, quá trình xử lý nước thải cũng được tự động hoá hoàn toàn trên cơ sở sử dụng các mô hình toán học.

Chương II

NHỮNG MÔ HÌNH CƠ SỞ CỦA QUÁ TRÌNH XỬ LÝ NƯỚC THẢI

2.1. NGUYÊN TẮC XÂY DỰNG MÔ HÌNH TOÁN HỌC CỦA QUÁ TRÌNH XỬ LÝ NƯỚC THẢI

Quá trình xử lý nước thải có thể xem như một hệ thống phức tạp. Áp dụng phương pháp phân tích hệ thống ta có thể xem xét hệ thống phức tạp đó cấu thành từ những khối (hay hệ thống con) riêng biệt, cho phép mô tả chúng riêng rẽ sau đó kết hợp chúng lại với nhau.

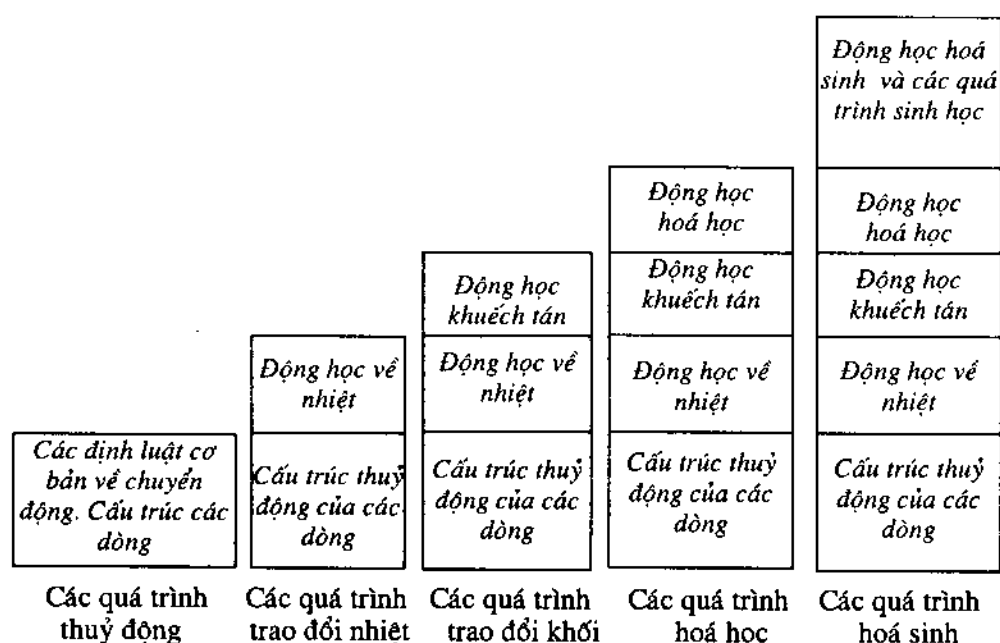
Quá trình xử lý nước thải cũng giống như các quá trình công nghệ hoá học về bản chất là những quá trình xác định – ngẫu nhiên, tức là tồn tại những mối liên hệ nhất định giữa các thông số hoá lý được quyết định bởi các định luật cơ bản của chuyển khối, năng lượng và cả những điều kiện không ổn định và ngẫu nhiên (phân bố của các phần tử dòng vật chất và năng lượng theo thời gian).

Trên hình 2.1 là cấu trúc các khối hình thành nên những quá trình tiêu biểu. Mỗi khối có mô tả toán học của mình và nói chung quá trình tiêu biểu đó được mô tả bằng một hệ phương trình nhất định.

Cả 2 thành phần xác định và ngẫu nhiên (xác suất) của quá trình xử lý nước thải bằng phương pháp sinh học kết hợp với nhau thành mô hình toán học của quá trình.

Việc xây dựng bất kì mô hình toán học nào đều bắt đầu từ việc thiết lập mô tả hình thức của các quá trình xảy ra trong đối tượng mô hình hoá. Khi xây dựng mô tả hình thức, như đã nói ở trên, ta sử dụng nguyên lí khối, theo đó thì mô tả toán học của đối tượng về tổng thể là tập hợp mô tả toán học của những quá trình cơ sở xảy ra trong đối tượng mô hình hoá.

Đầu tiên, người ta khảo sát mô hình thuỷ động của quá trình như là cơ sở của cấu trúc mô tả toán học. Tiếp đó nghiên cứu động học truyền nhiệt, động học chuyển khối và động học các phản ứng hoá học có tính tới các điều kiện thuỷ động của mô hình thuỷ động đã khảo sát trước đó để thiết lập mô tả toán học cho từng quá trình tiêu biểu. Cuối cùng là việc kết hợp các mô hình lại với nhau để có một hệ phương trình (mô tả toán học) của đối tượng mô hình hoá. Ưu điểm của việc áp dụng nguyên lí khối để xây dựng mô hình toán học là khả năng phân chia một quá trình phức tạp thành những quá trình riêng biệt đơn giản hơn cho phép tìm được mô tả toán học của nó.



Hình 2.1. Sơ đồ khối nguyên tắc của các quá trình tiêu biểu

Trong thành phần của mô tả toán học được thiết lập trên cơ sở bản chất vật lí và hoá học của đối tượng mô hình hoá, có thể chia ra 4 nhóm phương trình như đã nói ở mục 1.1.

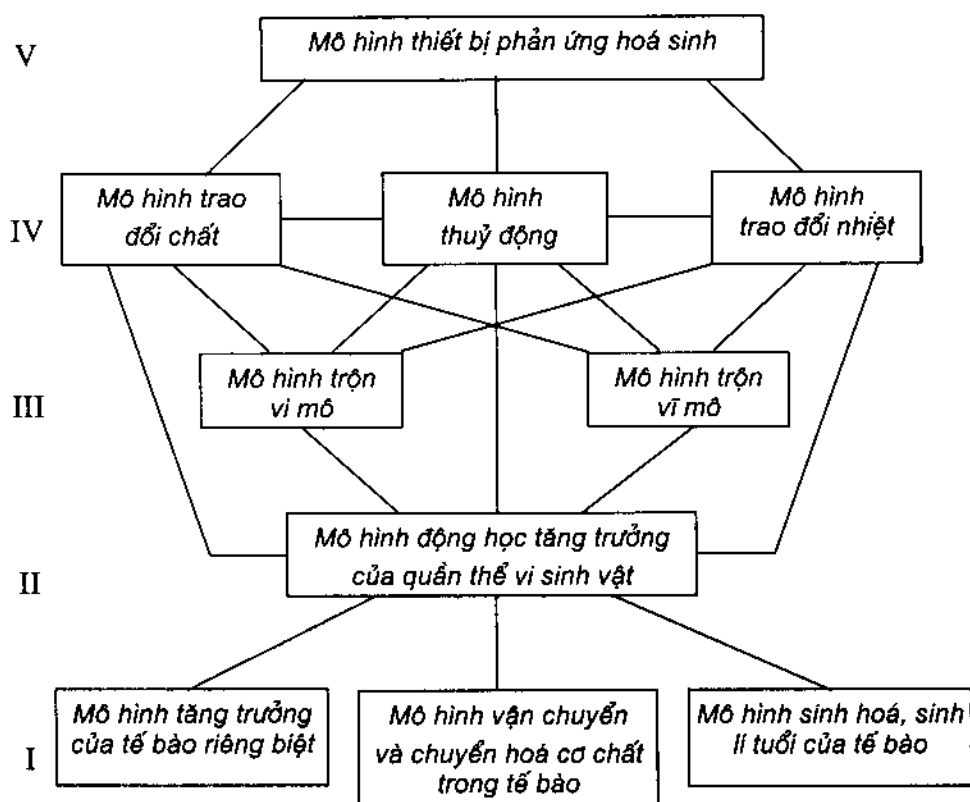
Sau khi đã xây dựng được mô hình toán học đầy đủ của quá trình, người ta thường kiểm định tính tương hợp các mô hình vừa nhận được trên thiết bị thí nghiệm hay trên thiết bị công nghiệp, song song tiến hành hiệu chỉnh mô hình nếu thấy cần thiết.

Nếu coi thiết bị xử lí nước thải bằng phương pháp sinh học (aeroten, biophin) như là một thiết bị phản ứng sinh hoá thì hoàn toàn tương tự có thể đưa ra sơ đồ cấu trúc mô hình toán học với sự phân cấp như hình 2.2.

Ta thấy rằng có sự phân chia thành 5 mức từ I đến V.

Cơ sở mô tả mức I là những hệ thức tính tới các hiện tượng hoá sinh xảy ra trong tế bào. Nhiệm vụ khảo sát của mức này là giải mã cơ chế của các quá trình phức tạp trong tế bào và biểu diễn chúng ở dạng tổng quát mô tả sự phát triển của tế bào riêng biệt. Tuy nhiên, những nghiên cứu đã tiến hành cho đến nay chỉ ra rằng, các quá trình xảy ra trong tế bào phức tạp đến mức sử dụng chúng cho các mục đích thực tiễn là cực kì khó khăn. Bởi vậy, trong việc mô hình hoá thiết bị phản ứng hoá sinh hay quá trình xử lí nước thải

bằng phương pháp sinh học, người ta chỉ sử dụng mô hình động học tăng trưởng của quần thể vi sinh vật (mức II). Mô hình này được hình thành trên cơ sở các mô hình của mức I (mô hình tăng trưởng các tế bào đơn lẻ, mô hình vận tải và chuyển hoá cơ chất trong tế bào, mô hình sinh hoá sinh lí hay mô hình tuổi của tế bào). Việc nghiên cứu các quy luật động học của quần thể vi sinh vật được thực hiện ở điều kiện khuấy trộn lí tưởng của môi trường trong thiết bị và sự tăng trưởng của vi sinh vật không bị hạn chế bởi tốc độ vận chuyển chất dinh dưỡng và các điều kiện trao đổi nhiệt. Những mức phân cấp tiếp theo của các quá trình trong thiết bị phản ứng hoá sinh liên quan đến việc xây dựng các thành phần của mô hình toán học trên mức vĩ mô. Tính tương hợp của các thành phần (mô hình con này) và giá trị của các hằng số cần thiết được đánh giá trên thiết bị thí nghiệm hay thiết bị sản xuất. Ở đây, người ta nghiên cứu ảnh hưởng của điều kiện tổ chức dòng cấp nguyên liệu, điều kiện sục khí, ảnh hưởng của các hiệu ứng nhiệt và khuếch tán (khối) đến quá trình sinh hoá.



Hình 2.2. Sơ đồ cấu trúc mô hình toán học của thiết bị phản ứng hoá sinh

Như vậy, giai đoạn tiếp theo của việc xây dựng mô hình toán học liên quan đến việc hình thức hoá mức phân cấp III trong mối quan hệ qua lại với mô hình động học. Trên giai đoạn này xác lập các hệ thức quyết định điều kiện khuấy trộn môi trường trong thiết bị, mức độ tách riêng (*segregation*) trong hệ thống. Cần lượng hoá được tỉ số giữa trạng thái trộn vi mô và trộn vĩ mô. Quan hệ giữa các trạng thái đó được biểu diễn trên hình 2.2 ở mức III bằng mô hình trộn vi mô và mô hình trộn vĩ mô.

Mô hình trộn vi mô và mô hình trộn vĩ mô lại tạo nên mô hình thuỷ động của mức IV. Mô hình thuỷ động khái quát được các hiệu ứng trộn vi mô và tách riêng. Do các hiệu ứng trộn vi mô và vĩ mô ảnh hưởng đến vận chuyển chất và năng lượng nên mô hình thuỷ động quyết định dạng cụ thể các mô hình toán học trao đổi chất và nhiệt. Mô hình toán học của từng khối này (chất và nhiệt) có thể rất phức tạp. Bởi vì, mô hình trao đổi chất bao gồm mô tả quá trình vận chuyển cơ chất từ pha khí hay pha lỏng ít tan vào môi trường nuôi cấy, vận chuyển chất dinh dưỡng đến vỏ tế bào hay đến quần thể tế bào, khuếch tán trong quần thể tế bào.

Tất nhiên, việc xây dựng mô hình của 3 khối mức IV này liên quan một mặt đến các thế (potential) theo nồng độ, nhiệt độ và tốc độ Δ_c , Δ_t , Δ_v , đến các điều kiện phân tán hay tụ hợp của pha phân tán. Chúng chính là động lực của quá trình.

Tính chất chuyển động của môi trường, các điều kiện trao đổi nhiệt và trao đổi chất với môi trường được quyết định bởi các thông số cấu tạo của thiết bị. Đồng thời, các thông số cấu tạo của thiết bị lại ảnh hưởng đến động lực quá trình và trạng thái khuấy trộn trong thiết bị.

Mô hình thiết bị phản ứng hoá sinh (quá trình xử lý nước thải) ở mức V được hình thành trên cơ sở 3 khối ở mức IV: Các mô hình thuỷ động, mô hình trao đổi chất, mô hình trao đổi nhiệt có tính tới mô hình động học tăng trưởng của quần thể vi sinh vật ở mức II.

Như vậy, để xây dựng mô hình toán học của quá trình cần phải tiến hành các nghiên cứu động học vi mô (nghiên cứu các đặc trưng vi sinh, sinh hoá và hoá lí của quá trình trên mức vi mô), các nghiên cứu động học vĩ mô (nhiệm vụ chính là tìm được mô hình toán học của quá trình trong điều kiện gắn quy mô công nghệ, xác định những điều kiện tối ưu tiến hành quá trình), tổng hợp nên một hệ thống công nghệ vi sinh (chọn cấu trúc quan hệ công nghệ giữa các phần tử của hệ – tức các thiết bị với nhau, vận hành hệ thống trong điều kiện cần thêm thông tin sau giai đoạn thiết kế).

Bài toán tổng hợp trên chỉ có thể giải quyết tốt được trong trường hợp vận dụng các nguyên lý phân tích hệ thống, nắm vững phương pháp lập mô hình, tìm được các thuật toán hiệu quả giải mô hình toán học.

2.2. MÔ HÌNH ĐỘNG HỌC SINH TRƯỞNG CỦA VI SINH VẬT

2.2.1. Sự sinh trưởng của vi sinh vật

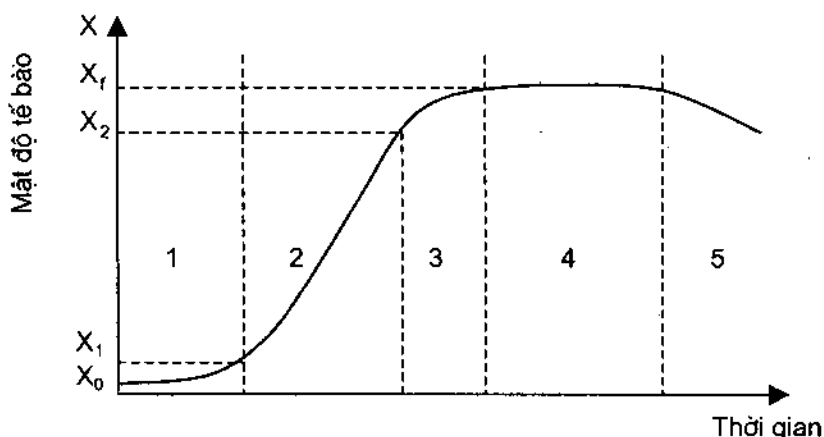
Sự sinh trưởng của vi sinh vật bao gồm sự tăng kích thước, số lượng tế bào (sinh sản), phát triển tăng khối lượng của quần thể vi sinh vật (tăng sinh khối). Tất cả những biến đổi về hình thái, sinh lý diễn ra trong tế bào được tổng hợp thành khái niệm "phát triển". Sinh sản cũng là một kết quả của sự phát triển.

Trong quá trình xử lý nước thải, sự sinh trưởng cũng là sự tăng số lượng tế bào và sự thay đổi kích thước tế bào. Kích thước tế bào dao động xung quanh một giá trị trung bình thì việc tính số lượng tế bào cũng phản ánh được sự tăng sinh khối của vi sinh vật.

Các vi sinh vật trong nước thải chủ yếu là vi khuẩn dị dưỡng, chúng cần có trong môi trường các chất hữu cơ có thể đồng hoá làm cơ chất dinh dưỡng (chất nền) – ở nước thải được biểu thị là BOD. Ngoài ra, các chất dinh dưỡng nguồn nitơ là NH_4^+ và nguồn P là PO_4^{3-} , các nguyên tố khoáng khác như K, Mg, Ca và các nguyên tố vi lượng (sắt, đồng, mangan...). Các chất khoáng và vi lượng này thường có đủ trong nước thải sinh hoạt. Các nguồn C, N, P dinh dưỡng cần cho sinh trưởng của vi khuẩn thường theo tỉ lệ BOD: N : P = 100 : 5 : 1. Khi xử lý nước thải công nghiệp (trừ công nghiệp thực phẩm), nhiều trường hợp phải bổ sung các nguồn N và P hoặc phải khử trước các kim loại nặng gây độc hại cho đời sống của vi sinh vật.

Vi sinh vật sinh sản chủ yếu bằng cách phân đôi tế bào. Thời gian phân cắt này thường gọi là thời gian sinh sản hoặc thời gian thế hệ. Thời gian này của vi khuẩn thường là 20 phút có khi đến vài ngày. Chúng không thể sinh sản vô tận được vì quá trình sinh sản phụ thuộc vào môi trường. Khi trong môi trường các chất dinh dưỡng cạn kiệt, pH và nhiệt độ thay đổi ra ngoài các giá trị nào đó thì sinh sản sẽ bị ngừng lại.

Trong môi trường, đặc biệt là trong môi trường lỏng, như nước thải chẳng hạn, xét quá trình sinh trưởng không phải riêng một tế bào vi sinh vật riêng biệt mà xét cả một nhóm tế bào hoặc một quần thể vi sinh vật. Sự sinh trưởng của một quần thể vi sinh vật trong môi trường theo quy luật được trình bày ở hình 2.3.



Hình 2.3. Quá trình sinh trưởng của quần thể vi khuẩn

Quá trình sinh trưởng của quần thể vi sinh vật chia thành 5 giai đoạn:

1. Giai đoạn thích nghi hay pha tiềm phát.
2. Giai đoạn sinh sản theo cách phân đôi tế bào (theo cấp số nhân) hay pha phát triển theo logarit (pha số mũ).
3. Giai đoạn chậm dần (pha sinh trưởng chậm dần).
4. Giai đoạn ổn định (pha ổn định).
5. Giai đoạn suy vong (pha hô hấp nội bào).

+ *Giai đoạn thích nghi*. Vi khuẩn vào môi trường chưa sinh sản ngay mà còn cần một thời gian làm quen với môi trường, cần cảm ứng sinh tổng hợp các enzym thích hợp với cơ chất.

$$X = C_{t_0} = X_0$$

Trong đó : X – mật độ tế bào ; X_0 – mật độ tế bào ở thời gian $t = 0$

$$\text{Tốc độ sinh trưởng} = 0 \rightarrow \frac{dX}{dt} = 0$$

+ *Giai đoạn phát triển theo số mũ*. Các tế bào vi khuẩn sinh sản theo cách phân đôi tế bào đạt đến mức độ cao nhất theo tỉ lệ tái tạo tế bào với nồng độ cơ chất không hạn chế. Tốc độ sinh trưởng tính theo % là không đổi, giai đoạn này được đánh giá bởi thời gian sinh trưởng t_g (thời gian để tăng gấp đôi số lượng vi khuẩn tối thiểu). Ở giai đoạn này tốc độ sinh trưởng $\frac{dX}{dt}$ tăng tỉ lệ thuận với X (từ đó có được đường cong hàm số mũ).

$$\text{Ta có phương trình sau: } \frac{dX}{dt} \frac{1}{X} = \mu_m$$

Với μ_m là tốc độ sinh trưởng cực đại hoặc $\log \frac{X_2}{X_1} = \mu_m (t_2 - t_1)$

Thời gian sinh trưởng t_g được xác định với $X_2 = 2X_1 \rightarrow$

$$t_g = \frac{\log 2}{\mu_m} = \frac{0,693}{\mu_m}$$

+ *Giai đoạn chậm dần.* Trong giai đoạn này cơ chất dinh dưỡng trong môi trường đã cạn gần hết cùng với sự biến mất một hay vài thành phần cần thiết cho sự sinh trưởng của vi khuẩn. Trong một số trường hợp, phát triển chậm dần là do trong môi trường tích tụ các sản phẩm ức chế được sinh ra trong quá trình chuyển hoá chất trong tế bào vi khuẩn. X tiếp tục tăng, nhưng $\frac{dX}{dt}$ lại giảm.

+ *Giai đoạn ổn định.* X (mật độ tế bào) đạt tới trị số cực đại X_{max} . Sự sinh trưởng dừng lại ngay cả khi các tế bào vẫn còn hoạt động chuyển hoá nào đó.

+ *Giai đoạn suy vong.* Ở giai đoạn này, các chất dinh dưỡng đã hết. Mật độ tế bào giảm do các tế bào già bị chết và tỉ lệ chết cứ tăng dần lên. Tế bào vi khuẩn bị phân huỷ nội sinh hoặc hô hấp nội bào và bị tự phân (autoliz).

Các giai đoạn và các phương trình biểu diễn sự phát triển từng giai đoạn áp dụng cho cả môi trường hiếu khí và kỵ khí. Giá trị của các thông số phụ thuộc vào các loài vi sinh vật, hàm lượng cơ chất và nhiệt độ, pH của môi trường vi sinh vật sống.

2.2.2. Mô hình động học Monod

Để đảm bảo cho quá trình xử lý sinh học diễn ra có hiệu quả phải tạo được các điều kiện môi trường như pH, nhiệt độ, chất dinh dưỡng, thời gian tốt nhất cho hệ vi sinh vật. Khi các điều kiện trên được đảm bảo thì quá trình xử lý diễn ra như sau:

Tốc độ tăng trưởng tế bào ở cả 2 trường hợp nuôi cấy theo từng mẻ hay nuôi cấy trong các bể có dòng chảy liên tục có thể biểu diễn bằng công thức:

$$r_t = \mu X \quad (2.1)$$

Trong đó:

r_t – Tốc độ tăng trưởng của vi sinh vật ($g/m^3.s$);

μ – Tốc độ tăng trưởng riêng ($1/s$);

X – Nồng độ vi sinh vật trong bể hay nồng độ bùn hoạt tính ($g/m^3 = mg/l$).

Công thức (2.1) có thể viết dưới dạng:

$$r_t = \frac{dX}{dt} = \mu X \quad (2.2)$$

Chất nền – giới hạn của tăng trưởng

Trong trường hợp nuôi cấy theo mẻ, nếu chất nền và chất dinh dưỡng cần thiết cho sự tăng trưởng chỉ có với số lượng hạn chế thì các chất này sẽ được dùng đến cạn kiệt trước khi quá trình sinh trưởng ngừng lại.

Ở trường hợp nuôi cấy trong bể có dòng chảy liên tục (chất nền và chất dinh dưỡng cấp liên tục) thì ảnh hưởng của việc giảm bớt chất nền và chất dinh dưỡng có thể biểu diễn bằng phương trình do Monod đề xuất:

$$\mu = \mu_m \frac{S}{K_s + S} \quad (2.3)$$

Trong đó:

μ – Tốc độ tăng trưởng riêng (1/s);

μ_m – Tốc độ tăng trưởng riêng cực đại (1/s);

S – Nồng độ chất nền trong nước thải ở thời điểm sự tăng trưởng bị hạn chế;

K_s – Hằng số bão hoà, thể hiện ảnh hưởng của nồng độ chất nền ở thời điểm tốc độ tăng trưởng bằng một nửa tốc độ cực đại ($\text{g/m}^3 = \text{mg/l}$).

Ảnh hưởng của nồng độ chất nền đến tốc độ tăng trưởng riêng thể hiện trên hình 2.4.

Thay giá trị μ ở phương trình (2.3) vào phương trình (2.1) ta có:

$$r_t = \frac{\mu_m XS}{K_s + S} \quad (2.4)$$

Trong đó: μ_m – Tốc độ tăng trưởng cực đại của vi sinh vật.

Sự tăng trưởng tế bào và sử dụng chất nền

Nếu tất cả dinh dưỡng được chuyển hoá thành sinh khối thì tốc độ sử dụng dinh dưỡng sẽ bằng tốc độ sinh sản sinh khối. Nhưng vì trong cả hai trường hợp nuôi cấy theo mẻ và nuôi cấy trong bể có dòng chảy liên tục, một phần chất nền chuyển thành các tế bào mới, một phần được ôxi hoá thành chất vô cơ và hữu cơ ổn định cho nên tốc độ sử dụng dinh dưỡng sẽ lớn hơn tốc độ tăng trưởng sinh khối. Và do đó có thể thiết lập quan hệ giữa tốc độ tăng trưởng và lượng chất nền được sử dụng theo phương trình sau:

$$r_t = -Yr_d \quad (2.5)$$

Trong đó:

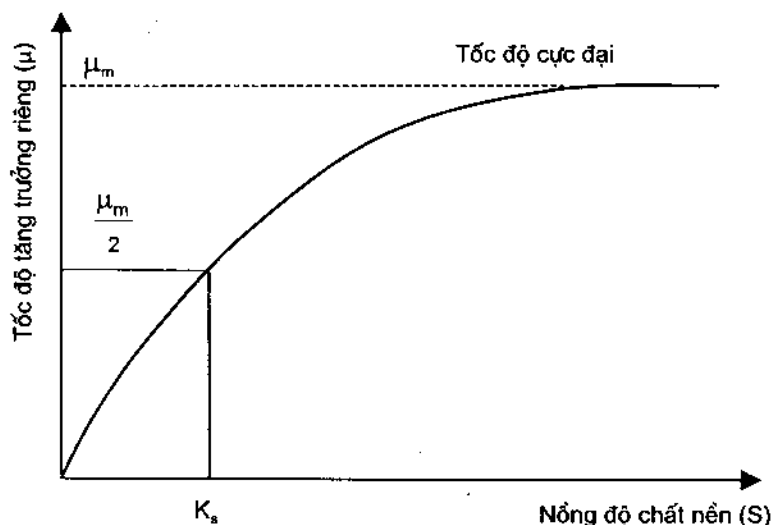
r_1 – Tốc độ tăng trưởng của tế bào vi sinh vật ($\text{g/m}^3.\text{s}$);

Y – Hệ số năng suất sử dụng chất nền cực đại (mg/mg , đây là tỉ số giữa khối lượng tế bào và khối lượng chất nền được tiêu thụ trong một thời gian nhất định ở giai đoạn tăng trưởng logarit);

r_d – Tốc độ sử dụng chất nền ($\text{g/m}^3.\text{s}$).

Từ phương trình (2.5) và (2.4) ta rút ra:

$$r_d = \frac{\mu_m X S}{-Y(K_s + S)} = \frac{K X S}{K_s + S}; K = \frac{\mu_m}{Y} \quad (2.6)$$

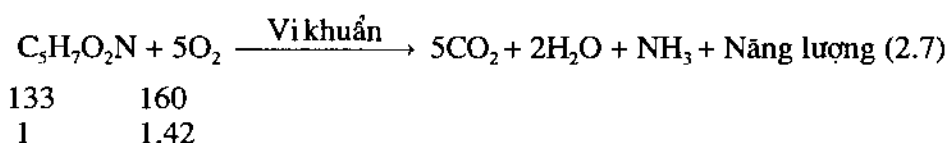


Hình 2.4. Ảnh hưởng của sự hạn chế nồng độ chất nền đến tốc độ tăng trưởng riêng

2.2.3. Mô hình động học Herbert

Trong các công trình xử lý nước thải, không phải tất cả các tế bào vi sinh vật đều có tuổi lớn như nhau và đều ở trong giai đoạn sinh trưởng logarit mà có một số đang ở giai đoạn chết và giai đoạn sinh trưởng chậm. Khi tính toán tốc độ tăng trưởng của tế bào phải tính toán tổ hợp các hiện tượng này. Để tính toán, giả thiết rằng: sự giảm khối lượng các tế bào do chết và tăng trưởng chậm tỉ lệ với nồng độ vi sinh vật có trong nước thải và gọi là sự giảm

khối lượng do phân huỷ nội bào. Quá trình hô hấp nội bào có thể biểu diễn bằng phản ứng đơn giản sau:



Từ phương trình (2.7) có thể thấy: Nếu tất cả các tế bào bị ôxi hoá hoàn toàn thì lượng COD của các tế bào bằng 1,42 nồng độ của tế bào.

$$r_d \text{ (do phân huỷ nội bào)} = -K_d X \quad (2.8)$$

Trong đó:

K_d – Hệ số phân huỷ nội bào (phân rã nội sinh);

X – Nồng độ tế bào (nồng độ bùn hoạt tính) (g/m^3).

Kết hợp với quá trình phân huỷ nội bào, tốc độ tăng trưởng thực tế của tế bào:

$$r_t' = \frac{\mu_m X S}{(K_s + S)} - K_d X \quad (2.9)$$

$$\text{Hay: } r_t' = -Y r_d - K_d X \quad (2.9)$$

Trong đó: r_t' – Tốc độ tăng trưởng thực tế của tế bào vi khuẩn (l/s).

Tốc độ tăng trưởng riêng thực tế là:

$$\mu' = \mu_m \frac{S}{K_s + S} - K_d \quad (2.10)$$

Hệ số năng suất sử dụng chất nền (hệ số đồng hoá) thực tế là:

$$Y_t = \frac{r_t'}{r_d} = \frac{Y}{1 + K_d \theta_c} \quad (2.11)$$

Như vậy, trong trường hợp tính tới cả ảnh hưởng của hệ thống nội bào, động học của quá trình được mô tả bằng mô hình Herbert (2.10). Có thể nói rằng, trong thực tế việc tính toán theo mô hình này cho kết quả phù hợp hơn, bởi nó có tính tới cả pha suy giảm của đường cong tăng trưởng.

Ví dụ 2.1. Xác định các tham số của mô hình động học từ số liệu thí nghiệm.

Cần tìm các giá trị của K , K_s , μ_m , Y và K_d sử dụng những số liệu thí nghiệm dưới đây (trên cơ sở thiết bị quy mô phòng thí nghiệm xử lý nước thải).

STT	S_0 , mg/l BOD ₅	S, mg/l BOD ₅	$\theta = \theta_c$ ngày	X, mg/l
1	300	7	3,2	128
2	300	13	2,0	125
3	300	18	1,6	133
4	300	30	1,1	125
5	300	41	1,1	121

Ghi chú: Trong bảng trên $K = \mu_m/Y$, θ – thời gian lưu thủy lực

Giải:

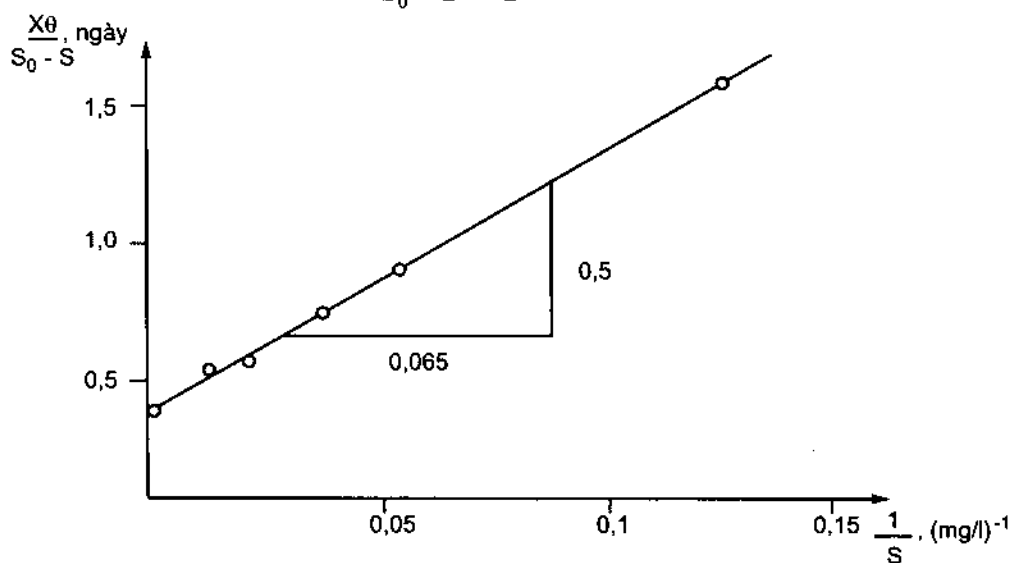
1. Xác định các tham số K_s và K

+ Ta sử dụng phương trình:

$$\frac{X \cdot \theta}{S_0 - S} = \frac{K_s}{K} - \frac{1}{S} + \frac{1}{K} \text{ và tính bảng mới :}$$

STT	$S_0 - S$, mg/l	$X \cdot \theta$, mg/ ngày	$\frac{X \cdot \theta}{S_0 - S}$, ngày	$\frac{1}{S}$, mg/l
1	293	409,6	1,398	0,143
2	287	250,0	0,865	0,077
3	282	212,8	0,755	0,056
4	270	141,9	0,526	0,033
5	259	133,1	0,514	0,024

+ Vẽ đồ thị quan hệ $\frac{X \cdot \theta}{S_0 - S}$ và $\frac{1}{S}$;



+ Từ điểm cắt trục tung:

$$\frac{1}{K} = 0,32 \text{ ngày hay } K = 3,125 \text{ ngày}^{-1}$$

+ Ta có tg của góc nghiêng:

$$\frac{K_s}{K} = \frac{0,5 \text{ ngày}}{0,065 (\text{mg/l})^{-1}} = 7,692 \text{ mg/l. ngày}$$

$$K_s = 7,692. \text{ mg/l. ngày} \times 3,125. \text{ ngày}^{-1} = 24,0 \text{ mg/l}$$

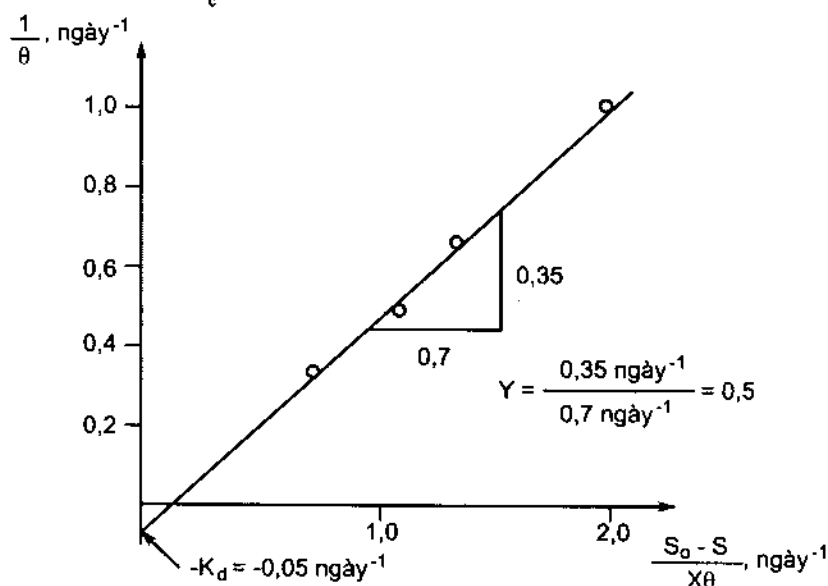
2. Xác định các tham số Y và K_d

+ Ta thiết lập phương trình

$$\frac{1}{\theta_c} = Y \frac{S_0 - S}{X\theta} - K_d \text{ và trên cơ sở đó tính bằng giá trị mới:}$$

STT	$\frac{1}{\theta_c} \text{ ngày}^{-1}$	$\frac{S_0 - S}{\theta X}, \text{ ngày}^{-1}$
1	0,313	0,715
2	0,500	1,156
3	0,625	1,325
4	0,909	1,901
5	0,909	1,946

+ Vẽ đồ thị $\frac{1}{\theta_c}$ và $\frac{S_0 - S}{X\theta}$



+ Điểm cắt trục tung :

$$-K_d = -0,05 \text{ ngày}^{-1}$$

$$\text{tức: } K_d = 0,05 \text{ ngày}^{-1}$$

+ Giá trị của tg góc nghiêng :

$$Y = \frac{0,35 \text{ ngày}^{-1}}{0,7 \text{ ngày}^{-1}} = 0,5$$

3. Xác định giá trị của tham số μ_m

$$\begin{aligned}\mu_m &= KY \\ &= 3,125 \text{ ngày}^{-1} \times 0,5 \\ &= 1,563 \text{ ngày}^{-1}\end{aligned}$$

Như vậy, ta đã tìm được các tham số của mô hình động học Herbert μ_m , K_s , K_d .

2.3. CÁC MÔ HÌNH CẤU TRÚC DÒNG TIÊU BIỂU TRONG THIẾT BỊ XỬ LÝ NƯỚC THẢI

Tùy thuộc vào dạng của hàm phân bố mà sự đa dạng của mô hình cấu trúc dòng xuất hiện trong những thiết bị khác nhau có thể biểu diễn ở dạng những mô hình thủy động sẽ được mô tả dưới đây. Những mô hình thủy động này (người ta gọi những mô hình cấu trúc dòng như thế) phản ánh ảnh hưởng ngẫu nhiên của các hiện tượng chuyển động của vật chất.

2.3.1. Mô hình đẩy lí tưởng

Theo mô hình này, ta chấp nhận dòng chảy pittong không có khuấy trộn dọc theo dòng và có sự phân bố đều vật chất theo hướng vuông góc với hướng chuyển động (hình 2.5a). Thời gian lưu của tất cả các phần tử trong hệ là như nhau và bằng tỉ số dung tích của hệ với lưu lượng chất lỏng.

Mô tả toán học của hệ có dạng:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = -w \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.12)$$

Trong đó:

C – nồng độ của vật chất (chất hay năng lượng);

τ – thời gian;

w – tốc độ tuyến tính của dòng;

x – tọa độ.

Các đường cong đầu ra ở dạng nhiều bậc $[F(\tau) = C/C_0]$ hay nhiều xung $[C(\tau) = C/C_0]$ được thể hiện trên hình 2.5. Nhìn vào dạng đường cong đầu ra ta thấy, mô hình đẩy lí tương ứng với tín hiệu nhiều giữ nguyên dạng và chỉ bị chuyển dịch đi một khoảng θ .

Trên đồ thị đường cong đầu ra θ là thời gian không thứ nguyên $\theta = \tau V_c / V$

Trong đó:

τ – thời gian thực ;

V_c – tốc độ dòng ;

V – thể tích của hệ.

Mô hình đẩy lí tương ở mức gần đúng trước tiên tương ứng với các quá trình xảy ra trong thiết bị dạng ống có tỉ số giữa chiều dài ống và đường kính ống lớn hơn 100.

2.3.2. Mô hình trộn lí tưởng

Theo mô hình này, ta chấp nhận có sự phân bố đều vật chất trong toàn bộ dòng. Sự phụ thuộc giữa nồng độ vật chất trong dòng ở đầu vào (C_v) và đầu ra (C_r) có dạng:

$$\frac{dC_r}{d\tau} = \frac{V_c}{V} (C_v - C_r) \quad (2.13)$$

Các đường cong đầu ra với tác động nhiều bậc thang và xung được biểu diễn trên hình 2.5b.

	Mô hình tiêu biểu	Sơ đồ dòng	Tính chất của tín hiệu đầu ra	
			Với nhiễu bậc	Với nhiễu xung
a	Mô hình đẩy lí tưởng			
b	Mô hình trộn lí tưởng			
c	Mô hình khuếch tán một tham số			
	Mô hình khuếch tán hai tham số			
d	Mô hình dây hộp			

Hình 2.5. Tính chất của tín hiệu đầu ra với tác động nhiễu và những sơ đồ dòng tiêu biểu trong thiết bị miêu tả bằng các mô hình toán học

Hàm đáp ứng (tín hiệu đầu ra) của hệ có dạng:

$$C(\tau)d\tau = \frac{V_c}{V} e^{-V_c\tau/V} d\tau = \frac{e^{-\tau/\bar{\tau}}}{\tau} d\tau \quad (2.14)$$

Trong đó: $\bar{\tau}$ – thời gian lưu trung bình trong hệ.

Mô hình trộn lí tưởng tương ứng với các quá trình xảy ra trong thiết bị hình trụ với đáy hình bán cầu trong điều kiện khuấy trộn mạnh và có các vách chắn.

2.3.3. Mô hình khuếch tán

Mô hình khuếch tán có 2 loại: mô hình khuếch tán một tham số (hình 2.5c) và mô hình khuếch tán 2 tham số (hình 2.5d).

2.3.3.1. Mô hình khuếch tán một tham số

Cơ sở của mô hình này là mô hình đẩy lí tưởng có thêm khuấy trộn dọc tuân thủ định luật khuếch tán hình thức. Thông số đặc trưng của mô hình là hệ số khuếch tán rối hay hệ số khuấy trộn ngược D_L .

Khi xây dựng mô hình khuếch tán một tham số, người ta chấp nhận những giả thiết sau: sự thay đổi của nồng độ chất là một hàm số liên tục của toạ độ (khoảng cách), nồng độ chất ở tiết diện xem xét là không đổi, tốc độ dòng và hệ số khuấy trộn dọc không thay đổi theo chiều dài và tiết diện của dòng.

Với những giả thiết như thế, mô hình sẽ có dạng:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = -w \frac{\partial C}{\partial x} + D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (2.15)$$

Phương trình (2.15) khác phương trình (2.12) bởi số hạng bổ sung $D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ tính tới khuếch tán rối hay khuấy trộn ngược. Đại lượng D_L được xác định bằng thực nghiệm.

2.3.3.2. Mô hình khuếch tán hai tham số

Mô hình này tính tới cả khuấy trộn dòng theo hướng dọc và radian (hướng kính), hơn nữa mô hình được đặc trưng bởi hệ số khuấy trộn dọc (D_L) và hệ số khuấy trộn radian (D_r). Người ta cũng cho rằng, các đại lượng

D_L và D_R không thay đổi theo chiều dài và tiết diện thiết bị, còn tốc độ dòng thì không đổi.

Với trường hợp chuyển động của dòng trong thiết bị hình trụ bán kính R với tốc độ không đổi theo chiều dài và tiết diện thì mô hình khuếch tán 2 tham số có dạng:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = -w \frac{\partial C}{\partial x} + D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{D_R}{R} \cdot \frac{\partial}{\partial R} \left(R \frac{\partial C}{\partial R} \right) \quad (2.16)$$

Bằng thực nghiệm xác định các hệ số khuấy, trộn dọc D_L và radian D_R , người ta thường biểu diễn chúng ở dạng những tổ hợp vô thứ nguyên – các chuẩn số *Pekle*:

$$Pe = \frac{wL}{D_L} \quad \text{hay} \quad Pe_R = \frac{wL}{D_R}$$

Trong đó, L là kích thước chiều dài có tính quyết định của hệ.

Khi đó, phương trình của mô hình khuếch tán cũng được đưa về dạng vô thứ nguyên. Với mục đích đó, ta tìm các đại lượng vô thứ nguyên gồm: Nồng độ vô thứ nguyên $C = C/C_0$; chiều dài vô thứ nguyên $Z = \ell/L$ và thời gian $\tau = L/w = V/V_c$ (V – thể tích của hệ, V_c – tốc độ dòng).

Vì tốc độ dòng chấp nhận không đổi nên phương trình (2.15) đối với chế độ ổn định sẽ có dạng:

$$-\frac{dC}{dZ} + \frac{D_L}{wL} \cdot \frac{d^2 C}{dZ^2} = 0 \quad (2.17)$$

Nếu $Pe \rightarrow \infty$ thì mô hình khuếch tán trở thành mô hình đẩy lí tưởng, còn nếu $Pe \rightarrow 0$ thì lại trở thành mô hình trộn lí tưởng.

Các đường cong đầu ra với các tác động nhiễu bậc và nhiễu xung có dạng như trên hình (2.5c) và (2.5d).

Đối với các sai lệch nhỏ so với dòng đẩy lí tưởng (thường thấy ở những thiết bị dạng ống) thì đường cong C được xấp xỉ rất tốt bằng phân bố chuẩn tức phân bố Gauss và sự liên hệ giữa phương sai s^2 và D_L/wL được xác định bằng phương trình:

$$s^2 = \frac{2D_L}{wL} \quad (2.18)$$

2.3.4. Mô hình dây hộp

Cơ sở của mô hình dây hộp là khái niệm về khuấy trộn lí tưởng trong phạm vi các hộp nằm kế tiếp nhau và không có khuấy trộn giữa các hộp (hình 2.5e). Thông số đặc trưng của mô hình là số hộp m . Mô tả toán học của mô hình dây hộp cấu tạo từ m phương trình vi phân tuyến tính bậc một:

$$\frac{1}{m} \frac{dC_i}{d\tau} = \frac{1}{\tau_m} (C_{i-1} - C_i) \quad (2.19)$$

Trong đó: $i = 1, 2, \dots, m$.

Mối liên hệ giữa phân bố theo đường cong C và số hộp được xác định từ

$$\text{hệ thức: } C = \frac{C}{C_0} = \frac{m\theta^{m-1}}{(m-1)!} e^{-m\theta} \quad (2.20)$$

Trong đó: $\theta = \tau / (V / V_c)$

Giữa số hộp và phương sai s^2 thì

$$s^2 = \frac{1}{m} = 2 \frac{D_L}{wL} - 2 \left(\frac{D_L}{wL} \right)^2 (1 - e^{-wL/D_L}) \quad (2.21)$$

Với $m > 10$ thì đối với các tính toán thực tiễn có thể chấp nhận công thức dưới đây mà vẫn đảm bảo đủ độ chính xác.

$$s^2 = \frac{1}{m} = 2 \frac{D_L}{wL} \quad (2.21a)$$

Khi $m = 1$ mô hình dây hộp trở thành mô hình trộn lí tưởng, còn khi $m = \infty$ thành mô hình đẩy lí tưởng. Các đường cong đầu ra của mô hình dây hộp cho các tác động nhiễu bậc và nhiễu xung được chỉ ra trên hình 2.5e.

Các giá trị của 2 mômen đầu tiên của đường cong phân bố đối với mô hình dây hộp, được xác định theo kết quả thực nghiệm bởi các biểu thức:

$$\begin{aligned} \mu_1 &= \frac{b}{m} \left\{ 1 - e^{-bx} \left[\frac{(bx)^m}{m!} + \frac{(bx)^{m-1}}{(m-1)!} + \frac{(bx)^2}{2!} + bx + 1 \right] \right\} \\ \mu_2 &= \frac{(m+1)^m}{b^2} \left\{ 1 - e^{-bx} \left[\frac{(bx)^{m+1}}{(m+1)!} + \frac{(bx)^m}{m!} + \frac{(bx)^2}{2!} + bx + 1 \right] \right\} \\ b &= m \varepsilon \quad \varepsilon = \frac{\mu_1}{V/V_c} \quad x = \frac{a}{\mu_1} \end{aligned}$$

a – thời gian tương ứng với thời điểm kết thúc thí nghiệm; các giá trị của mômen được tính theo phương pháp lặp.

Mô hình dây hộp được sử dụng để mô tả chuỗi thiết bị có cánh khuấy và khuấy trộn tốt, các tháp hấp thụ và trích li ở những chế độ thủy động nào đó, các thiết bị với các lớp giả lỏng (thiết bị tầng sôi).

Trong bảng 2.1 đưa ra hàm truyền của các mô hình lí tưởng, trong đó p là biến phức.

BẢNG 2.1. HÀM TRUYỀN CỦA CÁC MÔ HÌNH TIÊU BIỂU

STT	MÔ HÌNH TIÊU BIỂU	HÀM TRUYỀN
1	Trộn lí tưởng	$W(p) = \frac{1}{T_1 p + 1}$ Trong đó: $T_1 = V/V_c$; V thể tích thiết bị; V_c – tốc độ chất lỏng
2	Đẩy lí tưởng	$W(p) = e^{-pT_d}$ Trong đó: $T_d = L/w$, chậm trễ do vận tải; L – chiều dài thiết bị; w – tốc độ tuyến tính của chất lỏng
3	m thiết bị trộn lí tưởng nối tiếp nhau có cùng thể tích	$W(p) = \frac{1}{(T_1 p + 1)^m}$
4	m thiết bị trộn lí tưởng nối tiếp nhau có thể tích khác nhau	$W(p) = \frac{1}{(T_1 p + 1)(T_2 p + 1) \dots (T_m p + 1)}$ Trong đó: $T_1 = V_1/V_c$, $T_2 = V_2/V_c, \dots$, $T_m = V_m/V_c$
5	Đẩy lí tưởng nối với trộn lí tưởng	$W(p) = W(p) = \frac{e^{-pT_d}}{T_1 p + 1}$

Một biến dạng của mô hình dây hộp là mô hình dây hộp với dòng ngược, trong đó tính tới sự có mặt của dòng ngược giữa các hộp (hình 2.6). Các thông số của mô hình này là số hộp m và phần dòng ngược f.

Mô tả toán học của mô hình dây hộp với dòng ngược cũng như là mô hình dây hộp không có dòng ngược kể trên là một hệ m phương trình vi phân tuyến tính bậc một:

$$\begin{cases}
\frac{V_h}{V_c} \cdot \frac{dC_1}{d\tau} + (1+f)C_1 - fC_2 = C_0 \\
\frac{V_h}{V_c} \cdot \frac{dC_2}{d\tau} + (1+2f)C_2 - fC_3 = (1+f)C_1 \\
\vdots \\
\frac{V_h}{V_c} \cdot \frac{dC_i}{d\tau} + (1+2f)C_i - fC_{i+1} = (1+f)C_{i-1} \\
\vdots \\
\frac{V_h}{V_c} \cdot \frac{dC_{m-1}}{d\tau} + (1+2f)C_{m-1} - fC_m = (1+f)C_{m-2} \\
\frac{V_h}{V_c} \cdot \frac{dC_m}{d\tau} + (1+f)C_m = (1+f)C_{m-1}
\end{cases} \quad (2.22)$$

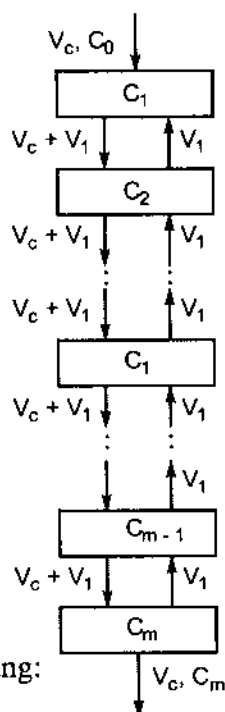
Trong đó: V_h – thể tích một hộp; $V_h = V/m$; $f = V_1/V_c$.

Hàm truyền của mô hình dây hộp với dòng ngược có dạng:

$$W(p) = \frac{\overline{C_m}(p)}{\overline{C_0}(p)} = \frac{1}{\lambda_m p^m + \lambda_{m-1} p^{m-1} + \dots + \lambda_j p^j + \dots + \lambda_1 p + 1}$$

$$\lambda_j = \frac{1}{\xi^{m-1} m^j} \left[\sum_{k=0}^{m-j} \xi^{kf[(m-j)-k]} \frac{(k+j)![(m-2)-k]!}{k!j![(m-j)-k]!(j-2)!} \right]$$

$$\xi = 1 + f$$



Hình 2.6.
Mô hình
dây hộp
với dòng
ngược

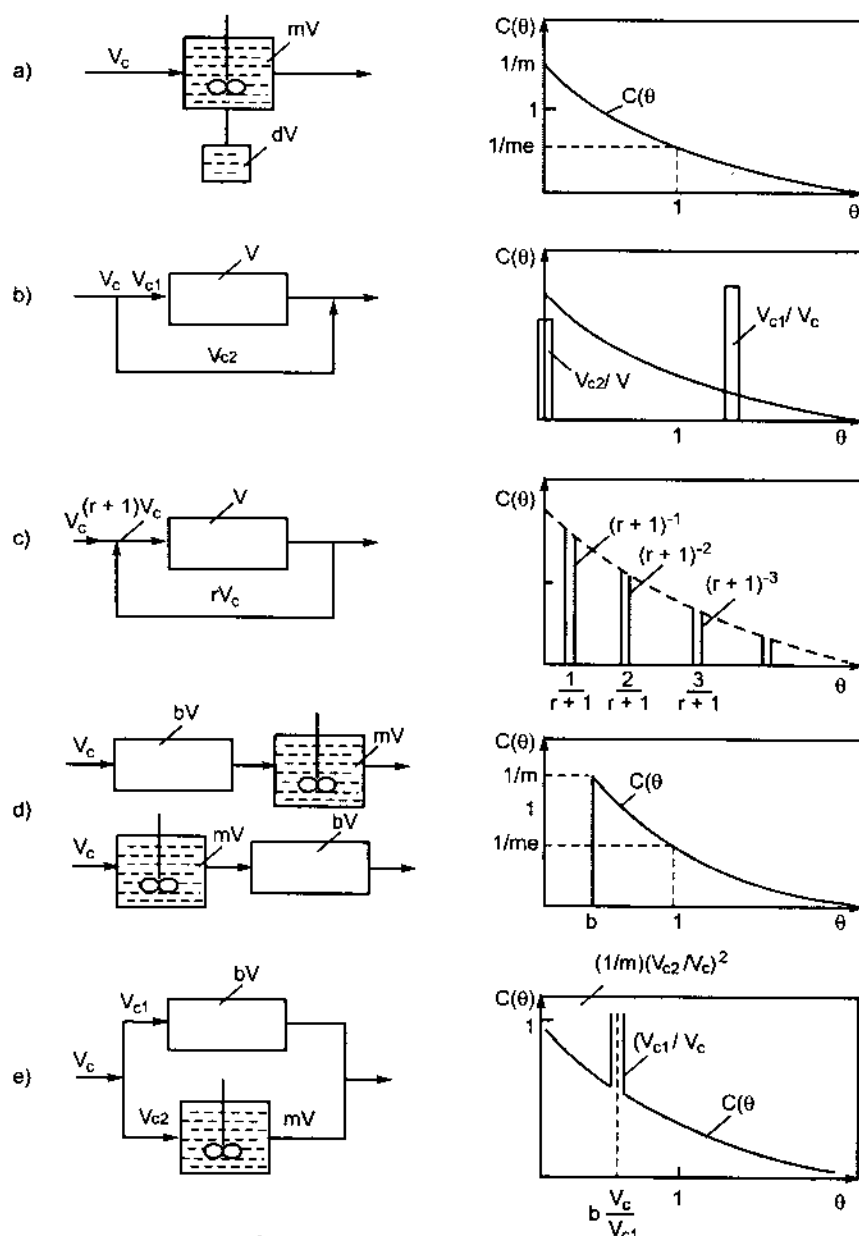
Khi $m \rightarrow \infty$ thì mô hình dây hộp với dòng ngược trở thành mô hình khuếch tán với khuấy trộn dọc. Mô hình dây hộp với dòng ngược được sử dụng để mô tả các tháp đĩa chia thành các phần (section) và tháp đệm, trong đó quan sát thấy hiện tượng chất bán ngược trở lại với hướng của dòng chính.

2.3.5. Mô hình phối hợp

Không phải tất cả các quá trình thực đều có thể mô tả bằng những mô hình đã xem xét ở trên. Ví dụ còn có các quá trình với dòng chảy qua, dòng tuần hoàn hay vùng chết. Trong những trường hợp này phải sử dụng các mô hình phối hợp.

Khi xây dựng mô hình phối hợp, người ta chấp nhận rằng, thiết bị cấu tạo từ những vùng riêng biệt được nối với nhau kế tiếp hay song song, cấu trúc dòng của các vùng đó cũng khác nhau: vùng đẩy lí tưởng, vùng trộn lí tưởng, vùng với khuấy trộn dọc, vùng chết. Ngoài ra còn có thể quan sát thấy những dòng cục bộ sau: chảy qua, tuần hoàn...

Sự có mặt của các dòng trên được xác định theo đường cong thực nghiệm, đó là sự phụ thuộc của tín hiệu đầu ra vào đầu vào. Cần thấy rằng, bằng việc tăng số vùng thì có thể mô tả một quá trình có độ phức tạp bất kì. Nhưng khi đó, quá trình mô hình hoá toán học trở nên phức tạp hơn. Trên hình 2.7 chỉ ra đường cong thực nghiệm của những mô hình phối hợp đơn giản nhất đối với tác động nhiễu dạng xung.



Hình 2.7. Một số mô hình phối hợp và đường cong đáp ứng nhiễu dạng xung

a – trộn lí tưởng với vùng chết $\bar{\theta} = \frac{1}{m}$; $c(\theta) = \frac{1}{m} \exp\left(-\frac{1}{m}\theta\right)$

b – đẩy lí tưởng với dòng chảy qua $\bar{\theta} = 1$;

c – đẩy lí tưởng với dòng tuần hoàn $\bar{\theta} = 1$;

d – mắc nối tiếp thiết bị đẩy lí tưởng với trộn lí tưởng và ngược lại

$$\bar{\theta}_b = b ; \bar{\theta}_m = m$$

$$c(\theta) = \frac{1}{m} \exp\left(\frac{1}{m}(\theta - b)\right)$$

e – mắc song song thiết bị đẩy lí tưởng và trộn lí tưởng

$$\bar{\theta}_b = b \frac{V_c}{V_{c_1}} ; \bar{\theta}_m = m \frac{V_c}{V_{c_2}}$$

$$c(\theta) = \frac{1}{m} \left(\frac{V_{c_2}}{V_{c_1}}\right)^2 \exp\left(-\frac{1}{m} \cdot \frac{V_{c_2}}{V_c} \theta\right)$$

b, m – tương ứng là phần vùng đẩy và trộn lí tưởng.

Tiếp theo, ta sẽ xem xét những mô hình phối hợp chung nhất mô tả một số lượng lớn thiết bị. Bảng 2 đưa ra những hàm truyền của các mô hình này và những phương trình để tính các thông số của mô hình khi đưa tác động nhiễu bậc và nhiễu xung, còn trên hình 2.8 là những sơ đồ mô hình tương ứng.

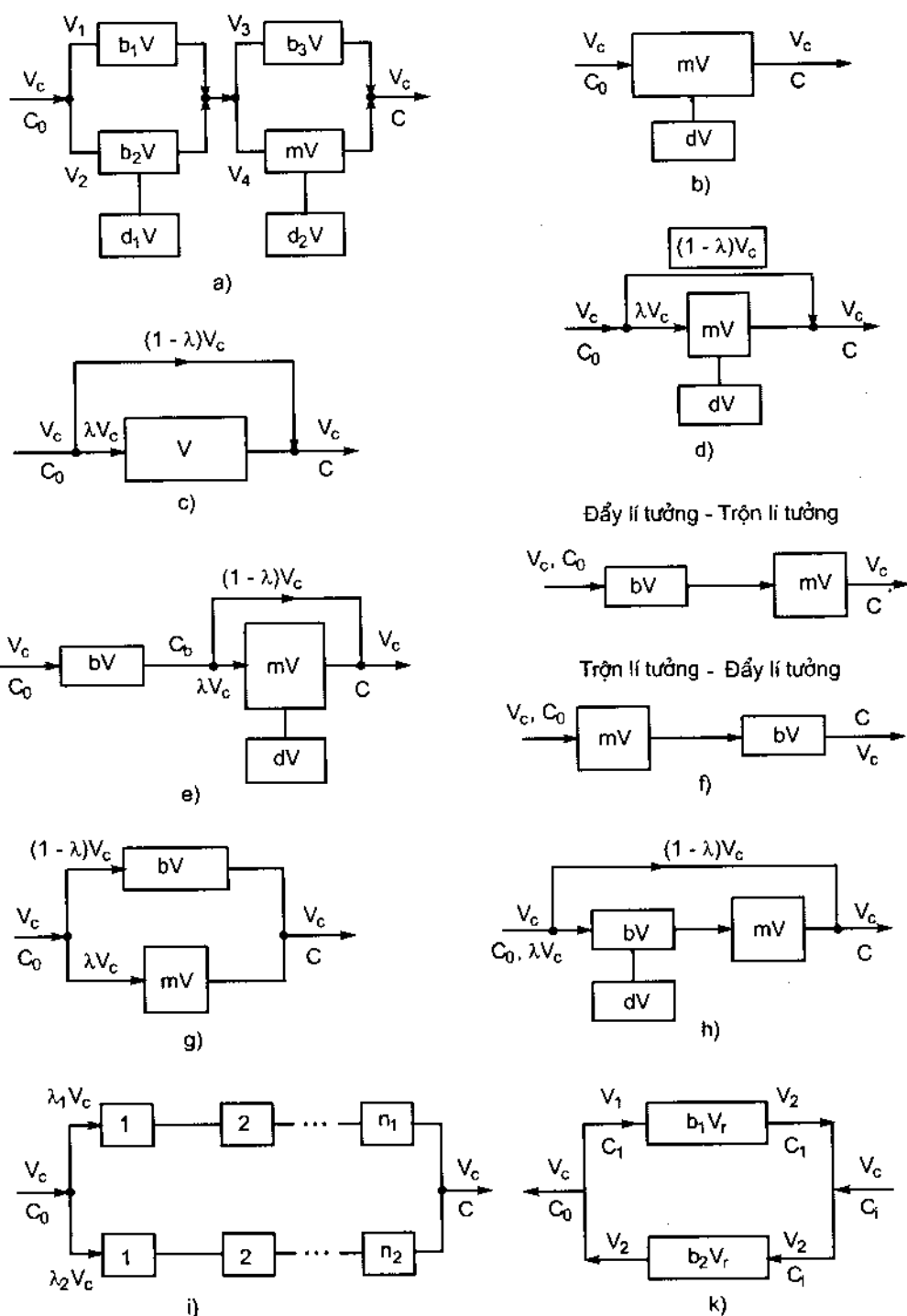
BẢNG 2.2

SƠ ĐỒ MÔ HÌNH TRÊN HÌNH 2.7	PHƯƠNG TRÌNH CỦA MÔ HÌNH	LỜI GIẢI
a	$W(p) = \sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{(V_i V_4 / V_c^2) \exp(-V_c \tau p / V_i)}{1 + \frac{m V_c \tau}{V_4} p} + -\frac{V_i V_3}{V_c^2} \exp \left[-\left(\frac{b_i}{V_i} + \frac{b_3}{V_3} \right) V_c \tau p \right] \right\}$	$C(\theta) = \sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{V_i V_3}{V_c^2} \delta \left(\theta - \frac{V_c}{V_i} b_i - \frac{V_c}{V_3} b_3 \right) + \frac{V_i V_4}{m V_c^2} \exp \left[-\frac{V_4}{m V_c} \left(\theta - \frac{V_c}{V_i} b_i \right) \right] \delta \left(\theta - \frac{V_c}{V_i} b_i \right) \right\}$ $F(\theta) = \sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{V_i V_3}{V_c^2} \eta \left(\theta - \frac{V_c}{V_i} b_i - \frac{V_c}{V_3} b_3 \right) + \frac{V_i V_4}{V_c^2} \left[1 - \exp \left(-\frac{V_4}{m V_c} \left(\theta - \frac{V_c}{V_i} b_i \right) \right) \right] \eta \left(\theta - \frac{V_c}{V_i} b_i \right) \right\}$
b	$\frac{dc}{dt} = \frac{1}{m \tau} (c_0 - c) ; W(p) = \frac{1}{m \tau p + 1}$	$C(\theta) = \frac{1}{m} e^{-\theta/m} ; F(\theta) = 1 - e^{-\theta/m}$

c	$\frac{dc}{d\tau} = \frac{\lambda^2}{\tau} \left(c_0 - \frac{c}{\lambda} \right);$ $W(p) = (1-\lambda) + \frac{\lambda}{\frac{\tau}{\lambda} p + 1}$	$C(\theta) = (1-\lambda) \delta(\theta) + \lambda^2 e^{-\lambda \theta};$ $F(\theta) = (1-\lambda) \eta(\theta) + \lambda (1 - e^{-\lambda \theta})$
d	$\frac{dc}{d\tau} = \frac{\lambda^2}{m\tau} \left(c_0 - \frac{c}{\lambda} \right);$ $W(p) = (1-\lambda) + \frac{\lambda}{m\tau p / (\lambda + 1)}$	$C(\theta) = (1-\lambda) \delta(\theta) + \frac{\lambda^2}{m} e^{-\lambda \theta / m};$ $F(\theta) = (1-\lambda) \eta(\theta) + \lambda (1 - e^{-\lambda \theta / m})$
e	$\frac{dc_b}{d\tau} = -\frac{V_c}{b} \frac{dc_b}{dV}; \quad \frac{dc}{d\tau} = \frac{\lambda^2}{m\tau} \left(c_b - \frac{c}{\lambda} \right);$ $W(p) = e^{-brp} \left[(1-\lambda) + \frac{\lambda}{m\tau p / (\lambda + 1)} \right]$	$C(\theta) = (1-\lambda) \delta(\theta - b) + \frac{\lambda^2}{m} e^{-\lambda(\theta-b)/m} \delta(\theta - b);$ $F(\theta) = (1-\lambda) \eta(\theta - b) + \lambda \left[1 - e^{-\lambda(\theta-b)/m} \right] \eta(\theta - b)$

f	$W(p) = \frac{e^{-b\bar{p}}}{m\bar{p} + 1}$	$C(\theta) = \frac{1}{m} e^{-(\theta-b)/m} \delta(\theta-b) ;$ $F(\theta) = \left[1 - e^{-\lambda(\theta-b)/m} \right] \eta(\theta-b)$
g	$W(p) = (1-\lambda) e^{(-b\bar{p})/(1-\lambda)} + \frac{\lambda}{(m\bar{p}/\lambda) + 1}$	$C(\theta) = (1-\lambda) \delta\left(\theta - \frac{b}{1-\lambda}\right) + \frac{\lambda^2}{m} e^{-\lambda\theta/m} ;$ $F(\theta) = (1-\lambda) \eta\left(\theta - \frac{b}{1-\lambda}\right) + \lambda(1 - e^{-\lambda\theta/m})$
h	$W(p) = (1-\lambda) + \lambda \frac{e^{-b\bar{p}/\lambda}}{1 + (m\bar{p}/\lambda)}$	$C(\theta) = (1-\lambda) \delta(\theta) + \frac{\lambda^2}{m} e^{-\lambda(\theta-b/\lambda)/m} \delta\left(\theta - \frac{b}{\lambda}\right) ;$ $F(\theta) = (1-\lambda) \eta(\theta) + \lambda \left[1 - e^{-\lambda(\theta-b/\lambda)/m} \right] \eta\left(\theta - \frac{b}{\lambda}\right)$

i	$W(p) = \frac{\lambda_1}{[1 + \tau p / (n\lambda_1)] n_1} + \frac{\lambda_2}{[1 + \tau p / (n\lambda_2)] n_2}$ $\lambda_1 + \lambda_2 = 1; \quad n_1 + n_2 = n$	$C(\theta) = \sum_{i=1}^2 \frac{\lambda_i^{n_i+1} n_i! \theta^{n_i-1}}{(n_i-1)!} e^{-n\lambda_i \theta};$ $F(\theta) = \sum_{i=1}^2 \left[\lambda_i (1 - e^{-n\lambda_i \theta}) \sum_{j=1}^{n_i} \frac{1}{j!} (n\lambda_i \theta)^j \right]$
k	$W(p) = \frac{\frac{V_c}{V_1} e^{-(p+k)\tau_{\tau_0} \frac{b_1 V_c}{V_1}}}{1 + \frac{V_2}{V_1} e^{\frac{-(p+k)\tau_{\tau_0} \left(\frac{b_1 V_c}{V_1} + \frac{b_2 V_c}{V_2} \right)}}}$	$C(\theta) = \frac{V_c}{V_1} e^{-k\tau_0 \frac{b_1 V_c}{V_1}} \sum_{N=1}^N x \left[\left\{ \frac{V_2}{V_1} e^{-k\tau_0 \left(\frac{b_1 V_c}{V_1} + \frac{b_2 V_c}{V_2} \right)} \right\}^{N-1} \times \right.$ $\left. \times \delta \left[\theta - \frac{Nb_1 V_c}{V_1} + \frac{(N-1)b_2 V_c}{V_2} \right] \right\};$ $F(\theta) = \frac{V_c}{V_1} e^{-k\tau_0 \frac{b_1 V_c}{V_1}} \sum_{N=1}^N \left\{ \left[\frac{V_2}{V_1} e^{-k\tau_0 \left(\frac{b_1 V_c}{V_1} + \frac{b_2 V_c}{V_2} \right)} \right]^{N-1} \times \right.$ $\left. \times \left[\theta - \frac{Nb_1 V_c}{V_1} - \frac{(N-1)b_2 V_c}{V_2} \right] \right\}$



Hình 2.8. Sơ đồ các mô hình phối hợp sử dụng để mô tả cấu trúc dòng trong thiết bị

- a – đối với các tháp đệm, các lớp ổn định, các lớp tầng sỏi, tháp trích li và thiết bị có cánh khuấy
- b – đối với quá trình trộn trong thiết bị ở tốc độ khuấy nhỏ
- c – đối với quá trình trộn trong thiết bị có cánh khuấy với tốc độ cấp nguyên liệu lớn và các đầu vào ra gần nhau
- d – đối với quá trình trộn trong thiết bị có cánh khuấy ở tốc độ dòng vào cao và đầu vào đầu ra gần nhau
- e – đối với thiết bị có cánh khuấy, các dòng trong ống, các lớp tầng sỏi và ổn định, các tháp hấp thụ
- f – đối với các tháp đệm, các dòng trong ống, các lớp tầng sỏi và ổn định, các thiết bị có cánh khuấy
- g – đối với các lớp tầng sỏi và ổn định, các thiết bị có cánh khuấy
- h – để tính dòng trên đĩa, các lớp tầng sỏi và ổn định, thiết bị có cánh khuấy
- i – đối với tháp sỏi bọt, thiết bị có cánh khuấy
- k – đối với các thiết bị có cánh khuấy và tuần hoàn phía trong
b, m, d – các phần vùng đẩy, vùng trộn và vùng chết
- λ – phần dòng chảy qua thiết bị

Phân tích một thiết bị thực tế và những điều kiện cụ thể tương ứng của quá trình công nghệ luôn cho phép ta xây dựng được mô hình của nó trên cơ sở lựa chọn một trong những mô hình ở bảng 2.2.

Những kết quả đưa vào bảng 2.2 là những phương trình nhận được trên cơ sở các phép biến đổi. Lấy ví dụ cho mô hình (xem bảng 2.2 và hình 2.8) với 2 vùng đẩy lí tưởng và dòng tuần hoàn khi có tác động nhiễu xung.

Cân bằng chất cho vùng đẩy đầu tiên của phản ứng hoá học bậc một có dạng:

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = -\frac{V_1}{b_1} \cdot \frac{\partial c}{\partial V_2} - kc \quad (2.24)$$

Phương trình (2.24) được biến đổi theo Laplace ở những điều kiện ban đầu và điều kiện biên sau

$$c = 0 \text{ ở } \tau = 0 \text{ và } c = c_1 \text{ ở } V_2 = 0 \quad (2.25)$$

Khi đó (2.24) có dạng:

$$\frac{c_i(p)}{c_1(p)} = e^{-(p+k)b_1 V_2 / V_1} \quad (2.26)$$

Vì $\tau_n = V_r / V_c$ nên (2.26) được biến đổi thành:

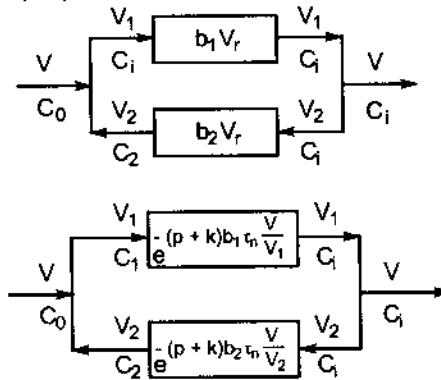
$$\frac{c_i(p)}{c_i(p)} = e^{-(p+k)b_1\tau_n V_c / V_1} \quad (2.27a)$$

Tương tự đối với vùng đẩy lí tường thứ hai ta có

$$\frac{c_2(p)}{c_i(p)} = e^{-(p+k)b_2\tau_n V_c / V_2} \quad (2.27b)$$

Các phương trình (2.27a) và (2.27b) tạo thành 2 khối (xem bảng 2.2 và 2.8 k).

Nếu tính tới cân bằng chất ở điểm đầu ra khỏi hệ (xem hình 2.9) ta có hàm truyền của toàn bộ hệ:



Hình 2.9. Mô hình phối hợp với dòng tuần hoàn và các vùng đẩy

Trong trường hợp thay đổi nồng độ dạng xung ở đầu vào thì nồng độ đầu ra được xác định qua hàm truyền :

$$c_i(p) = c_0 W(p) \quad (2.28)$$

Như vậy, kết quả hệ sau tác động của nhiều dạng xung sẽ là

$$\frac{c_i(\tau)}{c_0} = L^{-1} [W(p)] = \frac{V}{V_1} e^{-k\tau_n b_1 \frac{V_c}{V_1 L} - 1} X \left[\frac{e^{-p\tau_n b_1 \frac{V_c}{V_1}}}{1 - \frac{V_2}{V_1} \exp \left[-(p+k) V_c \tau_n \left(\frac{b_1}{V_1} + \frac{b_2}{V_2} \right) \right]} \right] \quad (2.29)$$

Khai triển thừa số cuối cùng thành chuỗi và tiến hành phép biến đổi ngược ta được:

$$\frac{c_i(\tau)}{c_0} = \frac{V_c}{V_1} e^{k\tau_n b_1 \frac{V_c}{V_1}} \sum_{N=1}^N \left[\frac{V_2}{V_1} e^{-k\tau_n b_1 \left(\frac{b_1 V_c}{V_1} + \frac{b_2 V_c}{V_2} \right)} \right]^{V_d} \times \delta \left(\tau - \frac{Nb_1 V_c \tau_n}{V_1} + \frac{(N-1)b_2 V_c \tau_n}{V_2} \right) \quad (2.30)$$

Đặt $\theta = \tau/\tau_n$ ta sẽ tìm được hàm xung biểu diễn trong bảng 2.2 và trên hình 2.8k.

Trong trường hợp sử dụng thứ tự biến đổi như trên để nhận hàm của nhiều bậc thì cần đưa vào hệ thức :

$$\frac{c_i(\tau)}{c_0} = L^{-1} \frac{W(p)}{p} \quad (2.31)$$

Trong phần lớn trường hợp sự có mặt các vùng chết cũng như là dòng chảy qua và dòng tuần hoàn có thể thiết lập được bằng cách quan sát trực tiếp hoặc xem xét những đặc điểm cấu tạo bên trong của thiết bị, xem xét các điểm đầu vào và ra của nguyên liệu và sản phẩm.

2.3.6. Tính tương hợp của các mô hình cấu trúc dòng

Tính tương hợp của mô hình trộn với thiết bị nghiền cứu có thể xác lập một cách đơn giản nhất bằng cách đưa các số liệu thí nghiệm về phân bố nồng độ trong trường hợp tín hiệu bậc lên đồ thị $\ln[1 - (C_i/C_0)]$, τ . Nếu trên đồ thị đó nhận được một đường thẳng thì độ nghiêng của nó và các đoạn thẳng cắt trục toạ độ xác định các thông số của mô hình trộn hay các tổ hợp của nó. Điều này trực tiếp có thể thấy được từ những phương trình kể trên.

Ví dụ, mô hình trộn lí tưởng ở tác động của nhiều bậc mô tả tính ỳ của một khâu điều khiển :

$$y = Kx(1 - e^{-\tau/T})$$

Khi hệ số tăng cường $K = 1$ ta có

$$\frac{y}{x} = \frac{c_i}{c_0} = F(\tau) = (1 - e^{-\tau/T}) \quad (2.32)$$

Phương trình này có thể trực tiếp rút ra từ nghiệm của phương trình cho mô hình trộn lí tưởng:

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{1}{\tau}(c_0 - c_i) \quad (2.33)$$

Trong đó: $\bar{\tau} = V / V_c = T$

Từ đó sau khi chia biến và lấy tích phân ta được:

$$\ln \left(1 - \frac{c_i}{c_0} \right) = -\frac{1}{\tau} \tau \quad (2.34)$$

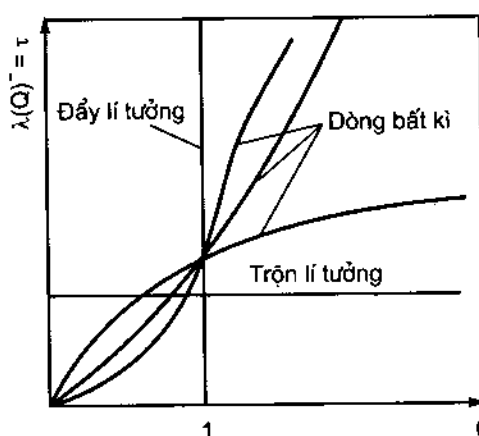
$$\text{hay} \quad \frac{c_i}{c_0} = 1 - e^{-\tau/\bar{\tau}} \quad (2.35)$$

Như vậy, ở toạ độ $\ln[1 - (c_i/c_0)]$, τ và nhiều bậc, mô hình trộn phải cho ta đường thẳng và tang của góc nghiêng tỉ lệ nghịch với thời gian lưu ở vùng trộn $\tau/\bar{\tau}$ hay tương ứng là $1/m$, trong đó m là thể tích của vùng trộn.

Để đánh giá các đường cong phản ánh mô hình này hay mô hình khác, rất thuận tiện và rõ ràng hơn khi dùng đồ thị hàm số cường độ. Theo ý nghĩa vật lí thì hàm số cường độ là số đo xác suất ra khỏi thiết bị của phần tử của dòng đã nằm trong đó khoảng thời gian τ và rời khỏi nó trong khoảng thời gian $(\tau, \tau + d\tau)$. Hàm cường độ được tính theo phương trình:

$$\lambda(\tau) = -\frac{d}{d\tau} \ln [\bar{\tau}(1 - F(\tau))] \quad (2.36)$$

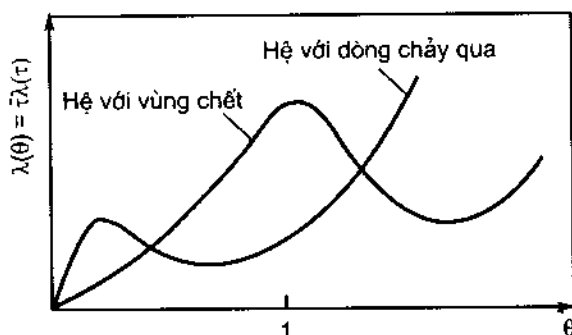
Đối với mô hình trộn lí tưởng $\lambda(\tau)$ phải là đại lượng không đổi bởi vì xác suất rời khỏi hệ của các phần tử không phụ thuộc vào tiền sử của nó. Đối với dòng pittông (đẩy lí tưởng) thì tất cả các phần tử đều rời khỏi thiết bị ở thời điểm $\bar{\tau} = V / V_c$ là biến cố chắc chắn cho nên hàm cường độ trong trường hợp này được biểu diễn bằng một đoạn thẳng song song với trục tung và qua trục hoành ở điểm $\theta = 1$ (trong đó $\theta = \tau/\bar{\tau}$) (hình 2.10).



Hình 2.10. Sự phụ thuộc của hàm cường độ vào thời gian vô thứ nguyên đối với các mô hình dòng khác nhau

Hàm cường độ của những dòng bất kì không thể hiện tính không đều một cách rõ ràng ở những đặc trưng trung bình của phân bố tuổi nằm giữa 2 đường vuông góc nhau tương ứng các hàm số λ của hệ lí tưởng (xem hình 2.9). Tính chất tăng dần của các hàm số này được giải thích rằng nếu phân tử chất lỏng càng ở lâu trong thiết bị thì xác suất để nó rời khỏi thiết bị càng cao.

Cũng vì vậy, lúc đầu khi phần chính của dòng rời thiết bị, sự tăng của hàm số λ sẽ quan sát được cho cả hệ với các vùng chết. Sau khi phần chính đã rời thiết bị thì xác suất của các phân tử còn lại rời thiết bị sẽ giảm đi bởi vì phần lớn chúng nằm ở vùng chết. Như vậy, trong trường hợp này hàm cường độ sẽ không tăng vô hạn mà sẽ qua cực đại rồi bắt đầu giảm dần (hình 2.11). Theo thời gian, các phân tử của môi trường lâm vào vùng chết cũng sẽ dần dần bắt đầu rời khỏi hệ thống. Và lúc này, nếu chúng ở trong hệ càng lâu thì xác suất rời khỏi hệ càng lớn tức là hàm số λ sau khi qua cực tiểu sẽ lại bắt đầu tăng không ngừng.



Hình 2.11. Sự phụ thuộc của các hàm cường độ vào thời gian vô thứ nguyên đối với các hệ có vùng chết và dòng chảy qua

Đối với các dòng chảy qua tính chất của hàm cường độ cũng được giải thích tương tự. Chỉ có điều ở đây, so với trường hợp trước thì thể tích tương đối của các phần chảy qua và phân chết (trong trường hợp này là chủ yếu) có thay đổi. Điều này dễ dàng thấy trên đồ thị của hàm số λ trên hình 2.10.

Ưu điểm chính của hàm cường độ là nhờ nó mà thiết lập được sự thực là tồn tại các vùng chết trong hệ một cách đơn giản và rõ ràng.

Do khi xây dựng mô hình toán học thường phải sử dụng những số liệu gần đúng về các giá trị khả dĩ của một vài thông số của mô hình nên xuất hiện nhiệm vụ hiệu chỉnh mô hình. Hiển nhiên là giải quyết nhiệm vụ đó chỉ có thể trên cơ sở mô hình hoá quá trình thực. Hơn nữa để hiệu chỉnh mô hình toán học có thể sử dụng mô hình vật lý một cách hiệu quả, tiến hành ở quy mô không lớn những quy luật vật lý cơ bản của đối tượng mô hình hoá. Nếu trong trường hợp này, mô hình toán học mô tả thoả đáng các tính chất của mô hình vật lý ở các quy mô phòng thí nghiệm hoặc bán sản xuất thì có thể giả thiết rằng, ít nhất ở phần các tính chất cơ bản mô hình toán học của cấu trúc đó sẽ tương ứng với đối tượng ở quy mô công nghiệp.

Để hiệu chỉnh mô hình toán học theo những kết quả đó trên quá trình thực hay mô hình vật lý, trước hết cần có đánh giá về lượng tính tương hợp của mô hình. Giả sử rằng, trong trường hợp tổng quát, mô hình toán học có m tham số mà giá trị của chúng không thể cho trước được và khi khảo sát quá trình thực chỉ đo được i biến số đặc trưng trạng thái của hệ thống. Khi đó, có thể xây dựng một hàm số sau làm biểu thức định lượng tính tương hợp của mô hình:

$$\phi = \sum_{k=1}^i a_k (\xi_k - \overline{\xi_k})^2 \quad (2.37)$$

Trong đó :

ξ_k – các giá trị của biến trong mô hình;

$\overline{\xi_k}$ – những giá trị tương ứng của biến đo được trực tiếp trên đối tượng mô hình hoá;

a_k – hệ số trọng lượng (trọng số).

Các trọng số có thể chọn theo suy diễn về độ quan trọng của các biến này hay các biến khác để sử dụng tiếp theo trong mô hình. Ví dụ, trong trường hợp đơn giản nhất, khi mô hình toán học của quá trình được xây dựng để nghiên cứu ảnh hưởng của các điều kiện được phân chia theo tính chất

đặc trưng của sản phẩm thì những giá trị lớn nhất của trọng số ta sẽ gán cho các biến đại diện tính chất đặc trưng đó trong mô hình. Hiển nhiên rằng, càng nhiều biến đo được cho vào biểu thức (2.37) thì việc đánh giá tính tương hợp của mô hình với quá trình thực càng chính xác.

Mặt khác, hàm số ϕ có thể xem như là hàm của n tham số của mô hình λ_c và của p biến số V_k mô tả các điều kiện ngoài của quá trình. Về mặt toán học, bài toán hiệu chỉnh mô hình có thể phát biểu như là việc xác định tổ hợp n tham số mô hình sao cho ϕ có giá trị nhỏ nhất trong toàn bộ vùng biến thiên của V_k . Ở đây, có thể gán cho V_k những điều kiện ngoài ở nghĩa rộng hơn so với chấp nhận trong quá trình mô hình hoá (ví dụ, số đĩa trong tháp, đường kính tháp, các thông số cấu tạo của đĩa...)

Cực tiểu hoá hàm ϕ có thể thực hiện bằng một trong các phương pháp tìm cực trị của hàm số nhiều biến. Về nguyên tắc, việc chọn các tham số của mô hình có thể làm trên một tổ hợp nào đó của các biến V_k ($k = 1, \dots, n$). Và như thế, giá trị nhỏ nhất tìm được của ϕ sẽ là ước lượng về độ hiệu chỉnh của cấu trúc các phương trình chấp nhận được của mô hình toán học.

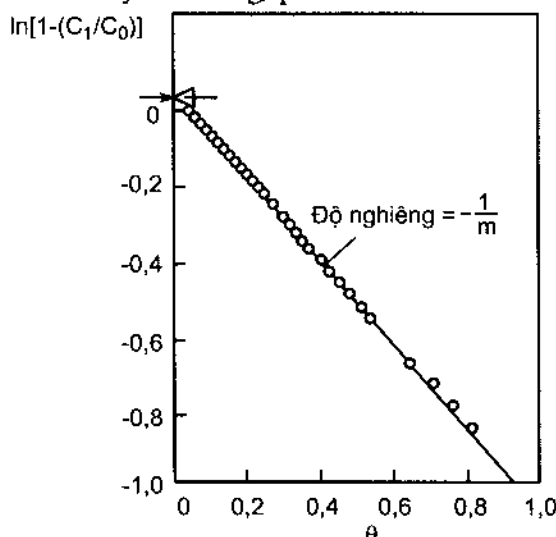
Lẽ dĩ nhiên, đối với một tổ hợp các điều kiện ngoài khác và ở sự lựa chọn như trên các tham số của mô hình, đại lượng ϕ có thể khác với giá trị cực tiểu tìm được. Nói chung, đối với một tổ hợp điều kiện ngoài khác thì có một tập hợp các tham số của mô hình khác ứng với giá trị cực tiểu của ϕ . Nếu sự khác nhau về giá trị của các tham số của mô hình xác định ở những tổ hợp điều kiện ngoài khác nhau từ vùng biến thiên khả dĩ của chúng thì mô hình toán học có thể sử dụng để giải thích các tính chất của đối tượng mô hình hoá ở vùng này. Nếu hàm số ϕ lại thay đổi không đáng kể giá trị trong giới hạn của vùng khảo sát của các điều kiện ngoài thì có thể làm phép ngoại suy mô hình ra ngoài vùng khảo sát đó.

Cũng cần phải nhấn mạnh rằng, thường việc hiệu chỉnh mô hình là một nhiệm vụ tính toán phức tạp và để thực hiện được cần phải sử dụng máy tính cá nhân.

Ví dụ 2.2. Đối với thiết bị có cánh khuấy quy mô thí nghiệm nhận được thời gian phân bố chất chỉ thị (ở dạng nhiều bậc) trên hình 2.12. Tìm mô hình thiết bị với những điều kiện số liệu dưới đây :

- Hệ nghiên cứu là dung dịch muối trong nước cất.
- Nhiều đầu vào dạng bậc của một dung dịch muối.

– Thiết bị hình trụ cao 330 mm và đường kính 100mm; đáy hình cầu; ống đầu vào của chất lỏng cho ngập cách đáy 150mm, ống đầu ra lại ở phía trên thiết bị; cánh khuấy nằm ở giữa cách đáy 125mm; tốc độ dòng 61,4 cm³/phút, tốc độ quay của cánh khuấy 156 vòng/ phút.



Hình 2.12. Đường phân bố chất chỉ thị trong thiết bị
cánh khuấy quy mô thí nghiệm

Giải: Ta sẽ chọn mô hình, sau đó là thiết lập tính tương hợp của nó.

Chọn mô hình: Trên cơ sở số liệu thí nghiệm trên hình 2.12 ta cho rằng, thiết bị nghiên cứu gần với mô hình trộn lí tưởng. Mức độ trộn thay đổi phụ thuộc vào số vòng quay và vị trí của cánh khuấy cũng như là tốc độ dòng. Có thể giả thiết rằng, một phần nhỏ của dòng sẽ tạo nên vùng đẩy lí tưởng và vùng chết. Do đó, ta chọn mô hình phối hợp bao gồm các vùng đẩy lí tưởng, trộn lí tưởng và vùng chết (xem hình 2.8a và bảng 2.2).

Xác định các tham số của mô hình :

Với việc có nhiều bậc sử dụng phương trình cho hàm $F(\theta)$ của mô hình lựa chọn ở điều kiện.

$$V_1 = V_4 = V_c; \quad V_2 = V_3 = 0; \quad b_2 = b_3 = d_1 = 0;$$

$$b_1 = b; \quad m + b + d_2 = 1$$

Sau logarit hoá ta được

$$\ln\left(1 - \frac{C_1}{C_0}\right) = -\frac{1}{m}(\theta - b)\eta \quad (\theta - d)$$

Theo đồ thị thực nghiệm (hình 2.12), ta tìm được:

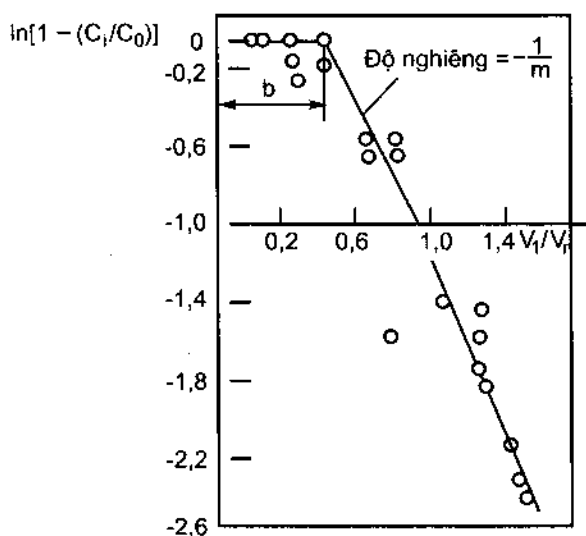
$$m = 0,952; b = 0,02; d = 0,03.$$

Ví dụ 2.3. Với chất chỉ thị dạng bậc đã nhận được số liệu thí nghiệm cho lớp tầng sôi của thiết bị trên hình 2.13. Hãy tìm mô hình của lớp tầng sôi ở các điều kiện sau:

– Hệ xử lí là hỗn hợp nitơ và không khí cho qua lớp xúc tác tầng sôi của phản ứng hidro hoá butan.

– Nhiều dạng bậc đầu vào là nitơ.

– Điều kiện làm việc của thiết bị: trộn khí ở nhiệt độ phòng; đường kính thiết bị dạng tháp là 135 mm; tỉ lệ chiều cao lớp tầng sôi và đường kính thiết bị bằng 5; kích thước trung bình của các hạt xúc tác bằng 310 μm .



Hình 2.13. Đường phân bố chất chỉ thị trong lớp tầng sôi của thiết bị thí nghiệm

Giải: Trước hết, ta chọn mô hình tương ứng.

Chọn mô hình: Đường thẳng nghiêng trên hình 2.13 chỉ ra sự có mặt của vùng trộn lí tưởng, đường thẳng song song với trục hoành chỉ ra sự có mặt của vùng đẩy lí tưởng và chảy qua. Lối vào và lối ra của khí nằm ở 2 đầu của tháp, vì thế có thể loại trừ sự tồn tại của vùng chảy qua. Ta sẽ chọn mô hình nối tiếp các vùng trộn lí tưởng và đẩy lí tưởng (xem hình 2.2 và hình 2.8f)

Xác định các tham số của mô hình :

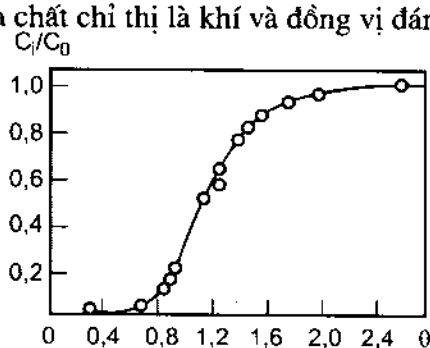
Với việc có nhiều bậc ta có:

$$\ln \left(1 - \frac{C_i}{C_0} \right) = -\frac{1}{m}(\theta - b)\eta(\theta - b)$$

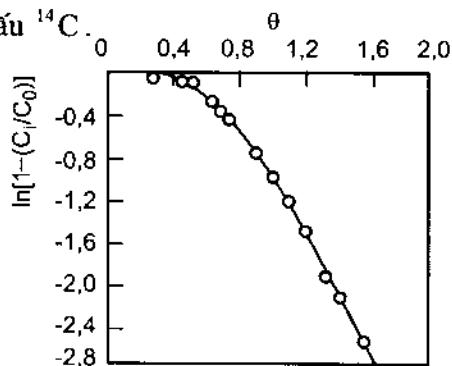
Theo đồ thị (hình 2.13), ta xác định được các tham số của mô hình:

$$m = 0,4; \quad b = 0,6$$

Ví dụ 2.4. Đối với lớp xúc tác tĩnh trong trường hợp chất chỉ thị (nhiều) dạng bậc đã nhận được những số liệu thí nghiệm biểu diễn trên hình 2.14. Hãy tìm mô hình của lớp xúc tác với các điều kiện sau: hệ nghiên cứu là hỗn hợp hidrocarbon trong lớp xúc tác tĩnh của phản ứng dễ sulfít hoá; nhiều bậc của chất chỉ thị là khí và đồng vị đánh dấu ^{14}C .



Hình 2.14. Hàm phân bố của chất chỉ thị theo thời gian lưu đối với lớp xúc tác của thiết bị



Hình 2.15. Sự phụ thuộc logarit của hàm phân bố chất chỉ thị trong lớp xúc tác tĩnh của thiết bị thí nghiệm

Giải: Ta sẽ lí giải việc chọn mô hình:

Chọn mô hình: Xây dựng đồ thị hình 2.15 trong hệ tọa độ $\ln[1 - (C_i / C_0)]$ và θ chỉ ra rằng không có sự phụ thuộc tuyến tính. Do đó, ở phần trên của đồ thị không được chọn mô hình trộn lí tưởng. Có lớp xúc tác tĩnh nên mô tả bằng mô hình khuếch tán hay mô hình dãy hộp. Ta chọn mô hình dãy hộp.

Xác định các tham số của mô hình : Trên cơ sở phương trình (2.10) $m = 11$.

2.4. MÔ HÌNH CHUYỂN KHỐI TRONG THIẾT BỊ PHẢN ỨNG SINH HOÁ

Các quá trình trao đổi chất trong thiết bị (aeroten, biophin...) ảnh hưởng trực tiếp đến sự sinh trưởng và phát triển của quần thể vi sinh vật, quyết định tốc độ vận tải các chất dinh dưỡng và năng lượng đến tế bào và đưa các sản phẩm trao đổi chất vào môi trường.

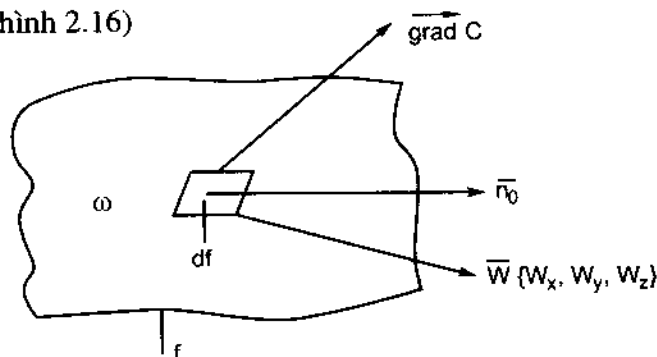
Nhu cầu của vi sinh vật về những nguyên tố dinh dưỡng riêng biệt được đánh giá bằng các hệ số tiêu hao có tính tới thành phần tế bào theo nguyên tố đó và các điều kiện phát triển của vi sinh vật theo phương trình tỉ lệ của quá trình sinh tổng hợp. Cụ thể là các thành phần khối lượng cơ bản của tế bào là cacbon và ôxi nằm ở dạng các hợp chất hữu cơ khác nhau, đặc trưng bởi BOD. Việc vận tải các chất hữu cơ đến bề mặt quần thể vi sinh vật nhờ khuếch tán phân tử và khuếch tán đối lưu có thể giới hạn tốc độ của các biến đổi sinh hoá phía trong tế bào.

2.4.1. Chuyển chất trong pha liên tục

Sự chuyển chất trong môi trường có được là do tồn tại gradient nồng độ và vectơ tốc độ. Định luật bảo toàn vật chất cho phép xác lập phương trình tính tới tác động đồng thời của các yếu tố đó.

Phương trình này được biết đến với tên gọi phương trình khuếch tán đối lưu.

Ta hãy xem cân bằng chất cho một phần tử bất kì của môi trường có thể tích ω và bề mặt f (hình 2.16)



Hình 2.16. Một phần tử của môi trường

1. Chuyển chất do khuếch tán phân tử (theo định luật Fick) qua diện tích df bằng

$$D_M \vec{\text{grad}} C \vec{n}_0 df \quad (2.38)$$

Trong đó:

D_M – hệ số khuếch tán phân tử; C – nồng độ chất;

$\vec{n}_0$ – vectơ đơn vị theo pháp tuyến của mặt phẳng..

Dòng chất hoàn toàn qua mặt phẳng f là

$$\iint_f (D_M \vec{\text{grad}} C \vec{n}_0) df \quad (2.39)$$

Sử dụng định lý Ôtrôgratxky – Gauss ta viết tích phân theo bề mặt f thành tích phân theo thể tích ω :

$$\iiint_{\omega} \text{div} (D_M \vec{\text{grad}} C) d\omega \quad (2.40)$$

2. Chuyển chất do vectơ tốc độ (đối lưu) qua bề mặt phần tử chất lỏng bằng:

$$\iint_f (C \vec{W} \vec{n}_0) df \quad (2.41)$$

Trong đó: $\vec{w}$ – vectơ tốc độ.

Tương tự, ta có dòng chất qua thể tích ω do đối lưu:

$$\iiint_{\omega} \operatorname{div}(\overline{C\vec{W}}) d\omega \quad (2.42)$$

3. Thay đổi nồng độ chất trong thể tích ω là

$$\iiint_{\omega} \frac{\partial C}{\partial t} d\omega \quad (2.43)$$

Phương trình cân bằng chất cho phần tử đã chọn có dạng

$$\iiint_{\omega} \left[\frac{\partial C}{\partial t} + \operatorname{div}(\overline{C\vec{W}}) - \operatorname{div}(\overline{D_M \operatorname{grad} C}) \right] d\omega = 0 \quad (2.44)$$

Xét thấy thể tích ω được chọn tùy ý, nên biểu thức trong dấu tích phân 3 lớp sẽ bằng 0

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \operatorname{div}(\overline{C\vec{W}}) - \operatorname{div}(\overline{D_M \operatorname{grad} C}) = 0 \quad (2.45)$$

Biểu thức vừa nhận được có tên gọi là phương trình khuếch tán đối lưu và nó tính tới chuyển chất do bản thân khuếch tán và đối lưu.

Sử dụng biểu thức cho đạo hàm chất (substance differential)

$$\frac{DC}{Dt} = \frac{\partial C}{\partial t} + (\vec{W}, \overline{\operatorname{grad} C}) \quad (2.46)$$

Phương trình (2.45) ta viết ở dạng:

$$\frac{DC}{Dt} + C \operatorname{div} \vec{W} - \operatorname{div}(\overline{D_M \operatorname{grad} C}) = 0 \quad (2.47)$$

Ghi chú: Để hiểu ý nghĩa vật lí của các đạo hàm, xin nhắc lại các khái niệm của đạo hàm:

– Đạo hàm toàn phần của nồng độ theo thời gian:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial x} \cdot \frac{dx}{dt} + \frac{\partial C}{\partial y} \cdot \frac{dy}{dt} + \frac{\partial C}{\partial z} \cdot \frac{dz}{dt}$$

Giả dụ, ta ngồi vào một chiếc xuồng máy và chuyển động trên sông khi thì theo dòng chảy, khi thì ngang dòng chảy và khi thì ngược dòng chảy. Nếu ta mô tả sự thay đổi của nồng độ cá theo thời gian thì số cá đó cũng phải phản ánh chuyển động của xuồng theo cả 3 hướng trên. Biểu thức đạo

hàm toàn phần chính là vậy, trong đó $\frac{dx}{dt}$, $\frac{dy}{dt}$ và $\frac{dz}{dt}$ là các thành phần tốc độ của xuống máy.

– Đạo hàm riêng $\frac{\partial C}{\partial t}$ là đạo hàm theo thời gian ở một điểm xác định của không gian.

– Đạo hàm chất $\frac{DC}{Dt}$ là đạo hàm được tính bởi người quan sát bơi theo dòng với tốc độ của dòng.

$$\frac{DC}{Dt} = \frac{\partial C}{\partial t} + W_x \frac{\partial C}{\partial x} + W_y \frac{\partial C}{\partial y} + W_z \frac{\partial C}{\partial z}$$

Trong đó W_x , W_y , W_z là các thành phần của tốc độ cục bộ của chất lỏng.

Dạng đầy đủ trên của phương trình mô tả trường nồng độ trong dòng chuyển động. Các số hạng của nó tính tới: tốc độ thay đổi nồng độ của chất C theo thời gian và trong không gian; dòng vật chất do sự có mặt của nguồn thủy động và ở đây tốc độ dòng $\vec{W}$ có 3 thành phần theo các tọa độ W_x , W_y , W_z ; dòng vật chất do gradient nồng độ tức là do khuếch tán phân tử.

Phương trình khuếch tán đối lưu ở dạng (2.47) không tính đến thay đổi nồng độ chất trong môi trường liên quan đến sự sử dụng hoặc tạo nên nó do các phản ứng. Trong thiết bị phản ứng sinh hoá, những cấu tử trong môi trường (các chất dinh dưỡng) sẽ được sử dụng bởi vi sinh vật và trong môi trường sẽ tạo nên các sản phẩm trao đổi chất tương ứng với các sơ đồ theo phương trình tỉ lượng của quá trình sinh tổng hợp. Tốc độ sử dụng các cấu tử đó phụ thuộc vào nồng độ của chúng trong môi trường và được quyết định bởi động học của quá trình sinh trưởng của vi sinh vật. Nếu xét tới điều đó thì phương trình (2.47) có thể biểu diễn ở dạng:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \text{div} \left(D_M \vec{\text{grad}} C \right) - \text{div} \left(C \vec{W} \right) - R(C) \quad (2.48)$$

Trong đó: $R(C)$ là tốc độ sử dụng chất trong quá trình sinh tổng hợp.

Đối với những trường hợp riêng khác nhau, phương trình (2.48) được đơn giản hoá, nhờ vậy cho phép giải một vài bài toán thực tiễn. Ví dụ, đối với điều kiện $\text{div } \vec{W} = 0$ rút ra được từ phương trình liên tục của dòng ở giá trị $\rho = \text{const}$ ta có

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \text{div} \left((D_M \vec{\text{grad}} C) - (\vec{W} \text{grad} C) \right) - R(C) \quad (2.49)$$

Phần lớn các quá trình khuếch tán xảy ra trong thiết bị phản ứng sinh hoá có thể xem như là các quá trình ổn định. Trong phương trình khuếch tán không ổn định, số hạng tính tới sự thay đổi nồng độ chất theo thời gian tỉ lệ với đại lượng $e^{-D_M t/d_{tb}^2}$ (d_{tb} – đường kính của tế bào)

Sử dụng các giá trị của hệ số khuếch tán cho ôxi và hidrocarbon trong nước, ta đánh giá thời gian chuyển đến trạng thái gần ổn định:

– Đối với ôxi và tế bào nấm men

$$D_M/d_{tb}^2 \approx \frac{1,85 \cdot 10^{-9}}{(6 \cdot 10^{-6})^2} = 50 s^{-1}$$

– Đối với hidrocarbon và tế bào nấm men

$$D_M/d_{tb}^2 \approx \frac{7,5 \cdot 10^{-9}}{(6 \cdot 10^{-6})^2} = 20 s^{-1}$$

Như vậy, giá trị của số hạng thời gian so với giá trị ban đầu thay đổi e lần trong trường hợp thứ nhất sau 0,02s, còn trong trường hợp thứ hai sau 0,05s. Thế thì sau thời gian một vài giây trạng thái của hệ sẽ gần với ổn định.

Đối với trạng thái ổn định phương trình (2.49) sẽ có dạng:

$$\operatorname{div}(\overrightarrow{D_M \operatorname{grad} C}) - (\overrightarrow{W \operatorname{grad} C}) - R(C) = 0 \quad (2.50)$$

Giá trị vectơ tốc độ của phân tử chất lỏng trong dòng để giải bài toán khuếch tán đối lưu được giả thiết rằng đã biết. Nhưng việc tính toán và xác định các giá trị cục bộ của các vận tốc dòng trong hoàn cảnh thủy động phức tạp của thiết bị là bài toán rất khó.

Đồng thời, việc phân tích các quá trình trong thiết bị cho phép ta chấp nhận giả thiết sau đây. Do vi sinh vật có kích thước trung bình từ 2 đến 10 μm và khối lượng riêng xấp xỉ của nước nên các tế bào sẽ bị cuốn theo dòng với tốc độ của dòng. Trong trường hợp này có thể xem xét khuếch tán chất đến tế bào ở điều kiện môi trường không chuyển động ($\overrightarrow{W} = 0$). Khi đó, phương trình (2.50) sẽ có dạng:

$$\operatorname{div}(\overrightarrow{D_M \operatorname{grad} C}) - R(C) = 0 \quad (2.51)$$

Coi tế bào có hình cầu ta viết phương trình ở dạng:

$$D_M \frac{d^2 C}{dr^2} + \frac{2D_M dC}{r dr} - R(C) = 0 \quad (2.52)$$

Phương trình này cho phép xem xét một bài toán thực tiễn rất lí thú liên quan đến khuếch tán của các chất dinh dưỡng từ môi trường vào tế bào.

Những quá trình chuyển chất bằng khuếch tán đối lưu kể trên không tính tới trường hợp quan trọng trong thực tế là chuyển chất bằng khuếch tán xoáy hay khuếch tán rối. Chuyển chất trong trường hợp này được thực hiện bởi những hạt (phần tử) chất lỏng do các xung rối ở trong dòng. Lượng chất được chuyển đi xác định từ hệ thức :

$$M = -D_L \frac{dC}{dz} \quad (2.53)$$

Trong đó: D_L – hệ số khuếch tán rối, giá trị của nó phụ thuộc vào hoàn cảnh thủy động trong thiết bị.

Với việc tăng cường độ khuấy trộn và việc chuyển sang chế độ rối phát triển thì lượng chất được chuyển bằng khuếch tán xoáy (khuếch tán rối) sẽ tăng lên đáng kể.

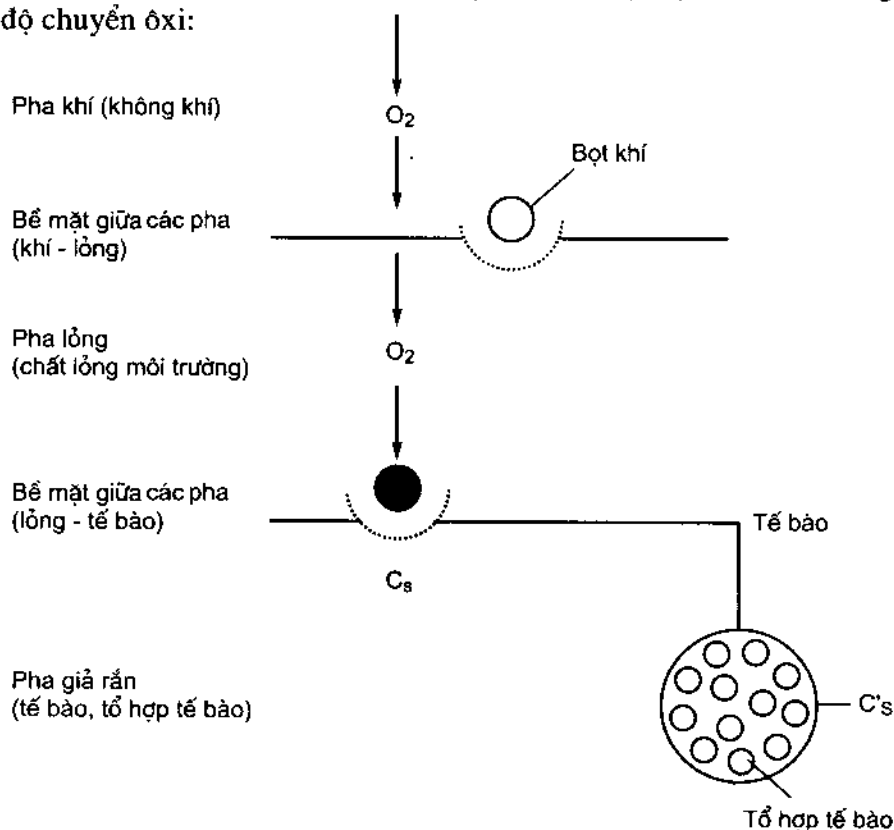
Người ta phân chia ra bốn chế độ cơ bản của sự thay đổi hệ số khuếch tán tổng ($D_M + D_L$) tùy thuộc vào chuẩn số thủy động Re đặc trưng cho tỉ số giữa lực ma sát và lực nhớt phân tử. Ở những giá trị nhỏ của Re , khi lực nhớt phân tử trong dòng chiếm ưu thế thì chuyển chất phân tử là cơ bản (chế độ chuyển phân tử). Với việc tăng Re giá trị của hệ số khuếch tán rối trở nên gần bằng hệ số khuếch tán phân tử. Chuyển chất ở đây được thực hiện bởi các phần tử và cả các hạt chất lỏng (chế độ trung gian). Việc tăng tiếp theo của dòng rối dẫn đến $D_L \gg D_M$ khi mà chuyển do dòng rối trở nên là cơ bản thì đó là chế độ trao đổi rối. Ở chế độ rối phát triển, đại lượng D_L đạt giá trị cực đại của mình. Ở những giá trị lớn của D_L có sự chuyển chất dọc theo gradient nồng độ trong thiết bị cũng như là theo cả hướng ngược lại. Điều đó làm giảm động lực của quá trình chuyển chất và việc tăng tính rối không phải bao giờ cũng làm cho tăng tốc độ truyền khối.

2.4.2. Vận tải chất nền khí vào môi trường

Cùng với vấn đề chuyển những chất nền tan tốt trong pha nước thì vấn đề vận tải những chất nền ít tan trong nước và một loại vấn đề quan trọng trong thực tiễn liên quan đến vận tải chất nền khí vào môi trường. Trước hết, đó là ôxi. Vai trò của ôxi như là nguồn năng lượng và là một chất nền quan trọng đến mức (đối với các quá trình hiếu khí) sự ảnh hưởng của các điều kiện sục khí và chuyển khối ôxi quyết định quá trình sinh tổng hợp.

Đối với quá trình nuôi cấy vi sinh vật hiếu khí thì ôxi phải được lấy từ chất lỏng tức là ở dạng ôxi hoà tan.

Sơ đồ dưới đây (hình 2.17) cho thấy có một loạt vận tải ảnh hưởng đến tốc độ chuyển ôxi:



Hình 2.17. Sơ đồ vận tải chất nền khí đến tế bào

Những trở lực ảnh hưởng đến tốc độ chuyển ôxi: trở lực của màng khí lớp biên (trở lực giữa 2 pha trên ranh giới phân cách pha khí – lỏng); trở lực của màng lỏng; trở lực vận tải ôxi trong chất lỏng; trở lực của màng lỏng bao quanh tế bào hay tổ hợp tế bào; trở lực bên trong tế bào; trở lực biểu thị bằng tác động tương hỗ của ôxi với hệ enzym của tế bào.

Sơ đồ xem xét trên là một mô hình vật lí đơn giản của quá trình thực truyền khối chất nền khí vào tế bào. Tuy mô hình đơn giản nhưng nó cho phép tách ra được những bước chuyển quyết định tốc độ của quá trình truyền khối. Đối với ôxi, do độ hoà tan của nó trong nước và dung dịch nước thấp, nên trở lực đầu tiên là trở lực trong pha lỏng. Độ hoà tan lớn nhất của ôxi trong nước ở áp suất riêng phần của nó $0,2 \cdot 10^{-3} \text{Pa}$ ($0,21 \text{ kg/cm}^2$) đối với vùng nhiệt độ ($30 - 35^\circ\text{C}$) chỉ khoảng $7,5 \text{ mg/l}$.

Cần nhấn mạnh cả việc giảm độ hoà tan của ôxi trong môi trường thực so với nước do sự có mặt của những muối khác nhau cần thiết cho quá trình phát triển của vi sinh vật.

2.4.2.1. Các mô hình chuyển khối

Đối với hệ xem xét khí khó tan (ôxi) – pha lỏng (môi trường), quá trình truyền khối được xác định bằng việc cấp khối ôxi trong chất lỏng và

$$k_L \approx \beta_t \quad (2.54)$$

Quá trình chuyển chất từ ranh giới phân cách từ pha này sang pha khác (khí → lỏng) được mô tả bằng mô hình khuếch tán đối lưu:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - W \frac{\partial C}{\partial y} \quad (2.55)$$

Trong đó:

y – toạ độ song song với bề mặt phân cách pha;

z – toạ độ theo pháp tuyến với bề mặt phân cách pha;

W – tốc độ dòng;

D_L – hệ số khuếch tán.

Đối với điều kiện dừng (ổn định) và môi trường không chuyển động ($W = 0$), ta có :

$$D_L \frac{d^2 C}{dz^2} = 0 \quad (2.56)$$

Phương trình mô tả khuếch tán trong thể tích pha lỏng trên cơ sở lí thuyết màng giả thiết rằng, trở lực chủ yếu cho cấp khối tập trung ở lớp mỏng chất lỏng nằm sát bề mặt phân cách pha và quá trình là quá trình ổn định ($\partial C / \partial t = 0$).

Khi dòng chuyển động với tốc độ không đổi thì phương trình (2.55) sẽ có dạng:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (2.57)$$

Phương trình (2.57) mô tả khuếch tán của cấu tử trong pha lỏng (hay khí) từ khái niệm lí thuyết thấm và tạo mới bề mặt tiếp xúc pha. Theo lí thuyết thấm, việc tạo mới bề mặt tiếp xúc pha xảy ra sau những khoảng thời gian nhất định bằng nhau, còn theo lí thuyết tạo mới bề mặt thì thời gian tiếp xúc lại đặc trưng bởi một đại lượng ngẫu nhiên.

Mô hình lớp biên khuếch tán cho rằng, tồn tại một cấu trúc rối phức tạp phía trong một lớp con có tính nhớt. Cách xa bề mặt phân cách pha nồng độ của cấu tử không đổi, còn sát gần bề mặt trong lớp biên có tính nhớt xảy ra việc làm tắt dần các xung rối và ở bề mặt phân cách pha thì hệ số khuếch tán rối bằng không. Phương trình của mô hình có dạng:

$$D_L \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} = W \frac{\partial C}{\partial y} \quad (2.58)$$

tức là khác với mô hình màng, số hạng khuếch tán của phương trình (2.55) không bằng 0.

Hệ thức giữa độ dày lớp khuếch tán δ và lớp biên nhớt δ' được mô tả bằng biểu thức:

$$\delta = \delta' (Pr^{-1/n}) \quad (2.59)$$

Trong đó: Pr – chuẩn số khuếch tán Prandtl;

n – bậc tắt dần, theo số liệu thực nghiệm của một công trình thì đối với hệ khí – lỏng $n \approx 2$.

Hệ số cấp khối theo mô hình này được xác định bằng phương trình:

$$\beta_t = \frac{D_M}{\delta} (Pr)^{1/n} \quad (2.60)$$

Phương trình chia hệ số cấp khối theo mô hình màng có dạng:

$$\beta_t = \frac{D_M}{\delta} \quad (2.61)$$

Trong đó: δ chiều dày lớp màng lỏng.

Giá trị của δ được xác định bởi các điều kiện thủy động và giảm dần với việc tăng tính rối của môi trường. Mô hình màng không tính tới ảnh hưởng của độ rối giữa các pha đến chuyển chất.

Đối với lí thuyết thấm, hệ số cấp khối được xác định bằng phương trình:

$$\beta_t = 2 \sqrt{\frac{D_M}{\pi \cdot \theta}} \quad (2.62)$$

Trong đó: θ là thời gian tiếp xúc.

Theo mô hình này, người ta giả thiết rằng, sau thời gian tiếp xúc θ khí trong phân tử bề mặt sẽ được hoà tan do khuếch tán không ổn định (động).

Giả thiết về phân bố thời gian tiếp xúc tương ứng với hệ thức $Le^{-1\theta}$ đã cho phép nhận được biểu thức của hệ số cấp khối ở dạng:

$$\beta_\ell = \sqrt{D_M L} \quad (2.63)$$

Trong đó, L là tốc độ tạo mới bề mặt.

Còn một loạt mô hình cấp khối được nêu ra ở các tài liệu, nhưng phải nói rằng, việc sử dụng trực tiếp các mô hình này để tính quá trình hấp thụ là không thể được do mỗi mô hình đó còn gồm cả những thông số không xác định trực tiếp được từ thực nghiệm. Trong những trường hợp ta vừa xem xét thì đối với mô hình màng là độ dày màng chất lỏng, đối với mô hình thấm là thời gian tiếp xúc pha, đối với mô hình tạo mới là tốc độ tạo mới bề mặt, đối với mô hình lớp biên khuếch tán là độ tắt dần của tính rối.

Cũng đáng kể là ảnh hưởng của tính rối giữa các pha đến hệ số cấp khối của hệ khí – lỏng. Hệ số cấp khối trong chất lỏng ở trường hợp có tính rối giữa các pha thể hiện bởi các lực ma sát giữa khí và lỏng, được xác định bởi phương trình:

$$\beta_\ell = \frac{D_\ell}{d_{td}} A \cdot Re^m \cdot Pe^n (1 + f_{k-\ell}) \quad (2.64)$$

Trong đó:

d_{td} – đường kính tương đương của phân tử thiết bị;

$f_{k-\ell}$ – yếu tố trạng thái thủy động (k – khí; ℓ – lỏng).

Đại lượng $f_{k-\ell}$ được định nghĩa là tỉ số giữa năng lượng tiêu hao do tác động tương hỗ của khí và lỏng và năng lượng của dòng khí trong thiết bị.

Ví dụ, đối với thiết bị có cấp năng lượng thì yếu tố trạng thái thủy động được xác định bằng phương trình:

$$f_{k-\ell} = \frac{\Delta P_{k-\ell} + E - \Delta P_k}{\Delta P_k} \quad (2.65)$$

Trong đó:

E – đại lượng tính tới năng lượng bổ sung cho pha lỏng;

$\Delta P_{k-\ell}$, ΔP_k là sự giảm áp trong hệ khí – lỏng và cho dòng khí.

Đối với quá trình lên men của vi sinh vật hiếu khí, tốc độ chuyển ôxi từ pha khí vào pha lỏng được xác định bởi phương trình truyền khối đã biết:

$$q'_{O_2} = V k_L a (C^* - C_L) \quad (2.66)$$

Trong đó: $k_L \approx \beta_L$;

a – bề mặt tiếp xúc pha riêng ;

C^* , C_L – các nồng độ cân bằng và làm việc của ôxi.

Trong trường hợp chuyển vào pha lỏng, ôxi hoà tan tham gia vào phản ứng sinh hoá. Quá trình sinh tổng hợp sẽ làm thay đổi tốc độ chuyển ôxi so với hấp thụ vật lí ôxi do phản ứng sinh hoá.

Phương trình khuếch tán khi xảy ra phản ứng sinh hoá (không có số hạng đối lưu) có dạng :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_M \frac{\partial^2 C_L}{\partial z^2} - q_{O_2} \quad (2.67)$$

Trong đó: q_{O_2} – tốc độ tiêu thụ ôxi trong phản ứng sinh hoá.

Như một số nghiên cứu chỉ ra rằng, sự sai khác trong tính toán theo những mô hình trên không vượt quá 10–12 %. Điều đó cho phép ta trong các tính toán thực tế có thể sử dụng bất kì dạng nào, cụ thể là dùng phương trình của mô hình màng:

$$D_M \frac{d^2 C_L}{dz^2} = q_{O_2} \quad (2.68)$$

Để xác lập vùng xảy ra quá trình hấp thụ ôxi (vùng khuếch tán hay vùng động học) hợp lí hơn cả là so sánh các đại lượng quy ước: thời gian khuếch tán t_D và thời gian phản ứng t_r .

Việc đánh giá đại lượng t_D chỉ ra rằng, khoảng giá trị thực tế của thời gian khuếch tán khi sục khí vào lỏng (đường kính bọt khí 0,2 – 0,6 cm, tốc độ chuyển động 15 – 35 cm/s) là

$$5.10^{-3} < t_D < 4.10^{-2} [s] \quad (2.69)$$

Từ phương trình $t_D = D/k_L^2$, ta có giá trị của đại lượng k_L nằm trong khoảng

$$1,5.10^{-2} < k_L < 4.10^{-2} [cm/s] \quad (2.70)$$

Đối với quá trình chuyển ôxi vào chất lỏng môi trường nuôi cấy, ta có:

$D_{O_2} = 1,85 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, còn $k_L = (2 \div 4) \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$ với chế độ thực của quá trình trộn môi trường. Khi đó, khoảng giá trị thực của thời gian khuếch tán bằng

$$1,1 \cdot 10^{-2} < t_D < 4,5 \cdot 10^{-2} \text{ [s]} \quad (2.71)$$

Ta sẽ đánh giá thời gian phản ứng của quá trình. Trong trường hợp tổng quát, đại lượng t_r xác định bởi phương trình :

$$t_r = \frac{C' - C}{q_{O_2}} \quad (2.72)$$

Trong đó: C' – nồng độ cấu tử bị hấp thụ trên bề mặt phân cách pha.

Đại lượng q_{O_2} xác định bởi hệ phương trình thực của quá trình lên men hiếu khí.

$$\begin{cases} q_{O_2} = -\frac{dC}{dt} = \alpha_{O_2} \frac{dx}{dt} \\ \frac{dx}{dt} = \mu x \end{cases} \quad (2.73)$$

Trong trường hợp riêng của nuôi cấy nấm men trên chất nền hidrocarbon: $\mu x = 2 \div 5 \text{ kg/m}^3 \cdot \text{h}$, $\alpha_{O_2} = 2 \text{ kg O}_2/\text{kg}$; $\Delta C = 5 \cdot 10^{-4} \div 5,5 \cdot 10^{-3} \text{ kg O}_2/\text{m}^3$

$$\text{thì} \quad 0,2 < t_r < 5 \text{ [s]} \quad (2.74)$$

Như vậy, thực tế ở chế độ lên men, thời gian t_D nhỏ hơn t_r một hoặc 2 bậc.

Vậy thì có thể giả thiết rằng, sự tiêu thụ ôxi xảy ra chủ yếu không phải ở màng (thuyết màng) hay ở lớp biên khuếch tán mà là ở trong khối chất lỏng môi trường. Và ở đây sẽ thực hiện chế độ khuếch tán khi phản ứng sinh hoá đang xảy ra có ảnh hưởng đến nồng độ ôxi hoà tan hoạt động.

Khi đánh giá ảnh hưởng của các đặc trưng hoá lí của môi trường đến hệ số truyền khối ôxi cần lưu ý trước hết đến tác động của sức căng bề mặt của môi trường. Nó thay đổi trong quá trình lên men gián đoạn và cả khi có mặt của các chất hoạt động (HĐBM). Như đã nói ở trên, đại lượng hệ số truyền khối phụ thuộc vào tính rối giữa các pha. Việc tăng sức căng bề mặt làm giảm xung rối trên ranh giới pha khí – lỏng. Ví dụ, theo số liệu thực nghiệm hệ số cấp khối $k_L \sim \sigma^{-0,33}$.

Ảnh hưởng của các chất HĐBM đến giá trị của hệ số truyền khối ôxi $k_L a$ không giống nhau. Phần lớn các chất HĐBM làm giảm $k_L a$ do liên quan đến việc giảm tính rối tự do. Trong khi đó việc thêm chất HĐBM làm tăng bề mặt tiếp xúc khí – lỏng do việc giảm đường kính bền vững của bọt khí và tăng lượng khí của lớp biên. Trong những điều kiện này tác động tổng của chất HĐBM đến đại lượng $k_L a$ có thể là nghịch (âm) và thuận (dương). Do đó phải kiểm tra bằng thực nghiệm hiệu quả của một chất HĐBM cụ thể.

2.4.2.2. Truyền khối trong quá trình sinh tổng hợp

Phương trình mô tả sự thay đổi nồng độ ôxi trong chất lỏng có sự sử dụng ôxi bởi vi sinh vật có dạng:

$$\frac{dC_L}{dt} = k_L a [C^*(t) - C_L(t)] - q_{O_2} \quad (2.75)$$

Trong đó : q_{O_2} đặc trưng tốc độ sử dụng ôxi bởi vi sinh vật và liên quan trực tiếp đến tốc độ sinh trưởng của tế bào:

$$q_{O_2} = \alpha_{O_2} \frac{dx}{dt} = \alpha_{O_2} \mu x \quad (2.76)$$

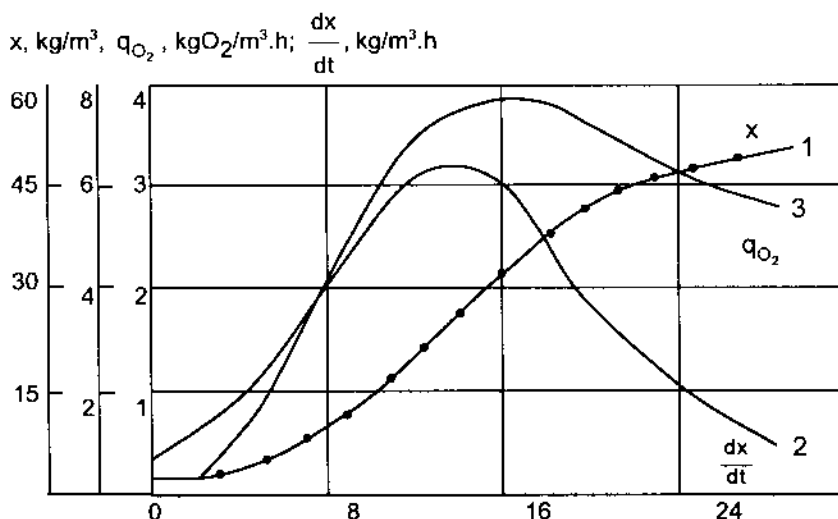
Sử dụng sự phụ thuộc của hệ số tỉ lượng (tiêu hao) α_{O_2} vào tốc độ sinh trưởng $\alpha_{O_2} = a + b/\mu$ ta có phương trình để tính tốc độ sử dụng ôxi bởi vi sinh vật trong quá trình tăng trưởng của chúng như sau:

$$q_{O_2} = a \frac{dx}{dt} + bx \quad (2.77)$$

Số hạng đầu tiên xác định lượng ôxi cần thiết mà tế bào sử dụng trong quá trình sinh trưởng $\left(\frac{dx}{dt} \neq 0 \right)$. Số hạng thứ hai đặc trưng cho sự sử dụng ôxi của quần thể vi sinh vật có nồng độ x ở thời điểm xem xét và xác định sự tiêu hao ôxi để duy trì hoạt động sống của tế bào. Các hệ số a và b có thể xác định bằng thực nghiệm.

Trên hình 2.18 là đường cong thay đổi của q_{O_2} trong trường hợp nuôi cấy nấm men gián đoạn xây dựng trên cơ sở sử dụng phương trình động học :

$$\frac{dx}{dt} = \epsilon x - \beta x^2 \quad (2.78)$$



Hình 2.18. Sự phụ thuộc của nồng độ vi sinh vật, tốc độ tăng trưởng $\frac{dx}{dt}$ và tốc độ sử dụng ôxi q_{O_2} vào thời gian trong quá trình nuôi cấy gián đoạn.

Nhìn vào hình 2.18 ta thấy, tốc độ sử dụng ôxi thay đổi đáng kể trong quá trình gián đoạn. Ở giai đoạn đầu tiên ta có:

$$q_{O_2} < (q_{O_2})_{\max} \quad (2.78)$$

bởi vì $x < x_{\max}$. Sau đó với việc tăng nồng độ sinh khối thì :

$$q_{O_2} \approx (q_{O_2})_{\max} \quad (2.79)$$

và ở giai đoạn cuối thì :

$$q_{O_2} < (q_{O_2})_{\max} \quad (2.80)$$

bởi vì $\frac{dx}{dt} < \left(\frac{dx}{dt}\right)_{\max}$

Như vậy, để thực hiện quá trình gián đoạn mà không bị ràng buộc bởi tốc độ chuyển ôxi thì cần có điều kiện :

$$k_L a [C^* - C_L] = \left\{ a \frac{dx}{dt} + bx \right\}_{\max} \quad (2.81)$$

Ở ví dụ trên, tốc độ chuyển ôxi phải là khoảng 8 kg/m³.h.

Đối với quá trình liên tục một giai đoạn thì hệ phương trình tính tới hấp thụ và sử dụng ôxi có dạng:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \mu(s)x - Dx \\ \frac{dC_L}{dt} = k_L a(C^* - C_L) - \alpha_{O_2} \mu(s)x - Dx \\ \frac{dS}{dt} = -\alpha_s \frac{dx}{dt} \end{cases} \quad (2.82)$$

Trong đó: D – là tốc độ pha loãng (h^{-1});

α_s – hệ số tiêu hao chất nền (kgS/kg).

Trong trường hợp quá trình gián đoạn tích lũy sinh khối khi

$$x = x_0 e^{\mu t} \quad (2.83)$$

Ta có phương trình tốc độ thay đổi nồng độ ôxi hoà tan trong môi trường :

$$\frac{dC_L}{dt} = k_L a(C^* - C_L) - \alpha_{O_2} \mu x_0 e^{\mu t} \quad (2.84)$$

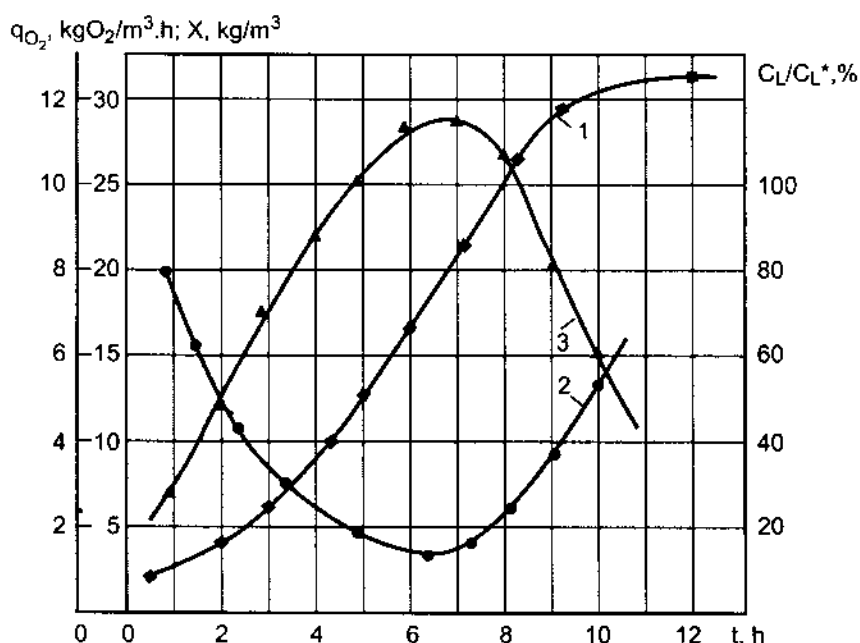
Số hạng đầu tiên của phương trình (2.84) tính tới ảnh hưởng của tốc độ truyền khối ôxi từ pha khí vào pha lỏng, còn số hạng thứ hai phản ánh cường độ sử dụng ôxi bởi vi sinh vật. Giải phương trình trên cho phép nhận được quan hệ của nồng độ ôxi hoà tan ở thời điểm xem xét.

$$C_L = C^* - \frac{\alpha_{O_2} \mu x_0 e^{\mu t}}{k_L a + \mu} + (C_0 - C^*) e^{-k_L a t} + \frac{\alpha_{O_2} \mu x_0 e^{-k_L a t}}{k_L a + \mu} \quad (2.85)$$

Biến đổi phương trình trên với giả thiết $C_0 = 0$ ta được:

$$C_L = C^* (1 - e^{-k_L a t}) - \frac{\alpha_{O_2} \mu x_0 e^{\mu t}}{k_L a + \mu} (1 - e^{-(k_L a + \mu)t}) \quad (2.86)$$

Nhìn vào phương trình trên ta thấy, với việc tăng $k_L a$ nồng độ làm việc của ôxi cũng tăng lên, còn việc tăng tốc độ tăng trưởng của tế bào hay nồng độ của vi sinh vật lại làm giảm ôxi hoà tan. Cần lưu ý rằng, đại lượng μ thay đổi trong quá trình gián đoạn và khi đạt giá trị μ_m ở pha hàm mũ thì việc sử dụng ôxi đạt mức cao nhất, khi đó nồng độ ôxi hoà tan trong môi trường là thấp nhất. Trên hình 2.19 chỉ rõ sự thay đổi nồng độ tế bào ôxi hoà tan cho quá trình gián đoạn theo sinh khối nấm men.



Hình 2.19. Sự thay đổi nồng độ ôxi hoà tan trong môi trường của quá trình gián đoạn

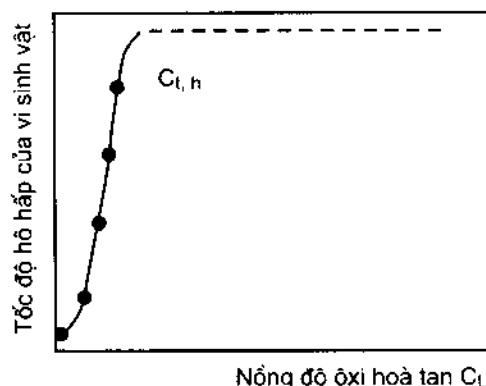
1. Nồng độ sinh khối X ; 2. Nồng độ ôxi hoà tan C_L/C^* ;

3. Tốc độ chuyển ôxi vào môi trường $q_{O_2} = k_L a(C^* - C_L)$

Thực tế trong nhiều trường hợp do $k_L a \gg \mu$ nên quá trình sử dụng ôxi chậm hơn rất nhiều so với quá trình chuyển khối và như vậy quá trình không bị giới hạn bởi nồng độ ôxi hoà tan trong môi trường.

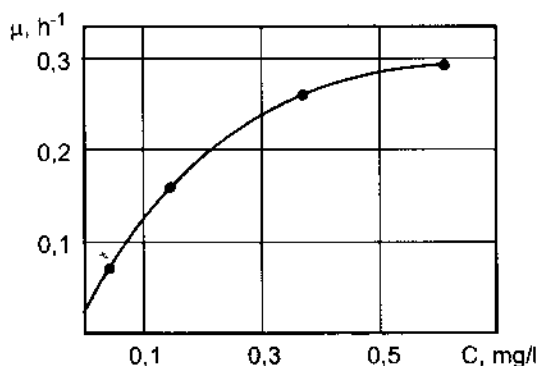
Tuy nhiên, khi nghiên cứu quá trình hiếu khí, người ta vẫn sử dụng rộng rãi khái niệm nồng độ tối hạn của ôxi hoà tan $C_{L,h}$. Đó là nồng độ ôxi hoà tan thấp nhất mà ở những giá trị nhỏ hơn nó thì sự tăng trưởng của vi sinh vật bị giới hạn bởi ôxi. Đồng thời việc tăng nồng độ ôxi trong môi trường cao hơn nồng độ tối hạn không gây ảnh hưởng gì đến các chỉ tiêu của quá trình tăng trưởng của vi sinh vật. Đã có những nghiên cứu xác định nồng độ tối hạn cho một loạt chủng vi sinh vật. Những giá trị này thường nhỏ chỉ khoảng 2 đến 10% nồng độ bão hoà ôxi trong môi trường. Một đường cong điển hình về ảnh hưởng của nồng độ ôxi đến tốc độ sử dụng ôxi trên hình 2.20.

Hình 2.20. Ảnh hưởng của nồng độ ôxi hoà tan đến tốc độ hô hấp của vi sinh vật



Từ giá trị tới hạn $C_{L,h}$, người ta chọn nồng độ làm việc C_L theo điều kiện $C_L \geq C_{L,h}$. Đồng thời theo phương trình (2.85) thì đối với mức độ sục khí và khuấy trộn nào đó, C_L có thể thay đổi đáng kể ở những chế độ nuôi cấy khác nhau do liên quan đến nhu cầu của tế bào (quần thể vi sinh vật) về ôxi ở thời điểm đó.

Ảnh hưởng của những nồng độ ôxi hoà tan thấp đến tốc độ tăng trưởng riêng của vi sinh vật được chỉ ra trên hình 2.21:



Hình 2.21. Ảnh hưởng của nồng độ ôxi hoà tan đến tốc độ tăng trưởng riêng của vi sinh vật

Trong những mô hình đã xem xét trước đây không tính tới ảnh hưởng của nồng độ ôxi hoà tan đến tốc độ tăng trưởng của tế bào. Nhưng như vừa chỉ ra, khi giảm nồng độ ôxi tới thấp hơn nồng độ tới hạn thì hô hấp của vi sinh vật giảm và tốc độ tăng trưởng của nó cũng giảm (hình 2.20 và 2.21). Trong những trường hợp này, đại lượng tốc độ tăng trưởng riêng của vi sinh vật không phải quyết định bởi nồng độ chất hữu cơ (BOD) mà là nồng độ ôxi. Sử dụng sự phụ thuộc hypecbol quan sát được trong đa số các trường hợp $\mu = f(C_L)$ mô tả bằng phương trình Monod đã biết:

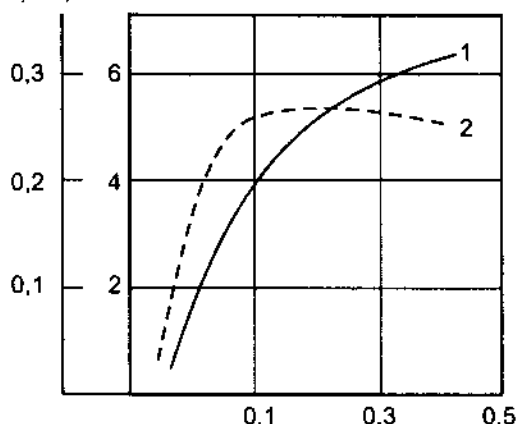
$$\mu = \mu_m^{O_2} \frac{C_L}{K_{O_2} + C_L} \quad (2.87)$$

ta sẽ nhận được hệ phương trình của mô hình cho hệ liên tục

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \mu_{O_2} \frac{C_L}{K_{O_2} + C_L} x - Dx \\ \frac{dC_L}{dt} = k_L a(C^* - C_L) - \alpha_{O_2} \mu_{O_2} \frac{C_L}{K_{O_2} + C_L} x - DC_L \\ \frac{dS}{dt} = -\alpha_s \frac{dx}{dt} \end{cases} \quad (2.88)$$

Hệ phương trình này làm chính xác thêm mô hình của quá trình ở vùng nồng độ thấp của ôxi hoà tan có tính tới sự giảm μ theo (2.87). Như trên hình 2.22 thì tốc độ tăng trưởng riêng và năng suất của quá trình giảm đáng kể ở những nồng độ thấp của ôxi hoà tan tuy rằng động lực của quá trình ($C^* - C_L$) tăng.

$D, h^{-1}; G = Dx$



Hình 2.22. Ảnh hưởng của những nồng độ DO thấp đến tốc độ tăng trưởng (1) và năng suất (2) của quá trình

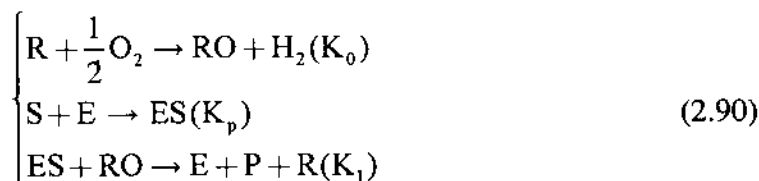
Từ những điều trình bày ở trên có thể kết luận rằng, nồng độ ôxi trong pha lỏng C_L thực tế là một đại lượng quan trọng mà qua đó có thể đánh giá các thông số công nghệ của quá trình trong thiết bị phản ứng sinh hoá.

Sự phân tích đã tiến hành ở trên cũng chỉ ra rằng, do độ hoà tan thấp của ôxi trong pha lỏng mà giai đoạn hạn chế tốc độ truyền khối là giai đoạn chuyển ôxi từ pha khí vào pha lỏng. Song thực tế trong nhiều trường hợp, tốc độ chuyển ôxi có thể bị hạn chế bởi việc chuyển ôxi từ pha lỏng vào tế bào. Trong trường hợp này, tốc độ chuyển ôxi được xác định bằng phương trình

$$q_{O_2} = V k_{L-s} 4\pi r^2 \left(\frac{n_{tb}}{V} \right) [C_L(t) - C_s(t)] \quad (2.89)$$

Ảnh hưởng của ôxi đến tăng trưởng của tế bào có thể tính tới bằng cách xem xét sự tham gia của O_2 vào các quá trình ôxi hoá khử của tế bào. Nếu chấp nhận rằng, khâu giới hạn trong chuỗi các phản ứng men là ôxi hoá nhân tế bào (cytochrom) mà sau đó cho một lượng ATF (adenozin triphotphat)

tương đương cần để hoạt hoá phức enzym chất nền thì sơ đồ đơn giản của các phản ứng có dạng:



Tốc độ tạo thành sản phẩm P (trong trường hợp của chúng ta là sinh khối – bùn hoạt tính chẳng hạn) được xác định bằng quan hệ

$$\mu = \frac{K_0 K_1 K_p [R]_0 [S] [E]_0 [O_2]}{K_0 [O_2] + K_0 K_p [O_2] [S] + K_1 [E]_0 [S]} \quad (2.91)$$

Nhóm các hằng số và hệ số ta được :

$$\mu = \mu_0 \frac{[S] [O_2]}{K_w [S] + [S] [O_2] + K_s [O_2]} \quad (2.92)$$

Trong đó:

$$\begin{aligned} \mu_0 &= K_0 K_1 K_p [R]_0 [E]_0 ; \\ K_w &= \frac{1}{K_p} ; K_s = \frac{K_1 [E]_0}{K_0 K_p} \end{aligned}$$

Mô hình trong điều kiện bão hoà ôxi sẽ chuyển thành mô hình Monod. Với các kí hiệu:

$$\begin{aligned} \mu_m^* &= \mu_0 \frac{[O_2]}{K_w + [O_2]} \\ K_s^* &= K_s \frac{[O_2]}{K_w + [O_2]} \end{aligned} \quad (2.93)$$

Ta được
$$\mu = \mu_m^* \frac{S}{K_s^* + S}$$

Nồng độ ôxi hoà tan $[O_2]$ được xem xét trong mô hình này khác với nồng độ C_s trên ranh giới phân cách pha lỏng–tế bào đã đưa vào xem xét trước đây. Nó là nồng độ ôxi trực tiếp ở trong chất (citoplasma) tế bào. Giá trị của nó quyết định tốc độ các phản ứng men phía trong tế bào với sự tham gia của ôxi. Nhưng sự khác nhau này phụ thuộc vào các trở lực riêng truyền ôxi phía trong tế bào và lại không lớn. Đối với những tế bào đơn, nếu xét tới

kích thước của nó thì sự khác nhau về nồng độ ôxi hoà tan trong khối chất lỏng và gần bề mặt tế bào là không đáng kể. Tuy nhiên, như đã chỉ ra ở trên môi trường trong nhiều trường hợp có thể xem xét như một hệ hợp thể, các phân tử riêng biệt của hệ bao gồm tập hợp tế bào và các khối cầu. Những tập hợp quy mô lớn như thế gây khó khăn cho việc chuyển ôxi đến các tế bào đơn nằm ở phía trong tập hợp tế bào. Điều này có thể dẫn đến việc giảm tốc độ tăng trưởng của chúng.

Lượng ôxi chuyển trong một đơn vị thời gian tới tập hợp tế bào bán kính R là:

$$q_{O_2}^s = k_{L-s} 4\pi R^2 (C_L - C_s) \quad (2.94)$$

Trong đó: C_s – nồng độ ôxi trên bề mặt tập hợp tế bào.

Phía trong tập hợp tế bào, nồng độ ôxi thay đổi theo phương trình khuếch tán đối với các phân tử hình cầu có tính tới việc sử dụng ôxi bởi các tế bào.

Nếu xem xét tập hợp tế bào như là một hình cầu đường kính R mà phía trong với một mật độ nhất định có các hạt giả rắn – những tế bào vi sinh vật, còn chất nền (trong trường hợp này là ôxi tan trong pha lỏng) được đưa đến các điểm bên trong hình cầu bằng khuếch tán và được tế bào sử dụng trong quá trình tăng trưởng, thì đối với một phần tử trên khoảng cách $r + dr$ tới tâm sẽ có hệ thức :

$$4\pi(r + dr)^2 D_{O_2} \left[\frac{dC}{dr} + \frac{d^2C}{dr^2} dr \right] - 4\pi r^2 D_{O_2} \frac{dC}{dr} = 4\pi r^2 dr q_{O_2}^x \quad (2.95)$$

Sau khi biến đổi ta được

$$\frac{d^2C}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dC}{dr} = \frac{1}{D_{O_2}} q_{O_2}^x \quad (2.96)$$

Trong đó:

r – bán kính hiện tại của tập hợp tế bào, $0 \leq r \leq R$;

C, C_0, C_s – tương ứng là nồng độ ôxi ở điểm với bán kính r , ở tâm tập hợp tế bào và trên bề mặt tế bào, $C_0 \leq C \leq C_s$;

$q_{O_2}^x$ – tốc độ riêng sử dụng ôxi bởi các tế bào.

$$q_{O_2}^x = \frac{q_{O_2}}{x}$$

Đại lượng tốc độ riêng sử dụng ôxi xác định bởi phương trình :

$$q_{O_2}^x = \alpha_{O_2} \mu = \alpha_{O_2} \frac{\mu_m C}{K_{O_2} + C} \quad (2.98)$$

Giải phương trình (2.96) nhận được sự phụ thuộc của tốc độ riêng vào nồng độ ôxi trên bề mặt C_s và có dạng :

$$q_{O_2}^x = \alpha_{O_2} \frac{\mu_m C_s}{K_{O_2}^s + C_s} \quad (2.99)$$

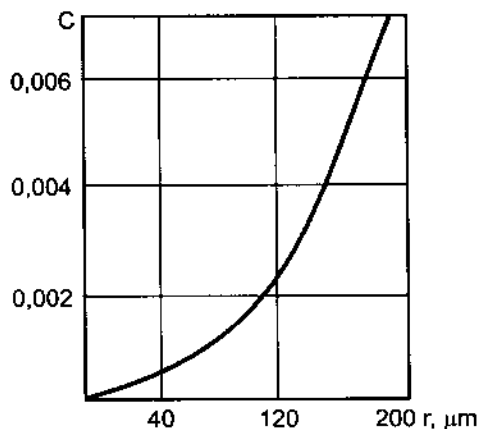
$$\text{Ở đây, } K_{O_2}^s = K_{O_2} (1 + 0,016 P_m) \quad (2.100)$$

Trong đó: P_m – tổ hợp được xác định bằng tỉ số tốc độ sử dụng chất nền và tốc độ khuếch tán của nó và có dạng :

$$P_m = \frac{q_{O_2}^{\max} \rho \frac{4}{3} \pi R^2}{(D_{O_2} / R) \cdot 4 \pi R^2 K_{O_2}} = \frac{q_{O_2}^{\max} \rho R^2}{D_{O_2} \cdot K_{O_2}} \quad (2.101)$$

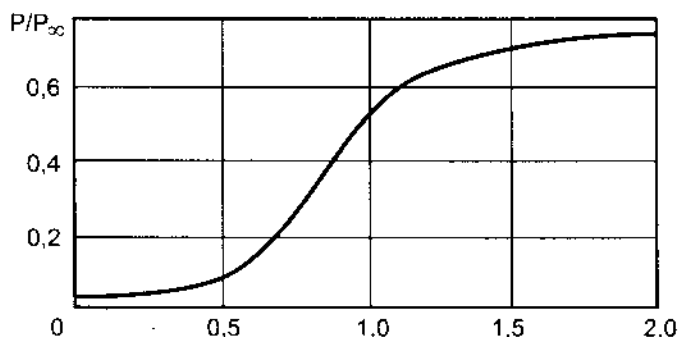
Trong đó: $q_{O_2}^{\max} = \alpha_{O_2} \mu_m$

Sự phân bố nồng độ ôxi theo chiều sâu của tập hợp tế bào bán kính $200 \mu m$ được chỉ ra trên hình 2.23.



Hình 2.23. Sự thay đổi nồng độ ôxi phía trong tập hợp tế bào

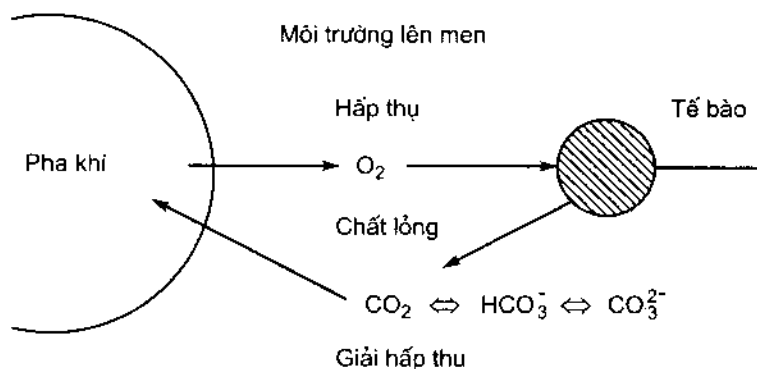
Tương tự có thể xem xét sự thay đổi của nồng độ ôxi trong bản thân tế bào phụ thuộc vào nồng độ ôxi trên bề mặt tế bào đến tận bên trong. Sử dụng mô hình khuếch tán ổn định đối với hạt hình cầu tham gia vào phản ứng, người ta đã nhận được đồ thị 2.24 minh họa sự phụ thuộc của tỉ số áp suất riêng phần của ôxi với $P_\infty = 0,1$ vào khoảng cách theo bán kính tế bào.



Hình 2.24. Sự phụ thuộc của áp suất riêng phần của ôxi vào bán kính tế bào

Tuy nhiên, cần nhấn mạnh rằng, việc xem xét chi tiết vấn đề chuyển ôxi như thế sẽ gây khó khăn cho việc giải quyết một loạt bài toán thực tiễn liên quan đến mô hình hoá quá trình tăng trưởng của vi sinh vật trong thiết bị phản ứng sinh hoá.

Cùng với hấp thụ ôxi vào môi trường, trong quá trình lên men còn có cả quá trình giải hấp thụ khí cacbon đioxit được tạo ra. Cacbon đioxit trong môi trường được hình thành ở 3 dạng: CO_2 hoà tan, các ion bicacbonat HCO_3^- và các ion cacbonat CO_3^{2-} . Ta hãy xem sơ đồ biểu diễn trên hình 2.25.

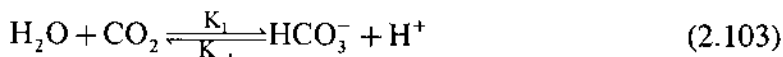


Hình 2.25. Sơ đồ quá trình giải hấp thụ CO_2 trong môi trường lên men

Cân bằng CO_2 cho một phần tử chất lỏng trên khoảng cách z tới bề mặt pha khí – lỏng có dạng:

$$D_{\text{CO}_2} \frac{d^2 C_{\text{CO}_2}}{dz^2} = K_{-1} [\text{H}^+] C_{\text{HCO}_3^-} + K_1 C_{\text{CO}_2} + P d_{\text{CO}_2} \mu x \quad (2.102)$$

Trong đó: K_{-1} , K_1 – các hằng số tốc độ phản ứng



Trong đó: P – hệ số hô hấp bằng $\alpha_{\text{CO}_2} / \alpha_{\text{O}_2}$;

C – nồng độ của các chất trong pha lỏng.

Thay nồng độ cân bằng của các ion bicarbonat vào phương trình (2.102) ta được :

$$\frac{d^2 C_{\text{CO}_2}}{dz^2} = a_1 C_{\text{CO}_2} + a_2 \quad (2.104)$$

Trong đó: $a_1 = K_1 / D_{\text{CO}_2}$; $a_2 = -K_1 C'_{\text{CO}_2} + P \alpha_{\text{O}_2} \mu x$

Những điều kiện của phương trình (2.104) có dạng:

$$C_{\text{CO}_2} = C'_{\text{CO}_2} \text{ ở } z = 0; \quad C_{\text{CO}_2} = C''_{\text{CO}_2} \text{ ở } z = \delta. \quad (2.105)$$

Trong đó: δ là chiều dày màng chất lỏng.

Nghiệm của phương trình:

$$C_{\text{CO}_2} = -\frac{a_2}{a_1} + a_3 \exp[a_1^{0.5} z] + a_4 \exp[-a_1^{0.5} z] \quad (2.106)$$

Trong đó:

$$a_3 = \frac{-\exp[-a_1^{0.5} \delta] \left(C'_{\text{CO}_2} + \frac{a_2}{a_1} \right) + \left(C''_{\text{CO}_2} + \frac{a_2}{a_1} \right)}{\exp[a_1^{0.5} \delta] - \exp[-a_1^{0.5} \delta]},$$

$$a_4 = \frac{\exp[a_1^{0.5} \delta] \left(C'_{\text{CO}_2} + \frac{a_2}{a_1} \right) - \left(C''_{\text{CO}_2} + \frac{a_2}{a_1} \right)}{\exp[a_1^{0.5} \delta] - \exp[-a_1^{0.5} \delta]}$$

Yếu tố gia tốc của phản ứng :

$$E = \frac{(dC_{\text{CO}_2} / dz)_{z=0}}{(C'_{\text{CO}_2} - C''_{\text{CO}_2}) / \delta} \quad (2.107)$$

theo kết quả nghiên cứu cho sơ đồ trên thì không lớn hơn 1,013.

Khi xem xét khuếch tán các ion HCO_3^- vào tế bào, có thể viết biểu thức sau cho trạng thái ổn định

$$-D_{\text{CO}_2} \frac{d^2 C_{\text{CO}_2}}{dz^2} + D_{\text{HCO}_3^-} \frac{d^2 C_{\text{HCO}_3^-}}{dz^2} = P \alpha_{\text{O}_2} \mu x \quad (2.108)$$

Giải phương trình vi phân (2.107) với các điều kiện biên (2.105) ta có

$$C_{\text{CO}_2} = a_5 z^2 + a_6 z + a_7 \quad (2.109)$$

Trong đó:
$$a_5 = \frac{P\alpha_{\text{O}_2} \mu x}{2(D_{\text{CO}_2} + K_1 D_{\text{HCO}_3^-} / K_{-1} [H^+])};$$

$$a_6 = \frac{P\alpha_{\text{O}_2} \mu x}{2(D_{\text{CO}_2} + K_1 D_{\text{HCO}_3^-} / K_{-1} [H^+])} + \frac{C_{\text{CO}_2}^* - C_{\text{CO}_2}'}{\delta};$$

$$a_7 = C_{\text{CO}_2}'$$

Đại lượng yếu tố gia tốc được xác định bằng biểu thức

$$E = 1 + \frac{K_1 D_{\text{HCO}_3^-}}{K_{-1} D_{\text{CO}_2} [H^+]} \cdot \frac{1}{1 - a\delta/2} \quad (2.110)$$

Trong đó: a – bề mặt tiếp xúc giữa các pha khí – lỏng.

Đối với trường hợp $a\delta \ll 1$ thì biểu thức (2.110) được đơn giản hoá thành

$$E = 1 + \frac{K_1 D_{\text{HCO}_3^-}}{K_{-1} D_{\text{CO}_2} [H^+]} \quad (2.111)$$

Giá trị của hệ số gia tốc E (2.111) sẽ tăng với việc tăng pH môi trường. Hệ số giải hấp thụ CO_2 có thể được đánh giá từ việc xem xét cân bằng khí cho thiết bị theo phương trình

$$k_L a = \frac{Q_k (P_{\text{CO}_2}^c - P_{\text{CO}_2}^d)}{V \Delta C_{\text{CO}_2} \cdot \phi} \quad (2.112)$$

Trong đó: Q_k/V – lưu lượng khí trên một đơn vị thể tích;

$P_{\text{CO}_2}^c, P_{\text{CO}_2}^d$ – áp suất riêng phần cuối và đầu của CO_2 trong khí;

ΔC_{CO_2} – động lực trung bình của truyền khối.

Đại lượng ΔC_{CO_2} được xác định bằng hệ thức :

– Đối với chế độ trộn lí tưởng :

$$\Delta C_{\text{CO}_2} = C_{\text{CO}_2}^c - \frac{P_{\text{CO}_2}^c}{\phi} \quad (2.113)$$

– Đối với chế độ đẩy lí tưởng :

$$\Delta C_{\text{CO}_2} = \frac{\left(C_{\text{CO}_2}^c - \frac{P_{\text{CO}_2}^c}{\phi} \right) - \left(C_{\text{CO}_2}^d - \frac{P_{\text{CO}_2}^d}{\phi} \right)}{\ln \left[\left(C_{\text{CO}_2}^c - \frac{P_{\text{CO}_2}^c}{\phi} \right) / \left(C_{\text{CO}_2}^d - \frac{P_{\text{CO}_2}^d}{\phi} \right) \right]} \quad (2.114)$$

Trong đó: $C_{\text{CO}_2}^d$, $C_{\text{CO}_2}^c$ là nồng độ CO_2 hoà tan ở đầu vào và ra khỏi thiết bị.

2.4.3. Các đặc trưng trao đổi chất của thiết bị sinh hoá

Đối với một lớp rộng quá trình sinh trưởng hiếu khí của vi sinh vật thì vấn đề cấp ôxi cho tế bào là quyết định, đặc biệt khi thiết bị có dung tích lớn. Trong trường hợp này nên đánh giá thiết bị qua các chỉ tiêu như: hệ số truyền khối ôxi theo thể tích ($k_L a$), tốc độ hấp thụ ôxi ($A_{O_2} = k_L a \Delta C$), mức

độ sử dụng ôxi $\left(\varphi_{O_2} = \frac{y_d - y_c}{y_c} \right)$ và chỉ tiêu tổng quát về chi phí năng lượng

trên một đơn vị ôxi $\left(N_{O_2} = \frac{N}{VA_{O_2}} \right)$.

Ví dụ, đối với thiết bị phản ứng sinh hoá dung tích 300m^3 và lớn hơn hệ thống khuấy trộn cơ có thể có:

$$k_L a = 200 - 400\text{h}^{-1}; \varphi_{O_2} = 7 - 10\%;$$

$$A_{O_2} = 1,5 - 5\text{kgO}_2 / \text{m}^3.\text{h}; N_{O_2} = 1 - 1,7\text{kwh} / \text{kgO}_2$$

Với thiết bị khuấy trộn cơ và sục khí riêng thì:

$$k_L a = 1000 - 2000\text{h}^{-1}; \varphi_{O_2} = 15 - 30\%;$$

$$A_{O_2} = 7 - 15\text{kgO}_2 / \text{m}^3.\text{h}; N_{O_2} = 1,3 - 2,2\text{kwh} / \text{kgO}_2$$

2.4.3.1. Các biểu thức để tính hệ số truyền khối

Có khá nhiều công trình nghiên cứu trao đổi chất trong các thiết bị phản ứng khác nhau. Dưới đây xin liệt kê những công thức cơ bản tính hệ số truyền khối trong hệ khí – lỏng.

Đối với các thiết bị sục khí có cánh khuấy:

$$1. k_L a = C_1 \left(\frac{N}{V} \right)^{m_1} \quad (2.115)$$

Trong đó: $m_1 = 0,81$; $C_1 = 0,06$ ở $\frac{N}{V} < 10 \text{ kW/m}^3$

$$2. k_L a = C_2 \left(\frac{N}{V} \right)^{m_2} W_G^{n_2} \quad (2.116)$$

Trong đó: $m_2 \approx 0,5 \div 1,0$ (thường thì 0,7); $n_2 \approx 0,5 - 0,7$.

Đối với cánh khuấy tuốc bin thì $m_2 = 0,95$; $n_2 = 0,67$.

$$3. k_L a = C_3 \left(\frac{N}{V} \right)^{m_3} \left(\frac{n_M d_M^3}{10^2 Q_G} \right)^{-t} \quad (2.117)$$

Trong đó: $m_3 = 0,5 \div 0,7$; $t = 0,33 \div 0,43$.

Đối với cánh khuấy tuốc bin thì $m_3 = 0,68$, $t = 0,33$.

$$4. k_L a = C_4 \left(\frac{N}{V} \right)^{m_4} \varphi^p \quad (2.118)$$

Đối với thiết bị có cánh khuấy bản, mái chèo và tuốc bin $m_4 = 0,44$, $p = 0,67$, $C_4 = 0,33$.

Đối với các môi trường có độ nhớt cao thì nên sử dụng công thức :

$$k_L a = 0,31 (Sc)^{-\frac{2}{3}} \left(\frac{\eta g}{\rho} \right)^{\frac{1}{3}} a \quad (2.119)$$

Khi tính động lực ΔC trong quá trình truyền khối ôxi từ pha khí vào pha lỏng cho thiết bị dạng tháp hay thiết bị có nhiều cơ cấu khuấy mở neo thì có thể chấp nhận mô hình đẩy lí tưởng theo pha khí. Khi đó, đại lượng ΔC sẽ có dạng :

– Trong điều kiện trộn lí tưởng của pha lỏng (thiết bị tháp có tuần hoàn chất lỏng).

$$\Delta C = \frac{\frac{1}{\psi} (P_{O_2}^d - P_{O_2}^c)}{2,3 \lg \frac{P_{O_2}^d - C_d \psi}{P_{O_2}^c - C_c \psi}} \quad (2.120a)$$

Trong điều kiện đẩy lí tường các pha lỏng (thiết bị tháp với các dòng khí lỏng song song)

$$\Delta C = \frac{\frac{1}{\psi} (P_{O_2}^d - P_{O_2}^c) - (C_d - C_k)}{2,3 \lg \frac{P_{O_2}^d - C_d \psi}{P_{O_2}^c - C_c \psi}} \quad (2.120b)$$

Trong đó:

ψ – hằng số Henry;

$P_{O_2}^d, P_{O_2}^c$ – áp suất riêng phần của ôxi ở đầu vào và ra thiết bị;

C_d, C_c – nồng độ ôxi hoà tan ở đầu vào và đầu ra thiết bị.

Để tăng động lực của quá trình truyền khối nên dùng ôxi hoặc không khí được làm giàu ôxi hơn là dùng không khí thông thường.

Để tính hệ số cấp khối trong pha lỏng β_L ở thiết bị sục khí.

$$Nu_D = 2 + K_1 \left[Re^{0,484} Sc^{0,339} \left(\frac{d \cdot g^{\frac{1}{3}}}{D_{D_L}^{\frac{2}{3}}} \right)^{0,072} \right]^{K_2} \quad (2.121)$$

Trong đó:

$$\left. \begin{array}{l} K_1 = 0,061 \\ K_2 = 1,61 \end{array} \right\} \text{ đối với bọt khí riêng}$$

$$\left. \begin{array}{l} K_1 = 0,0187 \\ K_2 = 1,61 \end{array} \right\} \text{ đối với khối bọt khí}$$

$$Re = \frac{W'_G d \rho}{\eta}; \quad Sc = \frac{\eta}{\rho D_L}; \quad Nu_D = \frac{k_L d}{D_L} \quad (2.122)$$

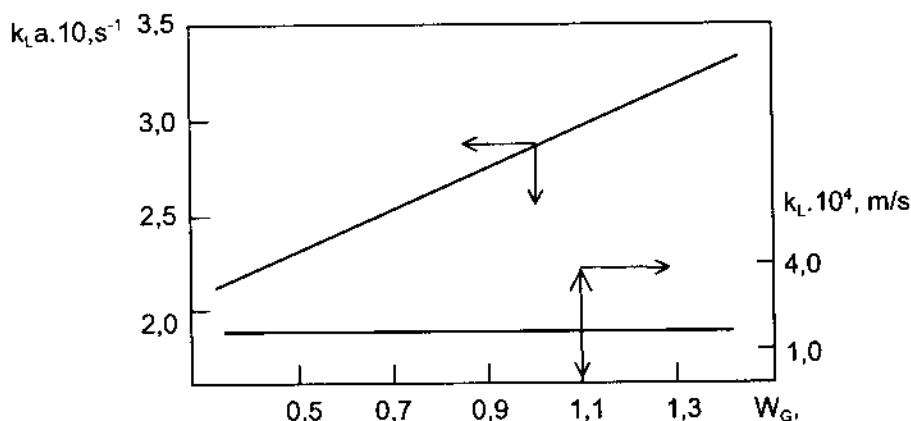
Trong đó: W'_G – tốc độ tương đối của khí; D_L – hệ số khuếch tán rối.

Đối với các môi trường theo các tính chất hoá lí gần với hệ dung dịch Na_2SO_4 – không khí thì:

$$Nu_D = 0,6 Re^{1,25} Sc^{\frac{1}{3}} \quad \text{ở } Re < 100 \quad (2.123)$$

$$Nu_D = 0,87 \cdot Re^{0,7} Sc^{\frac{1}{3}} \quad \text{ở } Re > 100 \quad (2.124)$$

Với việc tăng tốc độ pha khí trong thiết bị có thể xuất hiện chế độ nhũ hoá và lúc này thì bề mặt tiếp xúc pha cực đại. Trên hình 2.26 đưa ra các giá trị của $k_L a$ và k_L nhận được trên tháp đĩa đường kính 150mm.



Hình 2.26. Sự phụ thuộc của hệ số truyền khối vào tốc độ khí

Nhìn vào đồ thị ta thấy, $k_L a$ tăng khi tăng tốc độ khí W_G , còn k_L thì thực tế không đổi. Điều này được giải thích bởi việc $k_L a$ tăng chủ yếu do bề mặt tiếp xúc tăng, chứ k_L không tăng.

Đối với tháp đệm hình cầu hoạt động ở chế độ tăng sôi thì

$$k_L a = 0,08h^{0,72}L^{0,53} \exp(0,22W_G) \quad (2.125)$$

Công thức trên nhận được cho tháp thí nghiệm đường kính 50mm, tiết diện tự do của đĩa 50% và chiều cao tĩnh của lớp đệm 50–120 mm với đệm là các quả cầu PE đường kính 9mm và khối lượng riêng 478kg/m³.

Để tính hệ số cấp khối trong pha lỏng của quá trình hấp thụ trên tháp đĩa ta sử dụng phương trình.

$$Nu_D = A Re_L^m Pr_L^n \quad (2.126)$$

Trong đó: $Re_L = \frac{W_L d \rho_L}{(1-\varphi)\eta}$; $Pr_L = \frac{\eta}{S_L D_L}$; $Nu_D = \frac{\beta_L d}{D_L}$

Đối với đĩa sàng và lỗ thì giá trị của các số mũ $m = 0,33 \div 0,7$; $n = 0,5$.

Trong các thiết bị lên men loại tháp sục khí thì

$$Nu_D' = 0,6(Pr_L)^{0,5} Ga^{0,3} We^{-0,62} \varphi^{1,1} \quad (2.127)$$

Trong đó: $Nu_D' = \frac{k_L a D_{tbi}}{D_L}$

Như đã mô tả ở trên để tiến hành quá trình sinh hoá trong thiết bị thì việc chuyển chất trong hệ lỏng – rắn ở một số trường hợp lại quyết định tốc độ quá trình sinh trưởng của vi sinh vật.

Để tính hệ số truyền khối trong trường hợp này có thể sử dụng biểu thức:

$$k_{L-s} = \frac{\left[2 + 0,6 Re^{\frac{1}{2}} Pr^{\frac{1}{3}} \right] D_M}{d} \quad (2.128)$$

Trong đó:

d – đường kính của hạt rắn;

D_M – hệ số khuếch tán.

Quan hệ (2.128) dùng cho các hạt kích thước đến 15 μm . Đối với các hạt kích thước lớn hơn đến 200 μm thì

$$k_{L-s} = \frac{\left[2 + 0,6 \left(\frac{d W_t \rho}{\eta} \right)^{0,5} \left(\frac{\eta}{\rho D_M} \right)^{0,33} \right] D_M}{d} \quad (2.129)$$

Trong đó: $W_t = 0,05 \left[D_M \left(\frac{N}{V} \right) g / \rho \right]^{\frac{4}{9}} \left(\frac{V_{H_2O}}{V} \right)^{\frac{1}{3}}$

V_{H_2O} – thể tích thiết bị do chất lỏng chiếm.

Đối với hạt hình cầu nằm yên trong chất lỏng thì

$$k_{L-s} = \frac{2D_M}{d} \quad (2.130)$$

Từ những hệ thức trên ta thấy hệ số truyền khối lỏng – rắn tỉ lệ với kích thước của hạt.

Ta ước tính giá trị của k_{L-s} . Trong trường hợp khuếch tán ôxi ta có $D_{O_2} = 1,85 \cdot 10^{-9} m^2/s$, đối với tế bào kích thước 4–6 μm thì giá trị $k_{L-s} = 10^{-3} m/s$;

đối với tập hợp tế bào kích thước khoảng 400 μm thì $k_{L-S} = 10^{-5}$ m/s. Giá trị này đã tương đương và có thể nhỏ hơn hệ số cấp khối ôxi trong chất lỏng $k_L = (2-4)10^{-4}$ m/s.

2.4.3.2. Phương pháp thực nghiệm xác định các đặc trưng trao đổi chất của thiết bị

Để xác định các đặc trưng trao đổi chất của thiết bị bằng thực nghiệm, có thể sử dụng các phương pháp nghiên cứu đã biết trên những môi trường mẫu và cả các phương pháp cho phép xác định những đặc trưng này trực tiếp trên môi trường lên men trong thiết bị.

Do đơn giản và dễ dàng mà phương pháp sunfit xác định tốc độ hấp thụ ôxi trên môi trường mẫu natri sunfit – nước được sử dụng rộng rãi. Phương pháp này dựa vào việc ôxi hoá có xúc tác bởi ôxi với sự có mặt của các ion đồng hay coban.

Đại lượng tốc độ hấp thụ ôxi

$$\frac{dC_L}{dt} = k_L a (C^* - C_L) \quad (2.131)$$

và được đánh giá với $C_L \approx 0$ thì

$$\frac{dC_L}{dt} = k_L a C^* \quad (2.132)$$

Khi biết giá trị áp suất riêng phần của ôxi trong pha khí và độ hoà tan của nó có thể ước tính giá trị hệ số truyền khối thể tích cho hệ mô hình. Cần nhấn mạnh rằng, cơ chế của phản ứng ôxi hoá xúc tác natri sunfit còn chưa được nghiên cứu đầy đủ. Ví dụ, có công trình coi đó là phản ứng bậc một, một công trình khác lại coi đó là phản ứng bậc hai... Đối với phản ứng bậc một có thể sử dụng nghiệm giải tích sau:

$$\frac{dC_L}{dt} = a (C^* - C_L) (k_L^2 + DK')^{\frac{1}{2}} \quad (2.133)$$

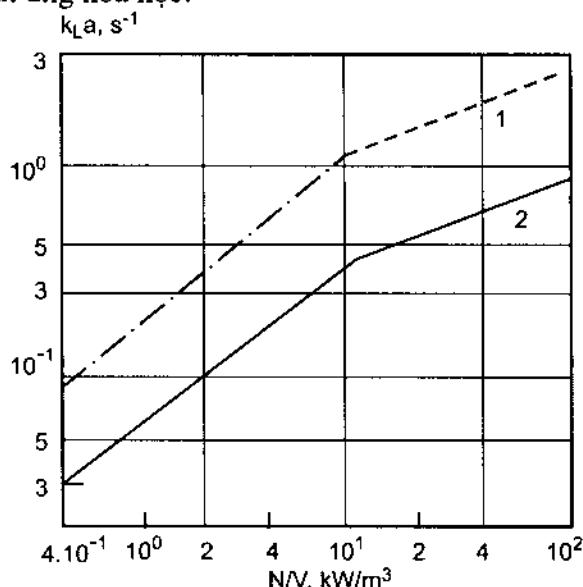
Trong đó: K' – hằng số tốc độ phản ứng.

Sử dụng khái niệm phản ứng này như là một quá trình hấp thụ hoá học ta có thể viết :

$$\frac{dC_L}{dt} = k_L a \varepsilon (C^* - C_L) \quad (2.134)$$

Trong đó: ε – hệ số gia tốc hấp thụ ôxi do phản ứng hoá học ảnh hưởng đến phân bố nồng độ ôxi trên bề mặt phân cách pha.

Ảnh hưởng của phản ứng hoá học dẫn đến sự khác nhau đáng kể giữa giá trị của hệ số cấp khối trong hấp thụ vật lí và hấp thụ hoá học. Có công trình tính được giá trị $\alpha = 3$. Trên hình 2.27 minh hoạ hiệu ứng tăng hệ số cấp khối do phản ứng hoá học.



Hình 2.27. Sự phụ thuộc của hệ số cấp khối vào năng lượng

1. Trường hợp hấp thụ hoá học ($\text{Na}_2\text{SO}_3 - \text{O}_2$);
2. Trường hợp hấp thụ vật lí ($\text{Na}_2\text{SO}_3 - \text{O}_2$)

Như vậy, sử dụng phương pháp sunfit cho phép đánh giá và so sánh thiết bị lên men theo giá trị của tốc độ hấp thụ trên hệ thống mô hình và đồng thời xác định giá trị của hệ số cấp khối theo ôxi trong trường hợp hấp thụ vật lí có tính tới việc gia tăng quá trình bởi phản ứng hoá học.

Tuy nhiên, việc đánh giá các đặc trưng trao đổi chất của thiết bị trên các môi trường mẫu (mô hình) không cho phép suy diễn một cách đơn trị về các chỉ tiêu thực khi chuyển sang đối tượng thực. Điều này như đã chỉ ra ở các phần trên liên quan đến sự có mặt trong môi trường lên men nhiều muối tan, các tế bào vi sinh vật, các sản phẩm trao đổi chất và chất nền hidrocarbon. Theo số liệu của một công trình nghiên cứu thì tỉ số hệ số truyền khối ôxi trong trường hợp không có tế bào và ôxi có tế bào nồng độ 8g/l với $n = 700$

vòng/phút là $\frac{(k_L a)_x}{(k_L a)_o} = 0,4$ thì với $n = 800$ vòng/phút là $\frac{(k_L a)_x}{(k_L a)_o} = 0,5$, còn

với $n = 1000$ vòng/phút là $\frac{(k_L a)_x}{(k_L a)_o} = 0,85$. Với việc tăng tốc độ cánh khuấy

thì xảy ra quá trình chia nhỏ tập hợp tế bào.

Theo một công trình nghiên cứu để chuyển chỉ số sunfit sang giá trị tốc độ hấp thụ ôxi trong môi trường lên men (nấm men với nồng độ tế bào 15–25g/l) thì cần sử dụng hệ thức:

$$(A_{O_2})_{\text{men}} = (0,75 \div 0,65)(A_{O_2})_{\text{sunfit}} \quad (2.135)$$

Một công trình nghiên cứu khác cho thấy tỉ số giá trị $k_L a$ tính theo phương pháp sunfit và giá trị $k_L a$ thực trong thiết bị có khuấy trộn bằng cơ học là 1,2 – 1,5. Như vậy đã có được đánh giá tin cậy hơn về các đặc trưng trao đổi khối của thiết bị thực.

Sử dụng những số liệu phân tích khí thải trong quá trình lên men hiếu khí có thể tính được giá trị tốc độ hấp thụ ôxi trong môi trường thực.

Ví dụ:

$$A_{O_2} = \frac{Q_{kk}^d}{V_p} y_{O_2}^d \rho_{O_2} - \frac{Q_{kk}^c}{V_p} y_{O_2}^c \rho_{O_2} \quad (2.136)$$

xét tới các hệ thức

$$\begin{aligned} Q_{kk}^c &= \frac{Q_{N_2}}{100 - (y_{O_2} + y_{CO_2})} \approx \frac{Q_{kk}^d - Q_{O_2}}{100 - (y_{O_2} + y_{CO_2})} \\ &\approx \frac{Q_{kk}^d - Q_{kk}^d y_{O_2}^d}{100 - (y_{O_2} + y_{CO_2})} \end{aligned} \quad (2.137)$$

$$\text{ta được } A_{O_2} = \frac{Q_{kk}^d \rho_{O_2}}{V_p} [0,21 - y_{O_2} - 0,21 y_{CO_2}], \text{ kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{h}) \quad (2.138)$$

$$A_{CO_2} = \frac{Q_{kk}^d \rho_{CO_2}}{V_p} \left[\frac{0,79 y_{CO_2}}{1 - y_{O_2} - y_{CO_2}} \right], \text{ kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{h}) \quad (2.139)$$

Hàng loạt phương pháp thực nghiệm dựa trên việc đo nồng độ ôxi hoà tan trong môi trường. Ví dụ, phương pháp thổi khí là đo tốc độ thay đổi nồng độ ôxi hoà tan khi sục khí sau một chu kì thổi sơ bộ bằng nitơ. Trong trường hợp này phương trình cân bằng có dạng :

$$\frac{dC_L}{dt} = k_L a (C^* - C_L) - g_{O_2} \quad (2.140)$$

Ở $g_{O_2} = 0$ phương trình có dạng :

$$\frac{dC_L}{dt} = k_L a (C^* - C_L) \quad (2.141)$$

Giá trị hệ số $k_L a$ tiện hơn cả là nhận được bằng việc xây dựng đồ thị. Lấy tích phân (2.141) ta được

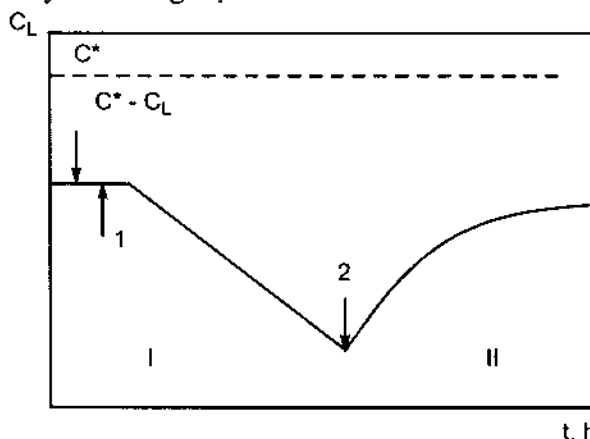
$$\ln(C^* - C_L) = \ln C^* - k_L a t \quad (2.142)$$

khi đó trên đồ thị ở tọa độ $\ln(C^* - C_L)$ và t thì tg của góc nghiêng chính là $k_L a$.

Phương pháp tích phân coi đại lượng tốc độ sử dụng ôxi bởi vi sinh vật là không đổi (g_{O_2}) trong một khoảng thời gian ngắn. Biểu thức tính toán nhận được bằng việc lấy tích phân trực tiếp phương trình (2.140) với các điều kiện đầu $C = 0$ ở $t = 0$:

$$\ln \left[1 - \frac{C_L}{[C^* - g_{O_2} / (k_L a)]} \right] = -k_L a t \quad (2.143)$$

Phổ biến nhất là phương pháp động mà bản chất của nó là xác định nồng độ ôxi hoà tan ở các chu kì sau khi giảm đáng kể cấp khí và lại cấp khí tiếp như cũ. Đồ thị thay đổi nồng độ ôxi hoà tan ở các chu kì này biểu diễn trên hình 2.28.



Hình 2.28. Sự thay đổi nồng độ ôxi hoà tan trong phương pháp động
1. Ngừng cấp không khí ; 2. Bắt đầu cấp không khí.

Các phương trình tương ứng các chu kì trên có dạng:

$$\text{-- Chu kì I} \quad \frac{dC_L}{dt} = -g_{O_2} = -\alpha_{O_2} \mu x \quad (2.144)$$

$$\text{– Chu kì II} \quad \frac{dC_L}{dt} = k_L a (C^* - C_L) - g_{O_2} \quad (2.145)$$

Từ đó sau khi lấy tích phân ta được

$$C_L = C^* - \frac{g_{O_2}}{k_L a} + g_{O_2} t \quad (2.146)$$

Một công trình đã so sánh giá trị $k_L a$ nhận được theo các phương pháp sunfit và phương pháp động. Thí nghiệm tiến hành trong thiết bị với cánh khuấy tuốc bin, dung tích thiết bị 18,2 l, lưu lượng ôxi 8,89 l/phút. Để đo ôxi hoà tan đã dùng đầu màng 15µm.

BẢNG 2.3. KẾT QUẢ XÁC ĐỊNH HỆ SỐ TRUYỀN KHỐI $K_L a \cdot 10^2, s^{-1}$

$n, \text{ vg/ph}$	250	450	550	650
Phương pháp sunfit	0,93	6,85	12,3	15,9
Phương pháp động	0,84	5,17	8,1	11,1

Cùng với những ưu điểm xác định hệ số truyền khối của phương pháp động thì xuất hiện khó khăn trong việc chế tạo các đầu đo ôxi hoà tan. Những yếu tố ảnh hưởng đến chỉ số của đầu đo màng là: chiều dày màng, vật liệu màng, nhiệt độ... Riêng ảnh hưởng của nhiệt độ đến hằng số màng $k = \pi D/h^2$ (D là hệ số khuếch tán, h chiều dày màng thì hệ số truyền khối trong màng $k_M \approx D/h$) sẽ có dạng theo định luật Arrhenius

$$k = k_0 - \exp \left[-\frac{E}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right] \quad (2.147)$$

Trong đó:

E – năng lượng hoạt hoá;

T – nhiệt độ tuyệt đối;

R – hằng số khí.

Hiện nay, người ta cũng đã chế tạo được những đầu đo ôxi hoà tan có đủ độ tin cậy để sử dụng trong việc xác định hệ số truyền khối ôxi theo các phương pháp nêu trên.

Chương III

MÔ HÌNH HOÁ QUÁ TRÌNH XỬ LÝ NƯỚC THẢI BẰNG PHƯƠNG PHÁP SINH HỌC HIẾU KHÍ

Ứng dụng vi sinh vật trong công nghiệp là tiến hành có điều khiển quá trình biến đổi sinh hoá chất hữu cơ với sự tham gia của vi sinh vật và men. Một trong những ví dụ điển hình nhất ứng dụng vi sinh vật trong công nghiệp là xử lý nước thải bằng phương pháp sinh học. Chất hữu cơ chứa trong nước thải sinh hoạt và sản xuất là cơ chất chứa cacbon cơ bản để vi sinh vật bùn hoạt tính tăng trưởng và phát triển. Trong quá trình hoạt động sống của vi sinh vật hình thành nên sinh khối – bùn hoạt tính dư và CO_2 .

Xử lý nước thải bằng phương pháp sinh học là quá trình hiệu quả và triển vọng. Vi sinh vật trong các biến đổi trao đổi chất thể hiện hoạt tính rất cao liên quan đến khả năng của vi sinh vật sinh sản nhanh. Chúng xử lý chất hữu cơ với tốc độ tỉ lệ thuận tốc độ tăng trưởng của chúng. Khả năng xử lý nước thải bằng phương pháp sinh học phụ thuộc vào loại và thành phần chất hữu cơ và tương quan thích hợp của những phân tử của cơ chất đó cần để làm nguồn dinh dưỡng cho vi sinh vật. Các chất hữu cơ có mặt trong nước thải sinh hoạt và phần lớn nước thải công nghiệp đều thích hợp cho hoạt động sống của vi sinh vật.

Như ta đã biết, quá trình xử lý nước thải bằng phương pháp sinh học về mặt kĩ thuật được thực hiện bằng hai cách: ở biophin hoặc ở aeroten. Sự khác nhau cơ bản giữa chúng là ở phương pháp nuôi cấy vi sinh vật. Trong biophin, vi sinh vật được cố định trên bề mặt vật liệu trơ. Trong aeroten, vi sinh vật được nuôi cấy như là những bông vi khuẩn huyền phù bơi tự do. Ở đây, cấu trúc dòng nước thải, động học quá trình biến đổi chất hữu cơ và cả tốc độ hoà tan ôxi trong nước thải đóng vai trò cơ bản.

Động lực học phát triển vi sinh vật và trạng thái sinh lí của chúng phụ thuộc trực tiếp vào phương pháp cấp ôxi – liên tục hay gián đoạn. Nếu không đưa vào thêm lượng cơ chất thì vi sinh vật ở ngay lúc đầu sẽ sinh sản rất nhanh trong điều kiện dư chất dinh dưỡng, sau đó quá trình này chậm dần. Do kết quả thay đổi môi trường dinh dưỡng mà vi sinh vật xuất hiện ở điều kiện ban đầu khác với vi sinh vật xuất hiện sau đó.

Để giải quyết có kết quả các bài toán liên quan đến dự báo, kế hoạch hoá, điều khiển và kiểm soát kịp thời chất lượng môi trường nước, cần có sự mô tả tổng hợp cần thiết các quá trình thuỷ động học, thuỷ sinh học và vi sinh trong hồ chứa nước và thiết bị. Để có mô tả như thế, người ta sử dụng các phương pháp mô hình hoá toán học và phân tích hệ thống. Việc sử dụng các mô hình toán học cho phép tính tới những đặc điểm này khác của quá trình làm sạch, mô tả đúng hơn kết quả thực nghiệm. Định hướng mô hình hoá được thể hiện không chỉ khi chọn công cụ toán học mà còn cả ở cấp độ chi tiết hoá cấu trúc đối tượng khảo sát.

Những nguyên tắc xây dựng mô hình toán học của quá trình xử lý nước thải

Xây dựng mô hình toán học được bắt đầu từ việc thành lập mô tả hình thức của các quá trình tạo nên cơ sở công cụ toán học.

Trước tiên, người ta khảo sát mô hình thuỷ động học như là cơ sở của cấu trúc mô tả toán học. Tiếp đó nghiên cứu động học của phản ứng hoá học, của các quá trình chuyển khối, truyền nhiệt có tính tới những điều kiện thuỷ động học của mô hình và thành lập mô tả toán học cho từng quá trình này. Giai đoạn cuối cùng là hợp nhất tất cả các quá trình "sơ đẳng" đã khảo sát này vào một hệ phương trình là mô tả toán học của đối tượng nghiên cứu.

Đối với mô tả toán học xây dựng trên cơ sở phân tích bản chất hoá học và lí học của đối tượng mô hình hoá có thể chia thành các nhóm phương trình sau:

1) Phương trình cân bằng động lượng

$$\frac{\partial U_x}{\partial \tau} = - \left(U_x \frac{\partial U_x}{\partial y} + U_y \frac{\partial U_x}{\partial y} + U_z \frac{\partial U_x}{\partial z} \right) + \nu \nabla^2 U_x + \left(g - \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial P}{\partial x} \right)$$

Trong đó:

U_x – tốc độ chuyển động của môi trường dọc theo trục x;

ν – hệ số vận tải (độ nhớt);

$\nu \nabla^2 U_x$ – lực ma sát;

$\left(g - \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial P}{\partial x} \right)$ – lực áp suất ngoài.

2) Phương trình cân bằng năng lượng đối với một đơn vị thể tích môi trường

$$\frac{\partial t}{\partial \tau} = - \left(U_x \frac{\partial t}{\partial x} + U_y \frac{\partial t}{\partial y} + U_z \frac{\partial t}{\partial z} \right) + a \nabla^2 t + \frac{q_r}{\rho C_p}$$

Trong đó:

t – nhiệt độ môi trường;

a – hệ số dẫn nhiệt $\left(a = \frac{\lambda}{\rho C_p} \right)$;

$a \nabla^2 t$ – chuyển năng lượng quy mô phân tử;

q_r – công suất nguồn nhiệt trong môi trường.

3) Phương trình cân bằng chất theo cấu tử i trên một đơn vị thể tích môi trường

$$\frac{\partial C_i}{\partial \tau} = - \left(U_x \frac{\partial C_i}{\partial x} + U_y \frac{\partial C_i}{\partial y} + U_z \frac{\partial C_i}{\partial z} \right) + D_i \nabla^2 C_i + r_{iv}$$

Trong đó: C_i – nồng độ cấu tử i trong môi trường; D_i – hệ số khuếch tán; $D_i \nabla^2 C_i$ – chuyển khối phân tử; r_{iv} – tốc độ hình thành cấu tử i trong một đơn vị thể tích.

Nói chung, các phương trình này sử dụng được đối với những quá trình bất kì, hiển nhiên là trong trường hợp tính tới những ràng buộc thể hiện bởi những đặc điểm của quá trình cụ thể như hình học của thiết bị, các đặc trưng vật lí của hệ, các điều kiện tác động tương hỗ với môi trường, các điều kiện thời điểm bắt đầu tính. Trong mô tả toán học của các quá trình xảy ra trong hệ làm sạch nước, cần tính tới việc hệ làm sạch nước thải sinh học khác về chất với các hệ của thế giới phi động vật. Đây là các hệ nhiều cấu tử, nhiều yếu tố tự điều chỉnh và nhiều mức thường xuyên trong trao đổi chất và năng lượng với môi trường. Hành vi của quần thể vi sinh vật tham gia vào quá trình khử chất bẩn cũng như là hành vi của một hệ sinh học bất kì nào khác vô cùng đa dạng. Trong quá trình tăng trưởng và phát triển của quần thể, sinh khối được tích lũy, thành phần môi trường thay đổi, thông tin di truyền được truyền cho quần thể, các quá trình đột biến và chọn lọc được thực hiện, xảy ra đấu tranh sinh tồn, đồng thời cũng xảy ra các quá trình khác đặc trưng cho hệ này và đó là sự quan tâm của những nhà nghiên cứu khác nhau.

Các quy luật động học của quá trình sử dụng cơ chất bởi vi sinh vật và những đặc điểm mô tả toán học của chúng sẽ được xem xét ở phần dưới một cách chi tiết hơn.

Một đặc điểm khác biệt của mô hình hoá toán học các hệ làm sạch sinh học là xem xét cả tính không ổn định của thành phần, hàm lượng và lưu lượng nước thải cấp cho quá trình xử lý.

3.1. MÔ HÌNH HOÁ TOÁN HỌC AEROTEN

Khi mô hình hoá toán học có thể xem xét aeroten như là một thiết bị phản ứng sinh hoá với tất cả những đặc điểm đã nêu ở trên. Ở đây, cần thêm rằng quá trình làm sạch nước thải bằng bùn hoạt tính không đồng nhất do một phần các cấu tử bị ôxi hoá rất nhanh bởi vi khuẩn (axit axetic, n-butanol, các cacbohidrat), trong khi đó những cấu tử khác (hidrocacbon các loại, rượu bậc cao, axit béo...) lại ôxi hoá rất khó và thường ở lại trong bùn hoạt tính rất lâu. Kết quả là cơ chế tác động tương hỗ của quần thể vi khuẩn nhiều loại và cơ chất đa cấu tử cho đến nay vẫn chưa hoàn toàn được khám phá. Vì thế, để đơn giản hoá những quan hệ động học phục vụ cho tính toán, cần xem xét thành phần của dòng nước thải theo chỉ tiêu trung bình BOD (g/m^3), còn thành phần của bùn hoạt tính theo nồng độ chung (g/m^3).

Sự thu hồi từ nước thải những phần tử lơ lửng lớn và phần lớn chất rắn trong trạng thái keo xảy ra do kết quả của quá trình hấp thụ khí và chạm bóng bùn hoạt tính với các phần tử chất rắn hữu cơ. Vì thế, điều kiện để quá trình ôxi hoá sinh học xảy ra bình thường là sự phân bố đều các bông bùn hoạt tính trong toàn bộ thể tích aeroten và đảm bảo chuyển ôxi hoà tan và cơ chất đến các bông đó. Đồng thời, mật độ các bông bùn hoạt tính cũng hơi làm tăng khối lượng riêng của nước và kết quả là xảy ra lắng bùn hoạt tính dưới tác động của trọng lực. Để ngăn ngừa việc này trong các công trình có thông khí, cần phải xem xét để có sự khuấy trộn mạnh. Điều đó đảm bảo được nhờ thông khí bằng khí nén hay thông khí cơ học.

Hoàn cảnh thuỷ động trong công trình sẽ được hình thành tùy thuộc vào phương pháp và cường độ sục khí, vào cả hình học của aeroten và sự tổ chức dòng cấp. Các ý kiến về cấu trúc dòng trong aeroten còn mang tính chất mâu thuẫn (từ trộn lí tưởng đến đẩy lí tưởng, kể cả trạng thái trung gian). Do đó, cần có một mô hình toán học cấu trúc dòng kết hợp linh động có thể thay đổi được tùy thuộc vào hoàn cảnh thuỷ động học thực tế trong aeroten. Khi

xây dựng một mô hình như thế cho quá trình làm sạch nước thải trong aeroten, cần chấp nhận giả thiết là cấu trúc dòng theo bùn hoạt tính và theo cơ chất là như nhau.

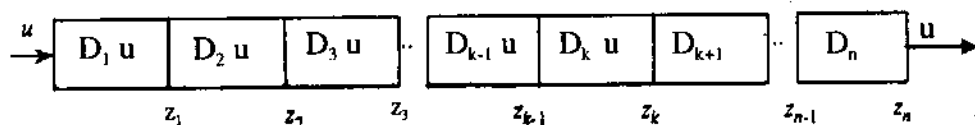
Như vậy, mô hình toán học của aeroten về tổng thể được hình thành trên cơ sở mô hình động học ôxi hoá cơ chất bởi vi sinh vật và mô hình thuỷ động học của aeroten.

3.1.1. Mô hình toán học khuấy trộn dọc trong kênh hạn chế với một vài vùng trộn

Khi khảo sát aeroten với thông khí sủi bọt, người ta thường xác định hệ số khuấy trộn dọc trung bình tuy trong điều kiện thực nó có thể khác nhau trên những đoạn khác nhau. Mô hình khuếch tán thông thường ở các trường hợp này phản ánh không đủ chính xác bản chất vật lý của quá trình.

Để tối ưu hoá quá trình khuấy trộn dọc, người ta tìm ra những đoạn với thuỷ động học xấu nhất cho việc thực hiện quá trình. Để làm việc đó, người ta xác định các hệ số khuấy trộn dọc trên những đoạn riêng biệt của thiết bị.

Sơ đồ mô hình kiểu một kênh hạn chế (thiết bị) cấu tạo từ n vùng với cường độ khuấy trộn khác nhau được đưa ra trên hình 3.1.



Hình 3.1. Sơ đồ mô hình khuấy trộn dọc trong kênh hạn chế với n vùng trộn

Cân bằng vật liệu theo chất chỉ thị cho các vùng riêng biệt được mô tả bằng các phương trình sau:

$$D_1 \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - u \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial c}{\partial \tau}, \quad 0 \leq z \leq z_1$$

.....

$$D_k \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - u \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial c}{\partial \tau}, \quad z_{k-1} \leq z \leq z_k$$

.....

$$D_n \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - u \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial c}{\partial \tau}, \quad z_{n-1} \leq z \leq z_n$$

Điều kiện biên:

$$D_1 \left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)_{z=0} - uc_0 = 0$$

$$D_1 \left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)_{z=0} - uc_{z,1}^- = D_2 \left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)_{z,k}^+ - uc_{z,k}^+$$

$$c_{z,k}^- = c_{z,k}^+$$

.....

$$D_k \left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)_{z,1}^- - uc_{z,1}^- = D_{k+1} \left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)_{z,k}^+ - uc_{z,k}^+$$

$$c_{z,k}^- = c_{z,k}^+$$

.....

$$D_{n-1} \left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)_{z,(n-1)}^- - uc_{z,(n-1)}^- = D_n \left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)_{z,(n-1)}^+ - uc_{z,(n-1)}^+$$

$$c_{z,(n-1)}^- = c_{z,(n-1)}^+$$

$$\left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)_{z=L} = 0$$

Trong đó:

u – tốc độ tuyến tính của dòng (m/s);

D_k ($k = 1, 2, \dots, n$) – hệ số khuấy trộn dọc trong vùng k của thiết bị (m^2/s);

z, k – tọa độ chiều dài dòng chất lỏng ở vùng k (m);

z, k^- và z, k^+ – tọa độ chiều dài của dòng ở gần vô hạn với điểm z, k đầu – phía trái + phía phải (m);

c – nồng độ chất chỉ thị (g/l).

Ta đưa vào hệ phương trình các biến không thứ nguyên và tính tới việc cấp chất chỉ thị kiểu xung ở dạng hàm số Dirac $\delta(t)$ vào vùng thứ nhất sẽ được:

$$\frac{1}{Pe_1} \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial Z^2} - \frac{\partial c}{\partial Z} + \delta(t) = \frac{\partial c}{\partial t}; \quad 0 \leq Z \leq Z_1$$

.....

$$\frac{1}{Pe_k} \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial Z^2} - \frac{\partial c}{\partial Z} + \delta(t) = \frac{\partial c}{\partial t}; \quad Z_{k-1} \leq Z \leq Z_k$$

.....

$$\frac{1}{Pe_n} \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial Z^2} - \frac{\partial c}{\partial Z} \delta(t) = \frac{\partial c}{\partial t}; \quad Z_{n-1} \leq Z \leq Z_n$$

Các điều kiện biên :

$$\frac{1}{Pe_1} \left(\frac{\partial c}{\partial Z} \right)_{z=0} - c_0 = 0$$

$$\frac{1}{Pe_1} \left(\frac{\partial c}{\partial Z} \right)_{z,1}^- - c_{z,1}^- = \frac{1}{Pe_2} \left(\frac{\partial c}{\partial Z} \right)_{z,2}^+ - c_{z,1}^+$$

$$c_{z,1}^- = c_{z,1}^+$$

.....

$$\frac{1}{Pe_k} \left(\frac{\partial c}{\partial Z} \right)_{z,k}^- - c_{z,k}^- = \frac{1}{Pe_{k+1}} \left(\frac{\partial c}{\partial Z} \right)_{z,k}^+ - c_{z,k}^+$$

$$c_{z,k}^- = c_{z,k}^+$$

.....

$$\frac{1}{Pe_{n-1}} \left(\frac{\partial c}{\partial Z} \right)_{z,(n-1)}^- - c_{z,(n-1)}^- = \frac{1}{Pe_n} \left(\frac{\partial c}{\partial Z} \right)_{z,(n-1)}^+ - c_{z,(n-1)}^+$$

$$c_{z,(n-1)}^- = c_{z,(n-1)}^+$$

$$\left(\frac{\partial c}{\partial Z} \right)_{z=1} = 0$$

Trong đó: $Pe = uL/D$, $Z = z/L$ -- tọa độ vô thứ nguyên theo chiều dài của dòng.

Trong trường hợp cấp chất chỉ thị ở dạng xung đầu vào thiết bị ($Z = 0$), các phương trình cho mômen gốc bậc một M_1 và bậc hai M_2 của đường cong đáp ứng ở vùng bất kì k sẽ có dạng:

$$M_1 = A_k \exp Pe_{k-1} Z + \frac{1}{Pe_k} + Z_k, \quad Z_{k-1} \leq Z_k \quad (3.1)$$

Trong đó: $k = 1, 2, \dots, n-1$ thì

$$A_k = \left[\frac{1}{Pe_{k+1}} + \frac{1}{Pe_k} + A_{k+1} \exp(Pe_{k+1} Z_k) \right] \exp(-Pe_k Z_k)$$

còn $k = n$ thì

$$A_n = \exp(-Pe_n)/Pe_n$$

$$M_2 = \sum_{k=1}^n B_k + \frac{4Z}{Pe_k} + \frac{4}{Pe_k^2} + Z^2 - (2A_k Z - C_k) \exp(Pe_k Z) \quad (3.2)$$

$$Z_{k-1} \leq Z \leq Z_k$$

Nếu $k = 1$ thì

$$B_1 = -2A_1/Pe_1$$

còn $k = 2, 3, \dots, n$ thì

$$B_k = \frac{2Z_{k-1}}{Pe_{k-1}} - \frac{2Z_{k-1}}{Pe_k} + \frac{2A_{k-1}}{Pe_{k-1}} \exp(Pe_{k-1} Z_{k-1}) - \frac{2A_k}{Pe_{k-1}} \exp(Pe_k Z_{k-1})$$

Nếu $k = 1, 2, \dots, n-1$ thì

$$C_k = 2A_k Z_k - (2A_{k+1} Z_k - C_{k+1}) \exp Z_k (Pe_{k+1} - Pe_k) + \left(B_{k+1} - \frac{4Z_k}{Pe_k} - \frac{4}{Pe_k^2} + \frac{4Z_k}{Pe_{k+1}} + \frac{4}{Pe_{k+1}^2} \right) \exp(-Pe_k Z_k)$$

còn $k = n$ thì

$$C_n = - \left(\frac{4}{Pe_n} + \frac{6}{Pe_n^2} \right) \exp(-Pe_n)$$

Các phương trình (3.1) và (3.2) cho phép theo các đường cong đáp ứng thực nghiệm trên những đoạn khác nhau của thiết bị, xác định cường độ khuấy trộn dọc. Ví dụ, cố định các đường cong đáp ứng ở các tiết diện $Z_1, Z_2, \dots, Z_k, \dots, Z_n = 1$ có thể theo đại lượng gia số phương sai vô thứ nguyên trên từng đoạn $\Delta\sigma_\theta^2 = \sigma_{z,k}^2 - \sigma_{z,(k-1)}^2$ lần lượt tính tất cả các giá trị của Pe_k và D_k bắt đầu từ đoạn cuối cùng. Sự phụ thuộc của $\Delta\sigma_\theta^2$ vào các thông số của mô hình cần cho tính toán rút ra từ các phương trình (3.1), (3.2). Biểu thức tổng quát $\Delta\sigma_\theta^2$ cho đoạn thiết bị k có dạng:

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_\theta^2 = \sigma_{z,k}^2 - \sigma_{z,(k-1)}^2 = & \frac{2(Z_k - Z_{k-1})}{Pe_k} + \left(4A_k Z_{k-1} + \frac{2A_k}{Pe_k} - C_k \right) \exp(Pe_k Z_{k-1}) \\ & - \left(4A_k Z_k + \frac{2A_k}{Pe_k} - C_k \right) \exp(Pe_k Z_k) + \\ & + A_k^2 [\exp(2Pe_k Z_{k-1}) - \exp(2Pe_k Z_k)] \end{aligned} \quad (3.3)$$

Trong phương trình này, ngoài Pe của đoạn cần nghiên cứu còn cả Pe của những đoạn sau do đó có thể tìm tất cả các giá trị của Pe_k . Đối với thiết bị có chiều dài lớn (Pe_k lớn), phương trình (3.3) được đơn giản hoá và Pe_k được xác định ở dạng tường minh. Khi khảo sát thiết bị có chiều dài nhỏ (Pe_k không lớn) ta phải giải phương trình (3.3) bằng phương pháp đồ thị. Kết quả xác định được các giá trị trung bình của hệ số khuấy trộn dọc của những đoạn thiết bị riêng biệt. Đối với đoạn cuối cùng phương trình (3.3) có dạng:

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_\theta^2 = \sigma_{z=1}^2 - \sigma_{z=n-1}^2 = & \frac{2(1 - Z_{n-1})}{Pe_n} - \frac{5}{Pe_n^2} + \left\{ \frac{4(1 - Z_{n-1})}{Pe_n} + \frac{4}{Pe_n^2} \right\} \exp \\ & [-Pe_n (1 - Z_{n-1})] + \exp[-2Pe_n (1 - Z_{n-1})] \frac{1}{Pe_n^2} \end{aligned} \quad (3.4)$$

Thường thì 2 số hạng cuối cùng của phương trình (3.4) rất nhỏ và khi đó:

$$Pe_n = \frac{1 - Z_{n-1}}{\Delta\sigma_\theta^2} + \sqrt{\left(\frac{1 - Z_{n-1}}{\Delta\sigma_\theta^2} \right)^2 - \frac{5}{\Delta\sigma_\theta^2}}$$

Đối với thiết bị cấu tạo từ 2 đoạn có cường độ khuấy trộn dọc khác nhau thì trên cơ sở các phương trình (3.1) và (3.2), ta được:

$$\sigma_{\theta 1}^2 = \frac{2(1-Z_1)}{Pe_2} - \frac{2}{Pe_2^2} + \frac{2}{Pe_1} \left(Z_1 + \frac{1}{Pe_2} \right) - \frac{2}{Pe_2^2} + \left(\frac{1}{Pe_1} - \frac{1}{Pe_2} \right) \times \frac{2 \exp(-Pe_1 Z_1)}{Pe_1} + \left[\frac{1}{Pe_2} - \frac{1}{Pe_1} + \frac{\exp(-Pe_1 Z_1)}{Pe_1} \right] \frac{2 \exp[-Pe_2(1-Z_1)]}{Pe_2} \quad (3.5)$$

Ở những giá trị Pe lớn 2 số hạng cuối cùng của (2.5) cũng rất nhỏ nên:

$$Pe_1 = \frac{Z_1 + 1/Pe_2}{C_1} + \sqrt{\left(\frac{Z_1 + 1/Pe_2}{C_1} \right)^2 - \frac{2}{C_1}} \quad (3.6)$$

Trong đó:

$$C_1 = \sigma_{\theta 1}^2 + \frac{2}{Pe_2^2} - \frac{2(1-Z_1)}{Pe_2}$$

Biết Pe_2 có thể theo phương sai hàm đáp ứng cố định ở đầu ra thiết bị, nhờ phương trình (3.6) tìm Pe_1 .

3.1.2. Thực nghiệm nghiên cứu thủy động học trong aeroten

* Mục đích thí nghiệm

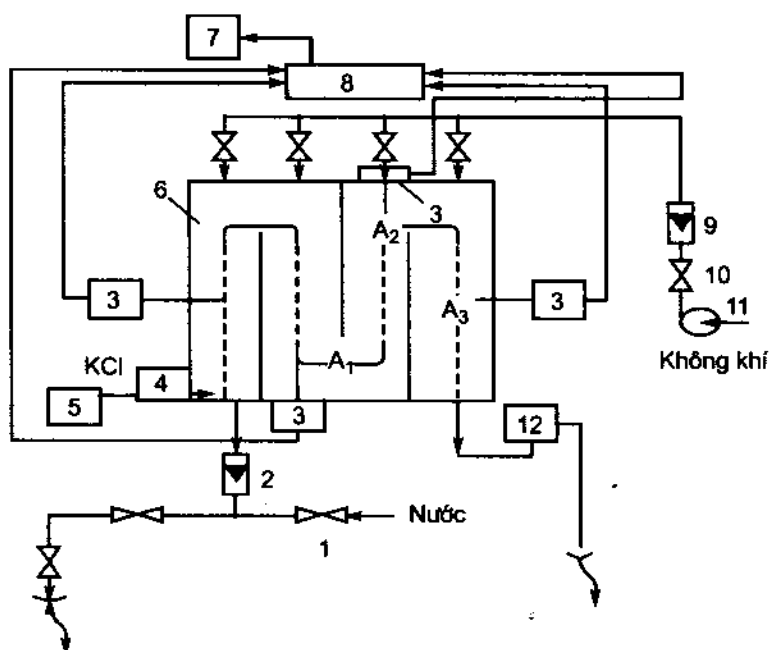
1. Nghiên cứu cấu trúc dòng chất lỏng trong aeroten có 4 hành lang (sử dụng để xử lý nước thải).

2. Tính các thông số của mô hình toán học dãy hộp và khuếch tán, để làm việc này ghi các hàm đáp ứng thực nghiệm trên nhiều dạng xung trong pha lỏng ở một vài điểm của aeroten.

3. Tiến hành so sánh sự chính xác của các mô hình.

* Mô tả thiết bị

Thiết bị (hình 3.2) cấu tạo từ aeroten 6, nước vào aeroten qua van 1 và lưu lượng kế 2. Sự không đổi của mức nước trong aeroten được giữ bởi bình cân bằng 12. Việc thông khí được thực hiện bằng không khí cấp bởi máy thổi khí 11 qua van 10, lưu lượng kế 9 và các đường ống khí nén nằm ngoài aeroten.



Hình 3.2. Thiết bị nghiên cứu cấu trúc dòng chất lỏng trong aeroten

1. Van cấp nước; 2,9. Lưu lượng kế; 3. Bộ cảm biến điện; 4. Thiết bị nén khí; 5. Bình chứa chất chỉ thị; 6. Aeroten; 7. Thế điện kế điện tử; 8. Dụng cụ đo độ dẫn điện; 10. Van cấp khí; 11. Thiết bị thổi khí; 12. Bình cân bằng.

Để khảo sát chế độ thủy động trong thiết bị aeroten, ở đầu vào của dòng chất lỏng, người ta cấp dung dịch KCl bằng thiết bị nén khí (4). Sự thay đổi nồng độ muối KCl ở các hành lang aeroten được ghi lại trên băng giấy nhờ thế điện kế điện tử (7) gắn với bộ cảm biến điện dẫn (3) và dụng cụ đo độ dẫn điện (8).

* Phương pháp nghiên cứu

Sử dụng phương pháp nhiễu xạ (hàm số Dirac δ) và ở 3 điểm theo chiều dài thiết bị (A_1 , A_2 , A_3) ghi các đường cong C.

* Thứ tự thực hiện thí nghiệm

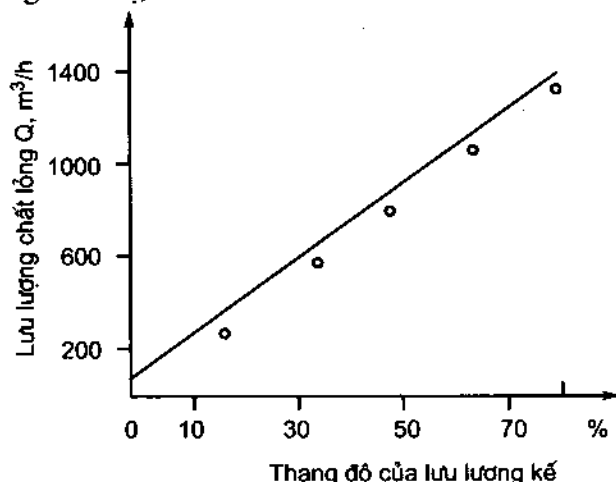
1. Mở van (1) và thiết lập lưu lượng nước yêu cầu theo lưu lượng kế (2).
2. Làm đầy aeroten (6) đến mức yêu cầu.
3. Mức nước trong thiết bị giữ nhờ bình cân bằng (12).
4. Mở thiết bị thông khí (11).
5. Mở nguồn của dụng cụ đo độ dẫn điện (8) và chiết áp điện tử (7).
6. Chuẩn bị chất chỉ thị – dung dịch KCl nồng độ 0,2g/l.

7. Đổ dung dịch đã chuẩn bị vào bình (5) và mở van cấp khí nén.
 8. Đưa chất chỉ thị vào dòng chất lỏng, trên băng giấy đánh dấu thời gian cấp (áp suất trong bình 5 phải là 0,2 MPa).
 9. Tiến hành ghi các đường cong đáp ứng trên nhiều dạng xung ở 3 điểm.
- Để giảm sai số trong việc xác định các thông số của mô hình, cần sao cho khoảng thời gian thí nghiệm t_c phải là: $t_c = 3 \bar{t} = 3V/Q$

Trong đó:

V – thể tích chất lỏng trong thiết bị,

Q – lưu lượng nước (đường chuẩn độ trên hình 3.3).



Hình 3.3. Đồ thị chuẩn độ lưu lượng kế chất lỏng

10. Đo tốc độ băng giấy của thế điện kế (7).

** Đóng thiết bị*

1. Đóng van (1) cấp nước vào aeroten.
2. Đóng thiết bị thổi khí (11), thế điện kế (7) và dụng cụ đo độ dẫn điện (8).
3. Đổ nước khỏi thiết bị qua bình cân bằng (12).

** Phân tích và xử lý kết quả thực nghiệm*

1. Đối với cả 3 đường cong C vừa nhận được, sử dụng máy vi tính để tính thời gian lưu trung bình và phương sai vô thứ nguyên ở 3 điểm A_1 , A_2 , A_3 theo các công thức:

$$\bar{t}_{1,2,3} = \frac{\int_0^{\infty} t c(t) dt}{\int_0^{\infty} c(t) dt} = \frac{\sum_{i=1}^n t_i C_i}{\sum_{i=1}^n C_i}$$

$$\sigma_{\theta_{1,2,3}}^2 = \frac{\int_0^\infty t^2 c(t) dt}{\int_0^\infty c(t) dt} - 1 \quad (3.7)$$

2. Theo đường cong C điểm A₃ tính lượng chất chỉ thị đưa vào g

$$g = Q \int_0^\infty C(t) dt \approx Q \sum_{i=1}^n C_i \Delta t \quad (3.8)$$

Khi xử lí đường cong C, cần lưu ý rằng việc cắt "đuôi" đường cong sẽ dẫn đến sai số lớn đó là tăng chuẩn số Pe hay số hộp N. Sai số phụ thuộc vào tỉ số C_k/C_m (Trong đó, C_k là nồng độ cuối của chất chỉ thị ("đuôi"), còn C_m là nồng độ lớn nhất của chất chỉ thị):

C _k /C _m	0,1	0,01	0,001
Sai số, %	60,0	9,0	2,0

Vì ở điều kiện thực tế aeroten (hình 3.2) C_m ≈ 0,2 g/l nên C_k cần phải là 0,002 g/l.

3. Tính thời gian lưu trung bình $\bar{t}$ và lượng chất chỉ thị đưa vào g theo các công thức:

$$\bar{t} = V_s/Q \quad (3.9)$$

$$g = c_c q_c t_c \quad (3.10)$$

Trong đó: q_c, c_c, t_c – lưu lượng, nồng độ và thời gian cấp chất chỉ thị qua thiết bị nén (12).

4. So sánh các giá trị thời gian lưu trung bình $\bar{t}$ và lượng chất chỉ thị g nhận được theo đường cong C thực nghiệm (3.7) và (3.8) với giá trị tính toán theo các công thức (3.9) và (3.10). Đánh giá sự có mặt trong aeroten các vùng chết, chảy qua, tuần hoàn có tính tới sai số của các số liệu thực nghiệm.

5. Tính số hộp của mô hình dãy hộp cấu trúc dòng trong thiết bị theo đường cong C tại điểm A₃ theo công thức

$$N = \frac{1}{\sigma_{\theta_1}^2}$$

6. So sánh đường cong C của điểm A₃ (hình 3.2) với đường cong C lí thuyết xây dựng theo biểu thức:

$$C = \frac{C_c N^N t^{N-1}}{t^{N-1} (N-1)!} \exp\left(-\frac{Nt}{t}\right)$$

Trong đó: $c_c = g/V_s$

7. Tính các thông số của mô hình khuếch tán. Để loại bỏ sai số liên quan đến khó khăn cấp xung chính xác (lí tưởng), tìm hàm phân bố như là hiệu của các phương sai cho 2 điểm theo chiều dài aeroten A₁ và A₂:

$$\Delta\sigma_\theta^2 = \sigma_{\theta_2}^2 - \sigma_{\theta_1}^2$$

Đối với thiết bị chiều dài có hạn (xem phần 2.1.1, phương trình (3.4) ở điều kiện $Z_{n-1} = 0$) tức là aeroten, quan hệ giữa chuẩn số Pe đặc trưng cho khuấy trộn dọc với giá trị phương sai vô thứ nguyên $\Delta\sigma_\theta^2$ như sau:

$$\Delta\sigma_\theta^2 = \frac{\Delta\sigma_t^2}{\left(\frac{t_2}{t_1}\right)^2} = \frac{2}{Pe} + \frac{1}{Pe} [\exp(-2Pe) + 4 \exp(-Pe) + 4Pe \cdot \exp(-Pe) - 5] \quad (3.11)$$

Công thức (3.11) là phương trình chính xác của liên hệ Pe và $\Delta\sigma_\theta^2$. Ở những giá trị Pe lớn số hạng thứ hai có thể bỏ qua. Sai số tính toán chuẩn số Pe khi bỏ số hạng thứ hai khoảng 2,5% với Pe = 100 và 25% với Pe = 10. Do trong thiết bị thí nghiệm chuẩn số Pe < 10 nên cần tính theo công thức (3.11).

8. Tính hệ số khuấy trộn dọc D, m²/s:

$$D = \frac{ul}{Pe}$$

Trong đó:

u – tốc độ trung bình của chất lỏng trong aeroten (m/s);

l – khoảng cách giữa các bộ cảm biến A₂ và A₁, m.

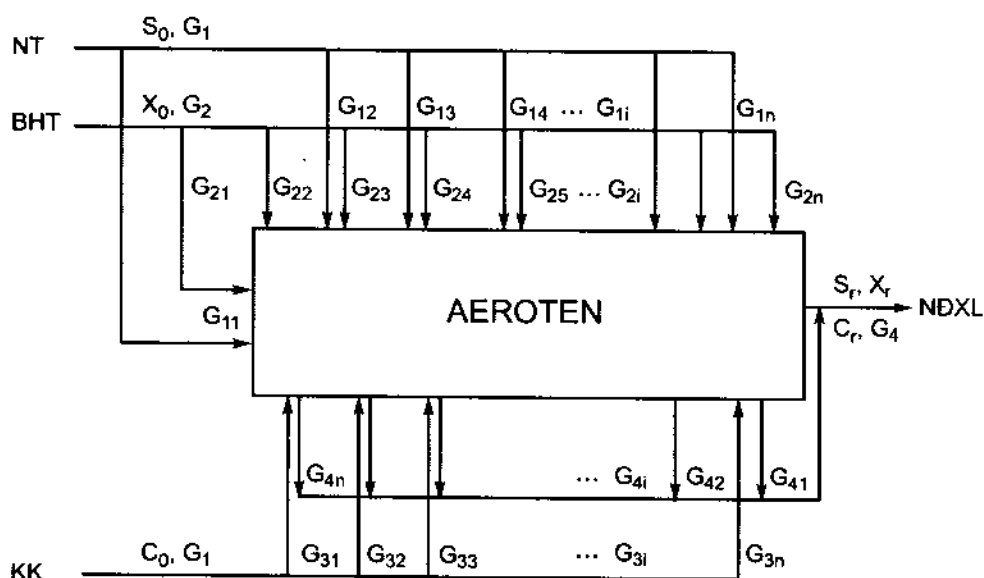
9. So sánh các thông số của mô hình toán học theo phương trình liên hệ chính xác bằng cách thay vào phương trình giá trị chuẩn số Pe:

$$\frac{1}{N} = \frac{2}{Pe} - \frac{2}{Pe^2} + \frac{2 \exp(-Pe)}{Pe^2}$$

Số liệu cần cho tính toán: $u = 0,0074 \text{ m/s}$; $l = 0,9 \text{ m}$; $Q = 0,6 \text{ m}^3/\text{h}$; $V_a = 0,1 \text{ m}^3$; $q_c = 18,6 \text{ ml/s}$; $t_c = 15 \text{ s}$; $c_c = 30 \text{ g/l}$.

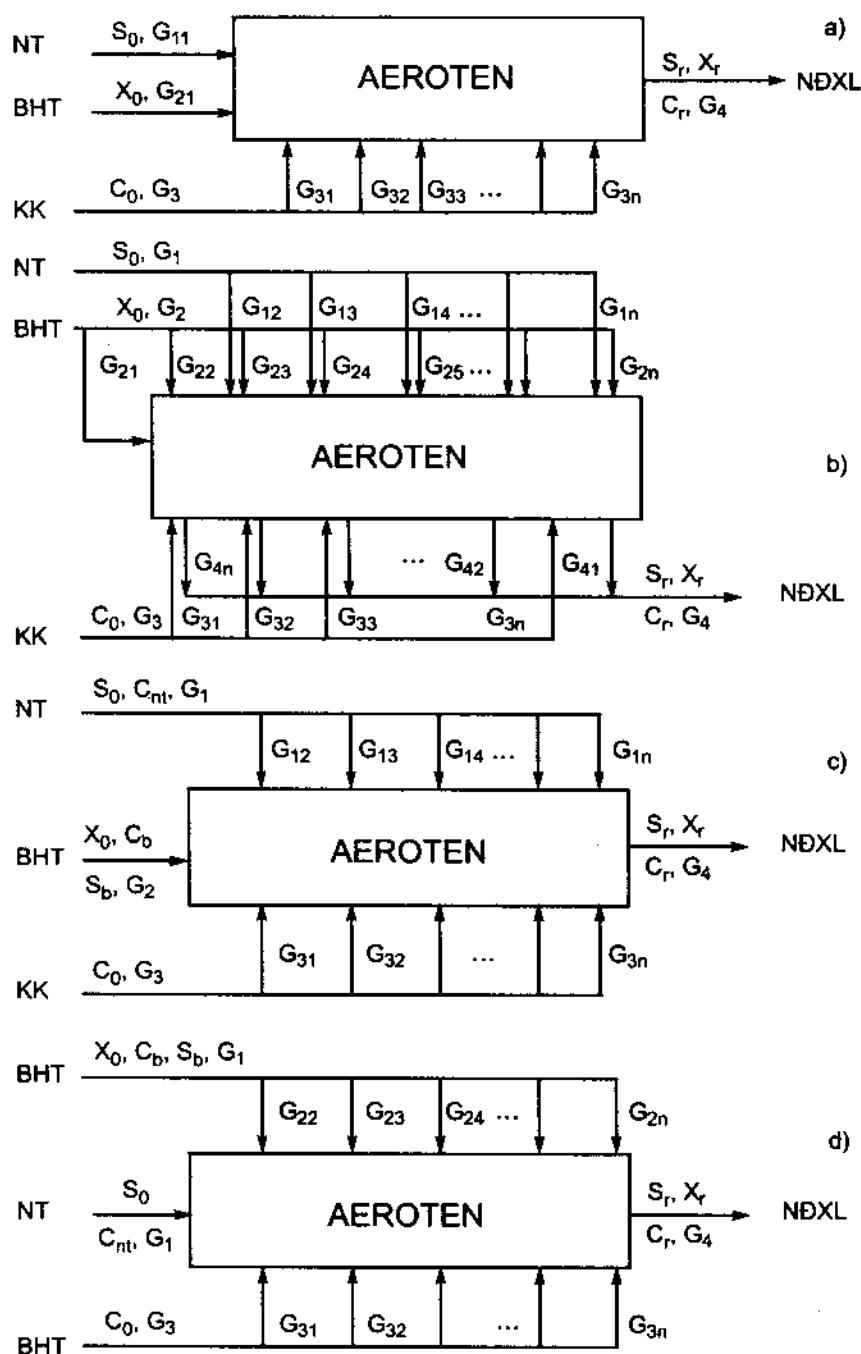
3.1.3. Mô hình thủy động của aeroten

Giả sử sơ đồ tổng quát các phương án khả dĩ tổ chức dòng trong aeroten như hình 3.4.



Hình 3.4. Sơ đồ tổng quát tổ chức dòng của aeroten

NT – nước thải; BHT – bùn hoạt tính; NDXL – nước đã xử lý; KK – không khí; G_1 – lưu lượng tổng nước thải cấp vào aeroten (m^3/h); G_2 – lưu lượng tổng bùn cấp vào aeroten (m^3/h); G_3 – lưu lượng tổng không khí cấp vào aeroten (m^3/h); G_4 – tổng lưu lượng nước thải đã xử lý (m^3/h); G_{1i} , G_{2i} , G_{3i} – tương ứng là lưu lượng nước thải, bùn hoạt tính và không khí cấp vào aeroten ở từng điểm i (m^3/h); G_{4i} – lượng nước thải đã xử lý lấy ra từ điểm i (m^3/h); S_0 , X_0 , C_0 – nồng độ nước thải theo BOD₅, bùn hoạt tính và lượng ôxi trong không khí ở đầu vào aeroten (g/m^3); S_i , X_i , C_i – cũng thế nhưng ở đầu ra aeroten (g/m^3).



Hình 3.5. Các phương án tổ chức cấp dòng vào aeroten

S_b – nồng độ dư chất bẩn trong khối bùn (g/m^3); C_b, C_{nt} – nồng độ ôxi trong khối bùn và nước thải (g/m^3); các kí hiệu khác xem hình 3.4.

Tùy thuộc vào giá trị của các đại lượng G_{1i} , G_{2i} và G_{4i} sơ đồ này có thể biến dạng thành những sơ đồ đơn giản hơn. Ví dụ, nếu $G_{1i} = G_{2i} = G_{4i} = 0$, $i = 2, 3, 4, \dots, n$ thì $G_1 = G_{1i}$, $G_2 = G_{2i}$ và $G_4 = G_{4i}$ ứng với chế độ cấp tập trung nước thải và bùn hoạt tính trong trường hợp lấy đi kiểu tập trung nước thải đã xử lí (hình 3.5a). Nếu $G_{1i} = G_{2i} = G_{4i} = 0$ thì

$$\sum_{i=2}^n G_{1i} = G_1; \sum_{i=2}^n G_{2i} = G_2 \text{ và } \sum_{i=1}^n G_{4i} = G_4$$

tương ứng chế độ cấp phân tán nước thải và bùn hoạt tính trong trường hợp lấy đi kiểu phân tán nước thải đã xử lí (hình 3.5b). Nếu

$$\sum_{i=2}^n G_{1i} = G_{2i} = \sum_{i=2}^n G_{4i} = 0$$

thì hoạt động của aeroten được thực hiện ở chế độ với việc cấp phân tán nước thải và lấy đi kiểu tập trung chất lỏng đã làm sạch (hình 3.5c). Nếu

$$G_{1i} = \sum_{i=2}^n G_{2i} = \sum_{i=2}^n G_{4i} = 0$$

thì thực hiện cấp tập trung nước thải với cấp phân tán bùn hoạt tính và lấy đi kiểu tập trung chất lỏng đã làm sạch (hình 3.5d).

Để đưa ra phương trình mô hình của aeroten ở dạng tổng quát ta thành lập cân bằng chất cho phần tử thiết bị dl như trên hình 3.6 theo cơ chất (S), bùn hoạt tính (X) và ôxi (C).

$$GS + FD \frac{dS}{dl} + FD \frac{d^2S}{dl^2} dl + S_0 v_1(l) dl - FD \frac{dS}{dl} - GS -$$

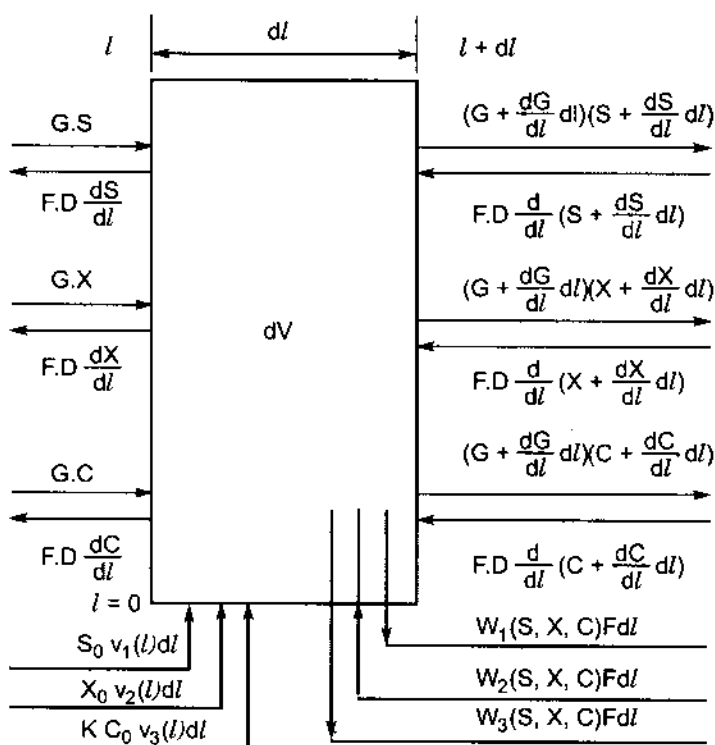
$$G \frac{dS}{dl} dl - S \frac{dG}{dl} dl - \frac{dG}{dl} \frac{dS}{dl} dl^2 - W_1(S, X, C) F dl = 0$$

$$GX + FD \frac{dX}{dl} + FD \frac{d^2X}{dl^2} dl + X_0 v_2(l) dl - FD \frac{dX}{dl} - GX -$$

$$G \frac{dX}{dl} dl - X \frac{dG}{dl} dl - \frac{dG}{dl} \frac{dX}{dl} dl^2 - W_2(S, X, C) F dl = 0$$

$$GC + FD \frac{dC}{dl} + FD \frac{d^2C}{dl^2} dl + KC_0 v_3(e) dl - FD \frac{dC}{dl} - GC -$$

$$G \frac{dC}{dl} dl - C \frac{dG}{dl} dl - \frac{dG}{dl} \frac{dC}{dl} dl^2 - W_3(S, X, C) F dl = 0$$



Hình 3.6. Phần tử thiết bị aeroten để lập cân bằng chất

Rút gọn các số hạng giống nhau trong hệ phương trình này, bỏ các số hạng $\frac{dG}{dl} \frac{dS}{dl} dl^2$, $\frac{dG}{dl} \frac{dX}{dl} dl^2$, $\frac{dG}{dl} \frac{dC}{dl} dl^2$, chia tất cả cho Fdl và đưa vào kí hiệu $\frac{G}{F} = u$ (trong đó u – vận tốc tuyến tính của dòng trong aeroten, m/s), ta được mô hình toán học của quá trình làm sạch nước thải bằng phương pháp sinh học trong aeroten:

$$\begin{aligned}
 D \frac{d^2 S}{dl^2} + S_0 \frac{v_1(l)}{F} - u \frac{dS}{dl} - S \frac{dU}{dl} - W_1(S, X, C) &= 0 \\
 D \frac{d^2 X}{dl^2} + X_0 \frac{v_2(l)}{F} - u \frac{dX}{dl} - X \frac{dU}{dl} - W_2(S, X, C) &= 0 \\
 D \frac{d^2 C}{dl^2} + KC_0 \frac{v_3(l)}{F} - u \frac{dC}{dl} - C \frac{dU}{dl} - W_3(S, X, C) &= 0
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

với các điều kiện biên:

$$\text{Khi } l = 0 \quad D \frac{dS}{dl} = u(S - S_0)$$

$$D \frac{dX}{dl} = u(X - X_0)$$

$$D \frac{dC}{dl} = u(C - C_0)$$

$$\text{Khi } l = L \quad \frac{dS}{dl} = \frac{dX}{dl} = \frac{dC}{dl} = 0$$

Đại lượng D đặc trưng khuấy trộn dọc (ở m^2/h) là thông số của mô hình.

3.1.3.1. Mô hình đẩy lí tưởng

Hệ phương trình (3.12) với các điều kiện biên là mô hình toán học của quá trình xử lí nước thải bằng phương sinh học trong aeroten đối với trường hợp tổng quát tổ chức dòng mà (tổ chức dòng) có thể biến dạng được ra những dạng đơn giản. Ví dụ, nếu các đại lượng D , $v_1(l)$ và $v_2(l)$ bằng không thì mô hình toán học (3.12) tương ứng chế độ đẩy lí tưởng với cấp tập trung nước thải và bùn hoạt tính (hình 3.5a) và được ghi ở dạng dưới đây :

$$\begin{aligned} u \frac{dS}{dl} - W_1(S, X, C) &= 0 \\ u \frac{dX}{dl} + W_2(S, X, C) &= 0 \\ u \frac{dC}{dl} - W_3(S, X, C) - \frac{KC_0 v_3(l)}{F} &= 0 \end{aligned} \quad (3.13)$$

với điều kiện biên:

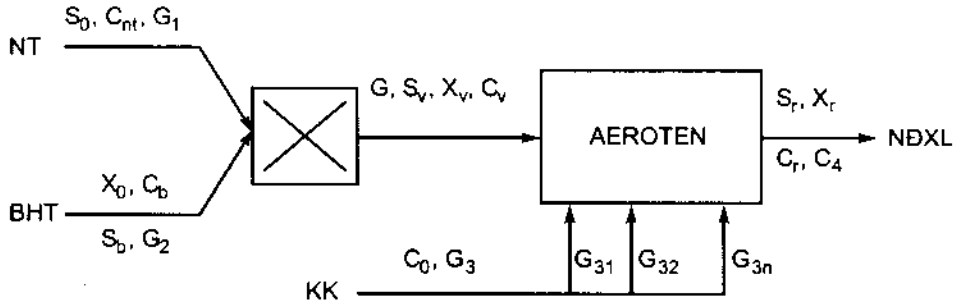
$$\text{Khi } l = 0, S = S_v; X = X_v; C = C_v$$

Trong đó: S_v , X_v , C_v – nồng độ nước thải, bùn hoạt tính và ôxi ở dạng đầu vào thiết bị aeroten tương ứng với hình 2.7 được tính như sau:

$$\begin{aligned} S_v &= (S_0 G_1 + S_b G_2) / (G_1 + G_2) \\ X_v &= (X_0 G_2) / (G_1 + G_2) \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$C_v = (G_1 C_n + G_2 C_b) / (G_1 + G_2)$$

Trong đó: C_b – nồng độ ôxi ở trong khối bùn, g/m^3 ; C_n – nồng độ ôxi ở trong nước thải, g/m^3 ; S_b – nồng độ chất bẩn còn lại trong khối bùn, g/m^3 .



Hình 3.7. Cấp tập trung nước thải và bùn hoạt tính

3.1.3.2. Mô hình khuếch tán một tham số

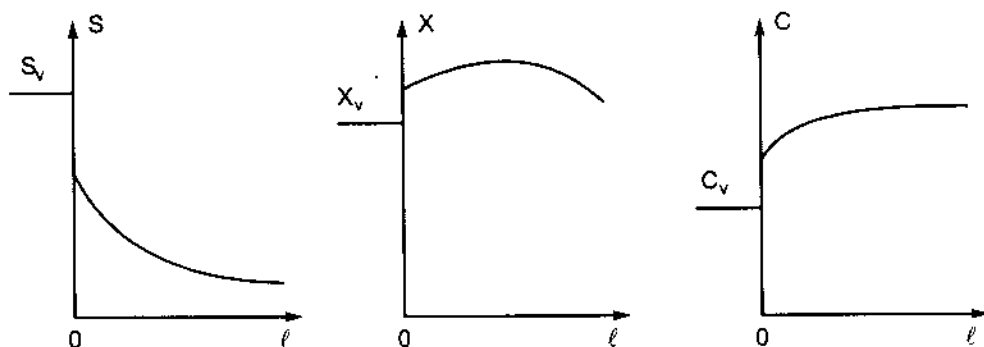
Nếu trong hệ (3.12) $D \neq 0$ còn $v_1(l) = v_2(l) = 0$ thì mô hình toán học chuyển thành mô hình khuếch tán một tham số

$$\begin{aligned} D \frac{d^2 S}{dl^2} - u \frac{dS}{dl} - W_1(S, X, C) &= 0 \\ D \frac{d^2 X}{dl^2} - u \frac{dX}{dl} - W_2(S, X, C) &= 0 \\ D \frac{d^2 C}{dl^2} - u \frac{dC}{dl} - W_3(S, X, C) - \frac{KC_0 v_3(l)}{F} &= 0 \end{aligned} \quad (3.15)$$

với điều kiện biên:

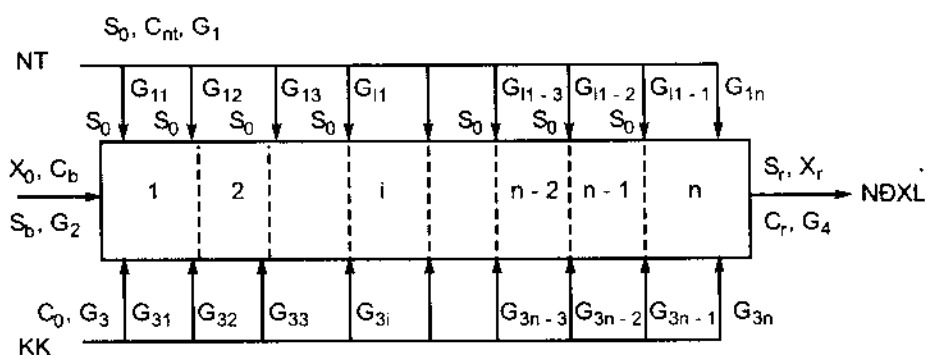
$$\begin{aligned} \text{Khi } l = 0 \quad D \frac{dS}{dl} &= u(S - S_v) \\ D \frac{dX}{dl} &= u(X - X_v) \\ D \frac{dC}{dl} &= u(C - C_v) \\ \text{Khi } l = L \quad \frac{dS}{dl} = \frac{dX}{dl} = \frac{dC}{dl} &= 0 \end{aligned} \quad (3.16)$$

Ở điều kiện biên (3.16) S, X, C – nồng độ chất bẩn, bùn hoạt tính và ôxi trong aeroten khi $l = 0$ (hình 3.8). Giá trị của các đại lượng S_v, X_v, C_v xác định theo biểu thức (3.14). Cách đặt điều kiện biên như thế gây phức tạp nhất định khi lấy tích phân hệ phương trình (3.15) bởi vì các giá trị S, X, C khi $l = 0$ không biết trước. Phương pháp giải vì thế mà sẽ là dò tìm, cụ thể sẽ được sử dụng ở các phần tiếp theo.



Hình 3.8. Sự thay đổi nồng độ cơ chất, bùn hoạt tính và ôxi theo chiều dài aeroten

3.1.3.3. Mô hình aeroten cho trường hợp cấp phân tán nước thải



Hình 3.9. Sơ đồ cấp phân tán nước thải (kí hiệu xem hình 3.5)

Trên hình 3.9 biểu diễn cấu trúc dòng trong trường hợp cấp phân tán nước thải, cấp tập trung bùn hoạt tính và lấy đi tập trung nước đã làm sạch (tương ứng hình 3.5c).

Tốc độ tuyến tính u trong aeroten thay đổi một cách rời rạc ở từng điểm cấp vào của nước thải. Ngoài ra, từng điểm vào của nước thải do sự pha loãng sẽ gây cho hệ thống nhiều bổ sung thể hiện ở thay đổi nồng độ cơ chất, bùn hoạt tính và ôxi. Giả sử aeroten cấu tạo từ n hộp (ngăn) trong đó n là số điểm vào của nước thải. Khi đó chiều dài mỗi hộp sẽ là $l = L/n$. Thường có các trường hợp khi đại lượng l khả ước (cùng bậc) với chiều rộng B và chiều cao H của aeroten.

Trong trường hợp khuấy trộn đủ mạnh (sơ đồ này thường sử dụng khi nồng độ chất bẩn cao) có thể giả thiết rằng trạng thái thủy động ở từng hộp sẽ tương ứng chế độ trộn lí tưởng. Sự trao đổi dòng giữa các hộp được thực hiện vừa do tốc độ tuyến tính của dòng vừa do khuấy trộn dọc.

Ta hãy xem xét nguyên tắc làm việc của sơ đồ như vậy. Dòng nước thải G_{11} với nồng độ S_0 đi vào hộp thứ nhất bị pha loãng bởi bùn hoạt tính G_2 với nồng độ S_0 và bởi nước đã làm sạch DF/l (đại lượng dòng ngược với nồng độ S_2 đi từ hộp thứ hai). Đồng thời, từ hộp thứ nhất nước đã làm sạch ở lượng $Q_1 = G_2 + G_{11}$ và $g = F.D/l$ với nồng độ S_1 chuyển sang hộp thứ hai.

Lí giải tương tự cho hộp thứ i có thể chỉ ra rằng từ kênh phân bố đi vào nó (hộp i) có nước thải G_{1i} với nồng độ S_0 , dòng nước đã làm sạch từ hộp $i-1$: $Q_{i-1} = G_2 + \sum_{j=1}^{i-1} G_{1j}$ với nồng độ S_{i-1} và dòng g từ hộp $(i+1)$ với nồng độ S_{i+1} . Đến lượt mình từ hộp i chuyển về các hộp lân cận các dòng $Q_i = G_2 + \sum_{j=1}^i G_{1j}$ và $2g$ với nồng độ S_i . Kèm theo đó nồng độ chất bẩn ở từng hộp sẽ giảm đi do việc ôxi hoá cơ chất bởi vi sinh vật. Từ những điều nói trên cân bằng chất theo cơ chất đối với aeroten (hình 3.9) sẽ có dạng:

$$\begin{aligned} G_2 S_0 + G_{11} S_0 - Q_1 S_1 + DF \frac{S_2 - S_1}{l} - v_1 W_1 (S_1, X_1, C_1) &= 0 \\ \dots \\ Q_{i-1} S_{i-1} + G_{1i} S_0 - Q_i S_i + DF \frac{S_{i-1} - 2S_i + S_{i+1}}{l} - v_i W_i (S_i, X_i, C_i) &= 0 \quad (3.17) \\ \dots \\ Q_{n-1} S_{n-1} + G_{1n} S_0 - Q_n S_n + DF \frac{S_{n-1} - S_n}{l} - v_n W_n (S_n, X_n, C_n) &= 0 \end{aligned}$$

Trong đó: $Q_i = G_2 + \sum_{j=1}^i G_{1j}$; $j = 1, 2, 3, \dots, n$

Cân bằng chất theo bùn hoạt tính đối với aeroten sẽ khác với phương trình (3.17) đặc trưng cân bằng chất theo cơ chất. Sự khác biệt này được giải thích bởi tính chất khác nhau của việc cấp nước thải (phân tán) và bùn hoạt tính (tập trung).

$$\begin{aligned}
 G_2 X_0 - Q_1 X_1 + DF \frac{X_2 - X_1}{l} + v_1 W_2 (S_1, X_1, C_1) &= 0 \\
 \dots \\
 Q_{i-1} X_{i-1} + Q_i X_i + DF \frac{X_{i-1} - 2X_i + X_{i+1}}{l} + v_i W_2 (S_i, X_i, C_i) &= 0 \quad (3.18) \\
 \dots \\
 Q_{n-1} X_{n-1} - Q_n X_n + DF \frac{X_{n-1} - X_n}{l} + v_n W_2 (S_n, X_n, C_n) &= 0
 \end{aligned}$$

Cân bằng chất theo ôxi ta có thể viết nếu tính tới phân bố phân tán của không khí theo toàn bộ chiều dài aeroten và sự có mặt của ôxi hoà tan trong nước thải và bùn hoạt tính cấp vào

$$\begin{aligned}
 G_2 C_b + G_{11} C_{nt} + G_{31} K C_0 - Q_1 C_1 + DF \frac{C_2 - C_1}{l} - v_1 W_3 (S_1, X_1, C_1) &= 0 \\
 Q_{i-1} C_{i-1} + G_{1i} C_{nt} + G_{3i} K C_0 - Q_i C_i + DF \frac{C_{i-1} - 2C_i + C_{i+1}}{l} - & \\
 - v_i W_3 (S_i, X_i, C_i) &= 0 \quad (3.19) \\
 \dots \\
 Q_{n-1} C_{n-1} + G_{1n} C_{nt} + G_{3n} K C_0 - Q_n C_n + DF \frac{C_{n-1} - C_n}{l} - & \\
 - v_n W_3 (S_n, X_n, C_n) &= 0
 \end{aligned}$$

Trong đó: K – hệ số hấp thụ ôxi bởi chất lỏng trong aeroten.

Kết hợp các phương trình (3.17) – (3.19) ta được mô hình toán học của quá trình xử lý nước thải bằng phương pháp sinh học với việc cấp phân tán rồi rọc nước thải và cấp tập trung bùn hoạt tính đối với aeroten thông khí sủi bọt:

$$\begin{aligned}
 G_2 S_b + G_{11} S_0 - Q_1 S_1 + DF \frac{S_2 - S_1}{l} - v_1 W_1 (S_1, X_1, C_1) &= 0 \\
 \dots
 \end{aligned}$$

$$Q_{i-1}S_{i-1} + G_{li}S_0 - Q_iS_i + DF \frac{S_{i-1} - 2S_i + S_{i+1}}{l} - v_i W_1(S_i, X_i, C_i) = 0$$

...

$$Q_{n-1}S_{n-1} + G_{ln}S_0 - Q_nS_n + DF \frac{S_{n-1} - S_n}{l} - v_n W_1(S_n, X_n, C_n) = 0$$

$$G_2X_0 - Q_1X_1 + DF \frac{X_2 - X_1}{l} + v_1 W_2(S_1, X_1, C_1) = 0$$

...

$$Q_{i-1}X_{i-1} + Q_iX_i + DF \frac{X_{i-1} - 2X_i + X_{i+1}}{l} + v_i W_2(S_i, X_i, C_i) = 0 \quad (3.20)$$

...

$$Q_{n-1}X_{n-1} - Q_nX_n + DF \frac{X_{n-1} - X_n}{l} + v_n W_2(S_n, X_n, C_n) = 0$$

$$G_2C_b + G_{li}C_{ni} + G_{3i}KC_0 - Q_iC_i + DF \frac{C_2 - C_1}{l} - v_i W_3(S_i, X_i, C_i) = 0$$

...

$$Q_{i-1}C_{i-1} + G_{li}C_{ni} + G_{3i}KC_0 - Q_iC_i + DF \frac{C_{i-1} - 2C_i + C_{i+1}}{l} - v_i W_3(S_i, X_i, C_i) = 0$$

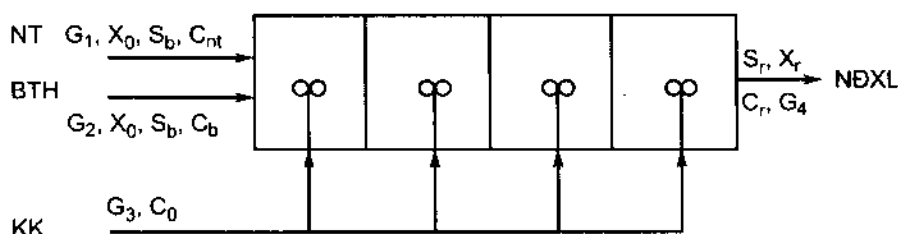
...

$$Q_{n-1}C_{n-1} + G_{ln}C_{ni} + G_{3n}KC_0 - Q_nS_n + DF \frac{C_{n-1} - C_n}{l} - v_n W_3(S_n, X_n, C_n) = 0$$

3.1.3.4. Mô hình aeroten với thông khí cơ học

Sử dụng các máy thông khí cơ học đảm bảo sự san bằng tương đối nhanh nồng độ nước thải cấp vào theo toàn bộ thể tích thiết bị. Điều này rất quan trọng trong trường hợp xử lý nước thải của các xí nghiệp đặc trưng bởi sự có mặt của xung từng đợt chất bẩn nồng độ cao.

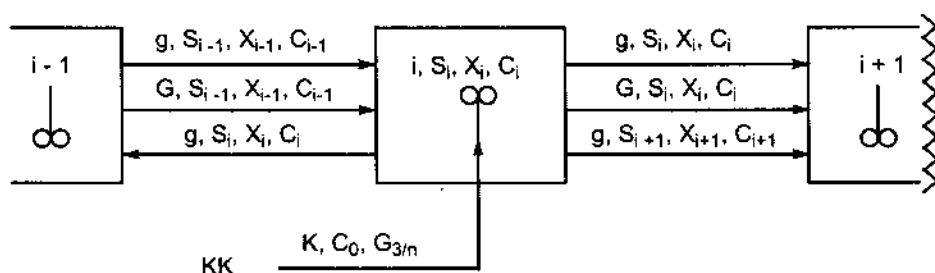
Máy thông khí cơ học đặt ở những aeroten thông thường kiểu hành lang nằm đều theo chiều dài aeroten (hình 3.10).



Hình 3.10. Phân bố các máy thông khí cơ học (kí hiệu xem hình 3.5)

Hoạt động của aeroten cấu trúc như vậy có thể xem xét như hoạt động của aeroten cấu tạo từ n vùng (theo số máy thông khí), sự khuấy trộn ở mỗi vùng là kết quả của khuếch tán rối, còn trao đổi giữa các vùng là kết quả của tuần hoàn.

Để đưa ra phương trình của mô hình ta thành lập cân bằng chất cho hộp thứ i như trên hình 3.11.



Hình 3.11. Hộp thứ i của mô hình dãy hộp với dòng ngược

G – lưu lượng nước thải dòng cơ bản (m^3/h);

g – lưu lượng nước thải tạo ra bởi cánh khuấy (m^3/h).

Ta thiết lập cân bằng chất theo cơ chất, bùn hoạt tính và ôxi:

$$G(S_v - S_1) + g(S_2 - S_1) - v_1 W_1(S_1, X_1, C_1) = 0$$

... ..

$$G(S_{i-1} - S_i) + g(S_{i-1} - S_{i+1}) - 2gS_i - v_i W_1(S_i, X_i, C_i) = 0$$

... ..

$$G(S_{n-1} - S_n) + g(S_{n-1} - S_n) - v_n W_1(S_n, X_n, C_n) = 0$$

$$G(X_v - X_1) + g(X_2 - X_1) + v_1 W_2(S_1, X_1, C_1) = 0$$

... ..

$$G(X_{i-1} - X_i) + g(X_{i-1} - X_{i+1}) - 2gX_i + v_i W_2(S_i, X_i, C_i) = 0$$

... ..

$$G(X_{n-1} - X_n) + g(X_{n-1} - X_n) + v_n W_2(S_n, X_n, C_n) = 0$$

$$G(C_v - C_1) + KC_0G_{31} - v_1W_3(S_1, X_1, C_1) = 0 \quad (3.21)$$

... ..

$$G(C_{i-1} - C_i) + KC_0G_{3i} - v_iW_3(S_i, X_i, C_i) = 0$$

... ..

$$G(C_{n-1} - C_n) + g(C_{n-1} - C_n) + KC_0G_{3n} - v_nW_3(S_n, X_n, C_n) = 0$$

Trong đó: $i = 1, 2, 3, \dots, n$; S_v, X_v, C_v - được xác định như ở (3.14).

Trường hợp riêng của mô hình (3.21) là mô hình aeroten với máy thông khí cơ học không có dòng ngược:

$$G(S_v - S_1) - v_1W_1(S_1, X_1, C_1) = 0$$

... ..

$$G(S_{i-1} - S_i) - v_iW_1(S_i, X_i, C_i) = 0$$

... ..

$$G(S_{n-1} - S_n) - v_nW_1(S_n, X_n, C_n) = 0$$

$$G(X_v - X_1) + v_1W_2(S_1, X_1, C_1) = 0$$

... ..

$$G(X_{i-1} - X_i) + v_iW_2(S_i, X_i, C_i) = 0 \quad (3.22)$$

... ..

$$G(X_{n-1} - X_n) + v_nW_2(S_n, X_n, C_n) = 0$$

$$G(C_v - C_1) + KC_0G_{31} - v_1W_3(S_1, X_1, C_1) = 0$$

... ..

$$G(C_{i-1} - C_i) + KC_0G_{3i} - v_iW_3(S_i, X_i, C_i) = 0$$

... ..

$$G(C_{n-1} - C_n) + KC_0G_{3n} - v_nW_3(S_n, X_n, C_n) = 0$$

Trong đó: $i = \overline{1, n}$

Như vậy, chúng ta nhận được các mô hình toán học (3.13), (3.15), (3.20) và (3.22) đối với các phương pháp khác nhau của việc sục khí và tổ chức dòng trong aeroten. Khi giải những bài toán cụ thể với việc sử dụng các mô hình trên cần có số liệu về động học của quá trình $[W_i(S_i, X_i, C_i); i = 1, 2, 3]$, cấu trúc dòng (D, g) và lượng ôxi hoà tan trong pha lỏng (KC_0G_{3i}).

3.1.4. Động học quá trình sử dụng cơ chất bởi vi sinh vật

Tốc độ quá trình ôxi hoá sinh học các chất hữu cơ trong hệ với bùn hoạt tính được điều chỉnh bởi giai đoạn khuếch tán ôxi và cơ chất chứ không phải

bởi hoạt tính men của hệ vi sinh vật. Tuy nhiên, như đã nói ở trên, trong thành phần của giới vi sinh vật bùn hoạt tính có tới 60 loại vi khuẩn, sau đó chủ yếu là động vật nguyên sinh và trùng bánh xe, ít hơn là giun sán. Vì vậy, hệ sinh vật của bùn hoạt tính đặc trưng bởi vài mức nuôi dưỡng: mức thứ nhất chủ yếu là vi khuẩn dị dưỡng, mức thứ hai: trùng bánh xe, mức thứ ba: các loại dữ ăn vi khuẩn.

Cường độ sử dụng ôxi bởi các vi sinh vật này khác nhau. Ví dụ, những con trùng bánh xe nhỏ trọng lượng trung bình $10^{-3} - 10^{-4}$ mg sử dụng 6,6 mg $O_2/g.h$, còn những con lớn (trọng lượng đến $2.10^{-2}mg$) – 1,3mg $O_2/g.h$. Trong khi đó một con loại dữ trong 1 giờ sử dụng đến 30.000 vi khuẩn. Một mg vi khuẩn (tính theo trọng lượng khô) trong giai đoạn tăng trưởng hàm mũ sử dụng đến 1000 μ l ôxi. Như vậy, sử dụng ôxi liên quan đến không chỉ quá trình ôxi hoá cơ chất bởi vi sinh vật, mà còn đến quá trình sử dụng vi khuẩn bởi động vật nguyên sinh. Hiển nhiên vì vậy mà mô hình toán học phải tính tới cả vai trò của vi sinh vật bùn hoạt tính trong quá trình làm sạch. Động học tăng trưởng vi sinh vật, sử dụng chất bẩn và ôxi hoà tan liên quan lẫn nhau và các phương trình phản ánh quan hệ này được viết ở dạng sau:

$$\begin{aligned}\frac{dS_i}{dt} &= -W_i(S_i, X_1, X_2, \dots, X_m, C) \\ \frac{dX_j}{dt} &= \varphi_j(S_1, S_2, \dots, S_n, X_1, X_2, \dots, X_m, C) \\ \frac{dC}{dt} &= -f(S_1, S_2, \dots, S_n, X_1, X_2, \dots, X_m, C)\end{aligned}\quad (3.23)$$

Trong đó:

S_i – nồng độ cấu tử i trong các chất bẩn, ($i = 1, 2, \dots, n$);

X_j – nồng độ giống vi sinh vật j ($j = 1, 2, \dots, m$);

C – nồng độ ôxi hoà tan trong chất lỏng.

Hệ (3.23) mô tả sử dụng n cấu tử các chất hữu cơ trong quá trình tăng trưởng của m loại vi sinh vật. Trong trường hợp này xảy ra sử dụng ôxi hoà tan và đồng thời cũng có cả quá trình tạo khí.

Đối với trường hợp khi quá trình ôxi hoá sinh hoá không đổi trong khoảng rộng của nồng độ ôxi hoà tan thì hệ (3.23) sẽ có dạng:

$$\begin{aligned}\frac{dS_i}{dt} &= -W_i(S_i; X_1, X_2, \dots, X_m) \\ \frac{dX_j}{dt} &= \varphi_j(S_1, S_2, \dots, S_n, X_1, X_2, \dots, X_m)\end{aligned}\quad (3.24)$$

Do việc tính số lượng vi sinh vật gặp khó khăn, nên số lượng vi sinh vật được xác định bằng nồng độ sinh khối. Khi nồng độ tổng S của các cấu tử chất bẩn đo ở đại lượng tương đương là BOD thì hệ phương trình (3.24) có dạng:

$$\begin{aligned}\frac{dS}{dt} &= -W(S, X) \\ \frac{dX_j}{dt} &= \varphi_j(S, X)\end{aligned}\quad (3.25)$$

Một hướng khác xây dựng mô tả toán học của động học làm sạch nước thải bằng bùn hoạt tính dựa trên (như đã nói ở trên) giả thiết về tỉ lệ thuận khối lượng ôxi sử dụng và cơ chất bị ôxi hoá. Đối với trường hợp này hệ phương trình (3.23) có dạng:

$$\begin{aligned}\frac{dS_i}{dt} &= -W_i(S_i, C) \\ \frac{dC}{dt} &= -f(S_1, S_2, \dots, S_n, C)\end{aligned}\quad (3.26)$$

Như vậy, phương trình (3.25) mô tả động học ôxi hoá cơ chất bằng bùn hoạt tính có tính tới nồng độ vi sinh vật, còn phương trình (3.26) – động học loại bỏ chất bẩn bởi vi sinh vật tính tới nồng độ ôxi. Chúng ta sẽ phân tích các phương trình này để xác định phương trình nào phản ánh đầy đủ hơn và chính xác hơn quá trình thực làm sạch nước thải bằng bùn hoạt tính.

Theo các khái niệm hiện đại, quá trình làm sạch nước thải hợp thành từ các quá trình truyền khối chất hữu cơ từ chất lỏng đến bề mặt tế bào vi khuẩn, khuếch tán chất hữu cơ bên trong tế bào và biến đổi sau đó của nó trong những chu trình trao đổi cấu trúc và năng lượng. Không một phương trình nào trong số các phương trình đã biết mô tả các quy luật này là vạn năng và có thể được sử dụng trong điều kiện thay đổi các thông số của quá trình ở một vùng rộng. Bởi vì, các hằng số của phương trình động học mô tả quá trình làm sạch các loại nước thải khác nhau bởi thành phần và nồng độ

bằng phương pháp sinh hoá cũng phải khác nhau. Chúng ta hãy xem xét từ quan điểm này các mô hình (3.25) và (3.26) và đánh giá các khả năng này của chúng.

Việc tính toán quá trình làm sạch nước thải khỏi chất hữu cơ bằng phương pháp sinh hoá dựa trên cơ sở các quan hệ động học tăng trưởng vi sinh vật bùn hoạt tính (sinh khối) và sử dụng cơ chất bởi vi sinh vật. Người ta chia ra hai quan điểm cơ bản lựa chọn mô hình động học. Trong trường hợp thứ nhất quá trình sử dụng cơ chất được mô tả bằng phương trình động hoá học hình thức bậc không hay bậc n. Trong trường hợp thứ hai sử dụng các phương trình của động học men (enzym).

Phổ biến nhất là các mô hình động học trên cơ sở sơ đồ phản ứng men.

Mô hình Monod

$$\mu(S) = \mu_m \frac{S}{K_1 + S}$$

Trong đó:

K_1 – nồng độ cơ chất khi $\mu = \mu_m/2$ hay hằng số bão hoà;

μ_m – tốc độ tăng trưởng riêng lớn nhất;

S – nồng độ cơ chất (BOD_5) (gO_2/l).

Mô hình Herbert

$$\mu(S) = \mu_m \frac{S}{K_1 + S} - K_2$$

Trong đó:

K_1 – hằng số bão hoà;

K_2 – hằng số tốc độ chết đi của tế bào.

Mô hình Herbert mô tả chi tiết hơn quá trình tăng trưởng của vi sinh vật bùn hoạt tính, sự sử dụng chất hữu cơ và sự chết của tế bào. Các giá trị cụ thể của hằng số bão hoà K_1 và tốc độ tăng trưởng riêng lớn nhất của bùn μ_m được xác định cho nước thải của từng quá trình sản xuất cụ thể.

Nghiên cứu lí thuyết và thực nghiệm quá trình làm sạch nước thải trong biophin cho thấy không chỉ cơ chế ôxi hoá vi khuẩn mà còn cả các quá trình

vật lí của truyền khối ảnh hưởng đến hiệu quả hoạt động của thiết bị. Do nước thải cấp vào biophin thường chứa một tập hợp các chất hữu cơ khác nhau nên màng sinh học phát triển trên một cơ chất như thế có thành phần phức tạp gồm nhiều giống vi sinh vật. Quá trình ôxi hoá chất hữu cơ hoà tan của bùn hoạt tính là phản ứng xúc tác dị thể. Người ta đề xuất một loại mô hình gọi là mô hình khuếch tán để mô tả sự ôxi hoá của những cơ chất riêng biệt bằng màng sinh học. Trong quá trình xử lí chất phản ứng tiếp xúc lúc đầu với bề mặt hạt (phần tử) và sau đó được chuyển vào phía trong nó đến tận trung tâm xúc tác chính là các vi sinh vật có trong thành phần của hạt bùn hoạt tính.

Đối với mô hình khuếch tán có thể đưa ra giả thiết sau:

- 1) hạt bùn hình cầu và đối xứng.
- 2) nồng độ cơ chất trên bề mặt hạt bằng nồng độ cơ chất trong dung dịch (trường hợp trộn lí tưởng).
- 3) các vi sinh vật riêng biệt phân bố đều trong các bông bùn.
- 4) vi khuẩn bùn hoạt tính sử dụng cơ chất theo định luật "tất cả hoặc là không có gì":

$$q(S) = \begin{cases} \mu_m/Y & \text{nếu } S > 0 \\ 0 & \text{nếu } S = 0 \end{cases}$$

Trong đó:

Y – hệ số phản ánh khối lượng các vi sinh vật được tổng hợp từ một đơn vị khối lượng cơ chất được sử dụng;

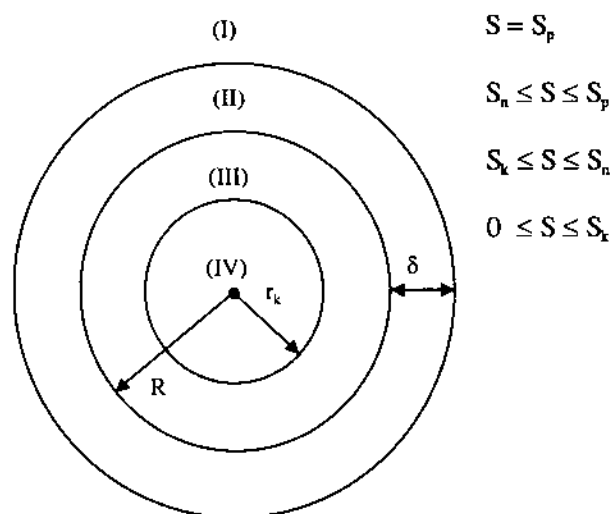
$q(S)$ – tốc độ sử dụng cơ chất bởi một đơn vị sinh khối.

- 5) khoảng cách trung bình giữa trung tâm các hạt bùn lớn hơn nhiều kích thước của hạt.

- 6) tốc độ thiết lập phân bố ổn định của nồng độ cơ chất phía trong hạt bùn lớn hơn nhiều tốc độ ôxi hoá cơ chất.

Lời giải bài toán có thể chính xác nếu sử dụng xấp xỉ tuyến tính từng đoạn của quan hệ Monod cho vi sinh vật trong hạt bùn.

Người ta chia ra 4 vùng phân bố cơ chất ở trong và ngoài hạt bùn (hình 3.12).



Hình 3.12. Sự phân bố cơ chất ở phía trong và ngoài hạt bùn
(xem giải thích trong bài)

I – vùng với nồng độ cơ chất không đổi (δ – chiều dày màng sinh học)

$$r > R + \delta; S = S_p$$

II – vùng của lớp $R \leq r \leq R + \delta; S_n \leq S \leq S_p$

xảy ra sự thay đổi nhanh nồng độ cơ chất ở gần sát bề mặt hạt bùn.

III – vùng ở đó cơ chất được sử dụng với tốc độ cực đại

$$r_k \leq r \leq R; S_k \leq S \leq S_n$$

IV – vùng ở đó tốc độ sử dụng cơ chất tỉ lệ với nồng độ của nó

$$0 \leq r \leq r_k; 0 \leq S \leq S_k$$

Chiều dày lớp khuếch tán phụ thuộc vào cường độ khi khuấy trộn môi trường ở điều kiện lí tưởng.

Đối với các vùng III và IV các phương trình mô tả quá trình khuếch tán ổn định có dạng:

$$\Delta_r S = (d_c \mu_m / Y D_M S_n) S, \quad r_k \leq r \leq R$$

$$\Delta_r S = (d_c \mu_m / Y D_M S_k) S, \quad 0 \leq r \leq r_k$$

Trong đó:

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \text{toán tử Laplace trong hệ tọa độ cầu};$$

D_M – hệ số khuếch tán phân tử của chất ở trong bông;

d_c – khối lượng riêng sinh khối khô trong hạt bùn.

Phải tuân thủ các điều kiện biên sau:

$$r = R \rightarrow S = S_p; \quad r = r_0 \begin{cases} S = 0 \\ \frac{dS}{dr} = 0 \end{cases}$$

Trong đó:

r – khoảng cách tới tâm của hạt; R – bán kính hạt;

r_0 – khoảng cách tới tâm của hạt khi nồng độ cơ chất trở nên bằng 0.

Như vậy, khi $r = r_0$ dòng các hạt bùn cũng biến mất.

Phương trình động học theo mô hình Herbert có dạng:

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= -\alpha \mu_m \frac{S.X}{K_1 + S} \\ \frac{dX}{dt} &= \mu_m \frac{S.X}{K_1 + S} - K_2 X \end{aligned} \quad (3.27)$$

Đối với quá trình ôxi hoá cơ chất bởi vi sinh vật, khi tính tới nồng độ các chất hữu cơ trong nước thải và nồng độ ôxi hoà tan trong thiết bị thông khí, phương trình động học có dạng:

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= -\frac{1}{\gamma} \beta C^* \frac{C^*}{C^* - C} \frac{S^2}{S_0^2} \\ \frac{dC}{dt} &= -\beta C^* \frac{C^*}{C^* - C} \frac{S^2}{S_0} + \beta (C^* - C) \end{aligned} \quad (3.28)$$

Trong đó:

β – hệ số truyền khối (h^{-1}); C^* – nồng độ bão hoà ôxi trong chất lỏng (g/m^3);

γ – hệ số năng lượng ($kg/(kg.s)$); α – hằng số ($g \text{ BOD}/g \text{ bùn}$).

Trong công trình của V.Vavilin đưa ra những giá trị sau về các hằng số của mô hình Herbert nhận được khi xử lý nước thải đến mức $S_k = 10 \text{ g/m}^3$ với nồng độ đầu $S_0 = 1000 \text{ gBOD/m}^3$ và nồng độ trung bình của bùn trong aeroten $X = 2000 \text{ g/m}^3$:

$$\mu_m = 0,11 \text{ h}^{-1}; \alpha = 2,0 \text{ gBOD/g bùn}; K_1 = 100 \text{ gBOD/m}^3; K_2 = 0,005 \text{ h}^{-1}$$

Trong khi đó Moser khi khảo sát các thông số của mô hình này lại nhận được những kết quả khác:

$$\mu_m = 0,09 \text{ h}^{-1}; \alpha = 1,67 \text{ gBOD/g bùn}; K_1 = 400 \text{ gBOD/m}^3; K_2 = 0,002 \text{ h}^{-1}$$

Ta thấy rằng giá trị của các hệ số α , μ_m , K_1 và K_2 khác nhau đáng kể. Đáng tiếc là ở cả hai công trình đều không chỉ rõ tính toán tiến hành cho loại nước thải nào. Ví dụ, hệ số α đặc trưng cho quan hệ trực tiếp giữa sử dụng cơ chất $(S_0 - S)$ và tăng trưởng của vi khuẩn:

$$\alpha = (S_0 - S)/(X - X_0)$$

đối với trường hợp làm sạch nước thải sinh hoạt sẽ khác đáng kể các giá trị cho trường hợp khi mô tả quá trình làm sạch nước thải công nghiệp đặc biệt cho công nghiệp giấy xenlulozơ. Sự khác biệt này được giải thích trước hết bởi trong thành phần nước thải công nghiệp giấy xenlulozơ còn có những chất khó ôxi hoá và chỉ bị phân huỷ bởi những loại vi khuẩn và nấm nhất định. Tốc độ tăng trưởng và sinh trưởng các vi sinh vật này cũng khác nhau. Vì vậy, α không thể được xem như là hằng số, hệ số này cần được xác định cho loại cơ chất nhất định và loại vi sinh vật cụ thể.

Kết quả tính toán sử dụng cơ chất bởi vi sinh vật theo mô hình Herbert (3.27) đối với trường hợp khi nồng độ cơ chất $S = 240 \text{ g/m}^3$ theo BOD₅ và nồng độ bùn hoạt tính $X = 2200 \text{ g/m}^3$ đã cho những đặc trưng về lượng phản ánh ảnh hưởng của các hằng số α , μ_m , K_1 và K_2 đến quá trình làm sạch nước thải.

Nghiên cứu thực nghiệm chỉ ra rằng, việc giảm α kéo theo sự giảm tốc độ sử dụng cơ chất và tăng tốc độ tăng trưởng sinh khối. Ở giá trị $\alpha = 1,5$ quan sát thấy loại bỏ nhanh các chất hữu cơ. Chỉ sau 1,4 giờ nồng độ cơ chất theo BOD đã giảm từ 240 xuống 10 g/m^3 , còn ở $\alpha = 0,9$ độ sâu xử lý như vậy chỉ đạt được sau 3 giờ. Ở $\alpha = 0,5$ chỉ sau 1,4 giờ kể từ khi bắt đầu phản ứng nồng độ chất bẩn mới giảm xuống đến 128 g/m^3 đối lập với 90 g/m^3 ở $\alpha = 0,9$ và 10 g/m^3 ở $\alpha = 1,5$ đã nói ở trên.

Sự tăng tốc độ tăng trưởng của sinh khối với $\alpha = 1,5$ chấm dứt sau 1,4 giờ bởi vì đến thời điểm này hầu hết khối cơ chất cơ bản đã được sử dụng, với $\alpha = 0,7$ sự tăng trưởng sinh khối chấm dứt chỉ vào cuối giờ thứ ba. Trong trường hợp $\alpha = 0,5$ sự tăng trưởng sinh khối còn tiếp tục cả sau ba giờ. Trong quá trình làm sạch nước thải bằng phương pháp sinh học bùn hoạt tính đóng vai trò cơ bản.

Tính toán và phân tích tương tự được tiến hành theo tất cả các hằng số còn lại của phương trình động học Herbert. Phân tích chỉ ra rằng trong trường hợp lựa chọn thích hợp các giá trị α , μ_m , K_1 và K_2 động học theo mô hình Herbert có thể được sử dụng một cách hiệu quả để mô tả quá trình làm sạch các loại nước thải với thành phần đa dạng bằng phương pháp sinh hoá. Khi ấy giả thiết rằng nồng độ ôxi trong nước đã làm sạch nằm ở các giới hạn tiêu chuẩn. Sự phân tích tương tự được tiến hành cho mô hình (3.28) dựa trên giả thiết về sự phụ thuộc của quá trình làm sạch nước thải bằng phương pháp sinh hoá vào nồng độ ôxi. Kết quả tính toán cho thấy lượng không khí cấp để đảm bảo cường độ khuấy trộn đủ mạnh và phân bố đều bùn hoạt tính trong aeroten là hoàn toàn đủ cho quá trình ôxi hoá cơ chất bởi vi sinh vật. Do đó, không cần thiết phải tăng lưu lượng không khí và tính tới lượng ôxi trong các phương trình tính toán.

3.2. MÔ HÌNH TOÁN HỌC CỦA QUÁ TRÌNH XỬ LÝ NƯỚC THẢI BẰNG BIOPHIN

Khả năng làm sạch của biophin (bể lọc sinh học) ở mức độ đáng kể phụ thuộc vào những yếu tố khác nhau liên quan đến các đặc trưng kĩ thuật của đệm, các chỉ số công nghệ và điều kiện hoạt động.

Các đặc trưng kĩ thuật của đệm ảnh hưởng trực tiếp đến hiệu quả làm sạch gồm: bề mặt riêng và độ rỗng của đệm, cấu hình của các phần tử đệm và những điều kiện tương ứng để thấm ướt nó.

Nhiều chuyên gia cho rằng việc thành lập mô hình toán học mô tả tác động của biophin là bài toán rất khó, còn những mô hình mô tả trong các tài liệu vẫn chưa mang lại những kết quả chính xác. Những năm gần đây các mô hình toán học dựa trên cơ sở động học tăng trưởng vi sinh vật được đánh giá cao hơn, kể cả các mô hình toán học dựa trên các quá trình trao đổi chất xảy ra trong biophin.

Để đưa ra mô hình toán học dựa trên cơ sở tăng trưởng của vi sinh vật, người ta giả thiết rằng mỗi một tiết diện ngang là một thiết bị sinh học giả đồng thể. Như vậy chấp nhận rằng tốc độ phản ứng xảy ra trong màng sinh học được biểu thị qua tốc độ sử dụng cơ chất r_{su} trong tiết diện xem xét.

Cân bằng chất cho một phần tử chiều dài dZ có thể biểu diễn như sau:

$$\begin{aligned} QS - Q(S + dS) + r_{su} V_b &= 0 \\ \text{hay} \quad -QdS + r_{su} V_b &= 0 \end{aligned} \quad (3.29)$$

Trong đó:

Q – lượng nước thải cấp vào biophin (m^3/h);

S – nồng độ cơ chất trong tiết diện xem xét (g/m^3);

dS – sự thay đổi nồng độ cơ chất (g/m^3);

V_b – thể tích sinh khối (m^3).

Tốc độ sử dụng cơ chất r_{su} có thể biểu thị bằng phương trình:

$$r_{su} = -\mu_m XS / [Y(K_1 + S)] \quad (3.30)$$

Thể tích sinh khối hoạt tính trong đó xảy ra các phản ứng sinh hoá là

$$V_b = \delta F_s A dZ \quad (3.31)$$

F_s – bề mặt riêng của đệm (m^2/m^3); A – diện tích tiết diện ngang (m^2).

Thay (3.30) và (3.31) vào phương trình cân bằng (3.29) ta có:

$$QdS + \left\{ \mu_m XS / [Y(K_1 + S)] \right\} \delta F_s A dZ = 0 \quad (3.32)$$

Sau khi lấy tích phân phương trình (3.32) ở chiều dày màng δ không đổi, nồng độ cơ chất thay đổi từ S_i ở $Z = 0$ đến S_l ở $Z = Z_l$, kết quả ta được:

$$Q(S_l - S_i) + K_1 Q \ln \frac{S_l}{S_i} + \mu_m X \delta F_s A Z_l / Y = 0$$

Trong đó: S_i , S_l – nồng độ cơ chất trước đầu vào và ở đầu ra khỏi biophin.

Coi $P = \mu_m \delta X / Y$ sau khi biến đổi ta được:

$$\ln \frac{S_l}{S_i} = \frac{S_i - S_l}{K_1} - \frac{P F_s A Z_l}{Q K_1}$$

Các thông số P và K_L có thể xác định bằng thực nghiệm, chúng phụ thuộc vào tải trọng thủy lực của biophin.

Nếu chấp nhận tốc độ quá trình sinh hoá biểu thị qua trao đổi chất của cơ chất trên ranh giới phân cách các lớp chất lỏng – sinh khối thì cân bằng chất trong thể tích phần tử của đệm lọc có thể biểu diễn bằng phương trình:

$$QdS = -K_L F_s A (S - S_r) dZ \quad (3.33)$$

Trong đó:

K_L – hệ số trao đổi khối;

S_r – nồng độ cơ chất trên ranh giới phân cách giữa chất lỏng và màng sinh học.

Vì S_r gần bằng 0 sau khi lấy tích phân phương trình (3.33) từ S_i đến S_f ta được:

$$\ln \frac{S_f}{S_i} = -\frac{K_L F_s Z_f}{q_s} \quad (3.34)$$

Trong đó: $q_s = Q/A$ tải trọng thủy lực của biophin.

Đối với dòng rối

$$K_L = K_0 q_s^m \quad (3.35)$$

chỉ số mũ m nằm trong khoảng 0,3 – 0,5.

Sau khi thay (3.35) vào (3.34) ta có:

$$\frac{S_f}{S_i} = \exp \left(-\frac{K_0 F_s Z_f}{q_s^m} \right)$$

K_0 và m xác định bằng thực nghiệm.

3.3. MÔ HÌNH TOÁN HỌC CỦA THIẾT BỊ PHẢN ỨNG LÊN MEN HIẾU KHÍ

Đánh giá ảnh hưởng của những mức độ tác động khác nhau chỉ có thể là gần đúng bởi vì không có sự phân định rạch ròi các hiện tượng xảy ra trên mức độ vi mô (trong tế bào, trong quần thể vi sinh vật) và trên mức độ vĩ mô (các quá trình chuyển khối và truyền nhiệt phụ thuộc vào thủy động học cấu trúc dòng trong thiết bị). Vậy thì mô hình toán học của thiết bị phản ứng – một hệ đủ lớn – chỉ có thể là gần đúng mà thôi.

Mô hình toán học của thiết bị phản ứng sinh hoá bao gồm mô tả tập hợp các quá trình xảy ra trên mức độ vi mô và được xác định bởi động học vi mô của quá trình sinh tổng hợp, đồng thời cả mô tả các quá trình trên mức độ vĩ mô được xác định bởi trạng thái thủy động, trao đổi nhiệt và chất trong thiết bị. Ví dụ, các điều kiện phân tán và chia pha, tính chất và cấu trúc của dòng, mức độ hợp thể của môi trường và cả những điều kiện trao đổi nhiệt và chất có thể được xem xét chi tiết đối với thiết bị có kiểu và cấu trúc nhất định. Nói cách khác các đặc điểm cấu trúc và hình học của thiết bị phản ứng sinh học quyết định dạng mô hình cụ thể mô tả tương hợp các quá trình và hiện tượng xảy ra trong thiết bị. Về phần mình, việc phân tích và tối ưu hoá quá trình theo mô hình toán học của nó cho phép đề xuất đối với quá trình vi sinh một kiểu thiết bị phản ứng tốt nhất cùng những thông số cấu trúc cơ bản của nó.

Mô hình hoá toán học thiết bị phản ứng sinh hoá dẫn đến việc hình thức hoá cái hệ thống phức tạp cần xem xét và thiết lập mối liên hệ giữa các thông số đầu ra của hệ, các thông số trạng thái và thông số đầu vào (cả nhiều và thông số điều khiển). Sự phân tích cấu trúc của hệ phải cho một khái niệm rõ ràng về hệ nhiều pha, trong đó có những đặc trưng như tính chất phân bố các phần tử các pha theo thời gian lưu trong thiết bị; dạng của phân bố pha phân tán theo kích thước; phân bố của các tế bào vi sinh vật theo tuổi và thời gian sống của chúng trong thiết bị; các hiệu ứng tác động tương hỗ cơ học giữa các pha; độ nhớt, khối lượng riêng, sức căng bề mặt... Một mô hình toán học có đủ thông tin của thiết bị phản ứng sinh hoá sẽ là cơ sở để thiết kế tối ưu thiết bị, chọn chế độ công nghệ trong nó, tối ưu hoá và điều khiển tự động quá trình vi sinh.

Quá trình *lên men hiếu khí* của vi sinh vật dựa trên luận điểm rằng, nguồn khí nuôi dưỡng (không khí) được sử dụng ở dạng hoà tan, kết quả là cần có giai đoạn vận tải ôxi từ pha khí vào pha lỏng; thường thì chính giai đoạn này trong đại đa số trường hợp là giai đoạn giới hạn (chậm, quyết định) của toàn bộ quá trình. Sự có mặt trong môi trường lên men các tổ hợp tế bào và khối hình cầu dẫn đến làm giảm tốc độ vận tải ôxi đến các tế bào do trở lực đi qua biên giới chất lỏng – tế bào (ở dạng tổ hợp, khối cầu).

Hệ phương trình của mô hình lên men hiếu khí liên tục trong thiết bị phản ứng sinh hoá tính tới sử dụng ôxi bởi vi sinh vật trong điều kiện trộn lí tưởng theo pha lỏng sẽ có dạng (các kí hiệu của (3.36)–(3.39) xem mục 3.1).

$$\begin{aligned}vX_0 + \mu(S, X, C_L)XV &= vX + V \frac{dX}{dt} \\vS_0 + \alpha_s \mu(S, X, C_L)XV &= vS + V \frac{dS}{dt}\end{aligned}\quad (3.36)$$

$$vC_L^d - K_L a(C_L^* - C_L)V - \alpha_{O_2} \mu(S, X, C_L)XV = vC_L^c + V \frac{dC_L}{dt}$$

Trong đó:

v – tốc độ khối;

$K_L a$ – hệ số truyền khối theo ôxi;

α_s, α_{O_2} – các hệ số tỉ lượng theo cơ chất và ôxi;

C_L^d, C_L^c, C_L^* – nồng độ ôxi ban đầu, cuối và cân bằng.

Đối với chế độ làm việc ổn định của thiết bị phản ứng khi sử dụng mô hình động học Michaelis – Menten phản ánh sự phụ thuộc của tốc độ tăng trưởng riêng của vi sinh vật vào nồng độ ôxi trong môi trường ta sẽ được:

$$\begin{aligned}\frac{dX}{dt} = 0 &= \mu_m \frac{C_L}{K_{O_2} + C_L} X - DX \\ \frac{dS}{dt} = 0 &= D(S_0 - S) - \alpha_s \mu_m \frac{C_L}{K_{O_2} + C_L} X \\ \frac{dC_L}{dt} = 0 &= K_L a(C_L^* - C_L) - \alpha_{O_2} \mu_m \frac{C_L}{K_{O_2} + C_L} X - D(C_L^c - C_L^d)\end{aligned}\quad (3.37)$$

(ở đây D – tốc độ pha loãng).

Mô hình trên mô tả quá trình lên men vi sinh vật hiếu khí trong thiết bị trộn lí tưởng khi mà nồng độ ôxi hoà tan trong môi trường ảnh hưởng đến tốc độ tăng trưởng của tế bào.

Trong nuôi cấy vi sinh vật, người ta nhận thấy tốc độ hấp thụ ôxi cao có thể lớn hơn giá trị tới hạn của giống vi sinh ($C_L > C_{Lh}$). Trong những điều kiện này tốc độ tăng trưởng riêng của vi sinh vật sẽ không phụ thuộc vào nồng độ ôxi trong môi trường và động học tăng trưởng được xác định bởi hệ thức $\mu = \mu(S)$. Sử dụng mô hình động học Monod – Jerusolimsky ta có hệ phương trình:

$$\begin{aligned}
\frac{dC_L}{dt} &= K_L a (C_L^* - C_L) - \alpha_{O_2} \mu_m \frac{S}{K_1 + S} \frac{K_{ps}}{K_{ps} + S_0 - S} X - DC_L \\
\frac{dX}{dt} &= \mu_m \frac{S}{K_1 + S} \frac{K_{ps}}{K_{ps} + S_0 - S} X - DX \\
\frac{dS}{dt} &= D(S_0 - S) - \alpha_s \mu_m \frac{S}{K_1 + S} \frac{K_{ps}}{K_{ps} + S_0 - S} X
\end{aligned} \tag{3.38}$$

Trong đó: K_{ps} – hệ số động học theo cơ chất xác định bằng thực nghiệm.

Tính theo mô hình này cho phép thiết lập được tính chất thay đổi các thông số công nghệ cơ bản của quá trình ở những chế độ lên men khác nhau, đồng thời cả ảnh hưởng của những đặc trưng trao đổi chất của thiết bị phản ứng đến các chỉ tiêu kĩ thuật của nó.

Để mô hình hoá hoạt động của thiết bị phản ứng sinh hoá, người ta đã xây dựng mô hình toán học của quá trình làm sạch nước thải. Để phân tích và làm rõ các quy luật của những yếu tố ảnh hưởng lẫn nhau đã sử dụng các cơ sở của quan điểm hệ thống. Toàn bộ thiết bị phản ứng được phân rã ra thành những mô đun riêng biệt đi từ những suy luận về công nghệ và cấu trúc. Mỗi một mô đun được xem như là một thiết bị phản ứng độc lập mà ở đó diễn ra quá trình làm sạch sinh học.

Đầu tiên mô hình toán học được xây dựng để mô tả hoạt động chỉ của một mô đun (ngăn, hộp) thiết bị. Mô đun riêng biệt là thiết bị cấu tạo từ hai phần (vùng) chia bởi vách ngăn cứng. Ở một vùng phía dưới chỉ có không khí được cấp vào. Đây gọi là vùng thổi khí vào môi trường phản ứng. Ở vùng khác xảy ra quá trình làm sạch như sau: nhờ có vi sinh vật cơ chất được sử dụng và nồng độ chất bẩn giảm đi. Vùng này gọi là vùng phản ứng.

Để đưa ra mô hình đã chấp nhận những giả thiết sau:

1. Chiều dày màng sinh học trên chất mang luôn luôn không đổi.
2. Các hạt chất mang cùng với sinh khối gắn trên chúng chấp nhận là những bông bọt lơ lửng, còn nồng độ vi sinh vật trong dung dịch được giữ bởi sinh khối cố định.
3. Quá trình sử dụng cơ chất xem như là mô hình khuếch tán được đơn giản hoá.

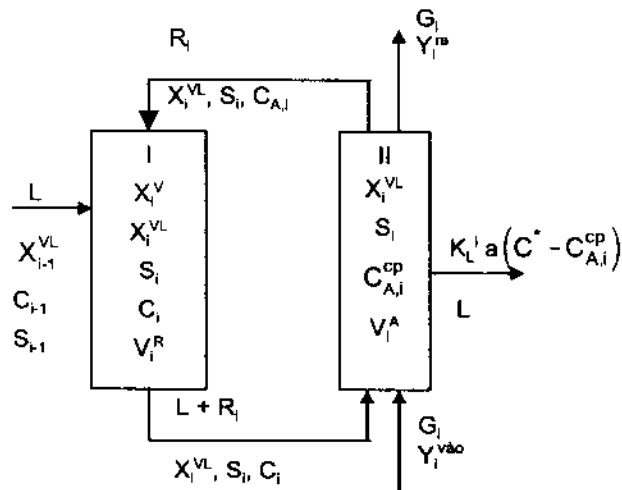
4. Sự tác động lẫn nhau giữa vi sinh vật, chất hữu cơ hoà tan và ôxi trong dung dịch được thực hiện theo phép tỉ lượng của quá trình.

5. Cơ chất được trộn lí tưởng trong toàn bộ thể tích thiết bị phản ứng và theo ôxi có động học bậc không.

6. Các quá trình phân huỷ sinh học của dòng, sự sử dụng ôxi và tích lũy sinh khối chỉ xảy ra ở vùng phản ứng.

7. Trong vùng thông khí chỉ thực hiện sự chuyển khối ôxi.

Mô hình toán học được xây dựng trên cơ sở phân rã một mô đun thiết bị phản ứng sinh hoá. Trên hình 3.13 thể hiện cấu trúc dòng trong đơn nguyên i của thiết bị.



Hình 3.13. Phân bố dòng và chất ở đơn nguyên i

(Giải thích kí hiệu xem trong chú thích (3.39))

Như đã nói ở trên mô đun riêng biệt cấu tạo từ hai phần: phản ứng (I) và thông khí (II). Mô hình toán học tính tới cân bằng chất của quá trình theo sự phát triển của vi sinh vật, sử dụng cơ chất và ôxi cũng như là chuyển khối ôxi từ pha khí vào pha lỏng. Nó có thể được viết như sau (3.39):

Vùng phản ứng:

$$R_i X_i^{VL} + L X_{i-1}^{VL} - (L + R_i) X_i^{VL} + V_i^R \left(\mu_m \frac{S_i}{K_1 + S_i} - K_2 \right) (X_i^V + X_i^{VL}) = 0$$

$$LS_{i-1} + R_i S_i - (L + R_i) S_i - \alpha_s V_i^R \mu_m \frac{S_i}{K_1 + S_i} (X_i^v + X_i^{vl}) = 0$$

$$LC_{i-1} + R_i C_{A,i} - (L + R_i) C_i - \alpha_{O_2} V_i^R \mu_m \frac{S_i}{K_1 + S_i} (X_i^v + X_i^{vl}) = 0$$

Vùng thông khí:

$$G_i Y_i^{vào} - G_i Y_i^{ra} - V_i^A (K_L^i a) (C^* - C_{A,i}^{cp}) = 0$$

$$(L + R_i) C_i - R_i C_{A,i} - LC_{A,i}^{cp} + V_i^A (K_L^i a) (C^* - C_{A,i}^{cp}) = 0 \quad (3.39)$$

Trong đó:

$i = 1, \dots, N$ – số đơn nguyên của thiết bị;

$C_{A,i}^{cp}$ – nồng độ ôxi ở vùng thông khí (kg/m^3);

X_{i-1}^{vl}, X_i^{vl} – nồng độ vi sinh vật tự do ở các đơn nguyên $i-1$ và i (kg/m^3);

X_i^v – nồng độ vi sinh vật cố định ở đơn nguyên i (kg/m^3);

S_{i-1}, S_i – nồng độ chất bẩn hữu cơ ở các đơn nguyên $i-1$ và i (kg/m^3);

C_{i-1}, C_i – nồng độ ôxi hoà tan ở vùng phản ứng của các đơn nguyên $i-1$ và i (kg/m^3);

L – lưu lượng nước thải ở đầu vào cũng như đầu ra (m^3/h);

R_i – dòng tuần hoàn phía trong (m^3/h);

$(K_L^i a)$ – hệ số truyền khối riêng của ôxi ở đơn nguyên i (h^{-1});

C^* – nồng độ ôxi hoà tan cân bằng (kg/m^3);

$Y_i^{vào}, Y_i^{ra}$ – nồng độ ôxi trong pha khí ở đầu vào và đầu ra đơn nguyên i (m^3/h);

V_i^R – thể tích chất lỏng của vùng phản ứng ở đơn nguyên i (m^3);

V_i^A – thể tích chất lỏng của vùng thông khí ở đơn nguyên i (m^3);

μ_m – tốc độ tăng trưởng riêng lớn nhất của vi sinh vật (h^{-1});

K_1 – hằng số bão hoà (kg/m^3);

K_2 – tốc độ mất đi của tế bào (h^{-1}).

Ba phương trình đầu tiên của mô hình (3.39) mô tả tốc độ tăng trưởng vi sinh vật, sử dụng cơ chất và ôxi chỉ được thực hiện ở vùng phản ứng còn hai phương trình sau – cân bằng chất trong vùng thông khí.

Khác với đa số mô hình hiện tượng tính (phenomena) của quá trình tổng hợp vi sinh, các mô hình phi tuyến dùng trong thiết kế tối ưu thiết bị phản ứng sinh hoá tương đối đơn giản. Chúng được dùng để mô tả tăng trưởng và sinh sản của vi sinh vật trên mức độ quần thể ở những điều kiện nuôi cấy cụ thể và do đó chỉ tính ảnh hưởng của những yếu tố thay đổi cơ bản và động học của những phản ứng vĩ mô cơ bản đến quá trình sinh tổng hợp. Việc chọn quan hệ tốc độ tăng trưởng riêng của một hay hai yếu tố trong xây dựng mô hình toán học của thiết bị là tốt nhất bởi vì đối với mô hình nhiều yếu tố phương pháp tính sẽ trở nên phức tạp đáng kể.

Mô tả toán học của động lực học sử dụng cơ chất và tích lũy sinh khối liên quan đến nhận dạng về thông số và cấu trúc của mô hình tốc độ tăng trưởng riêng. Cần nhấn mạnh rằng tốc độ tăng trưởng riêng là một đặc trưng cường độ của quần thể vi sinh vật và phụ thuộc chủ yếu vào nồng độ của cơ chất giới hạn quá trình, nồng độ của sinh khối, nhiệt độ... Tuỳ thuộc vào số yếu tố môi trường có ảnh hưởng đến tốc độ tăng trưởng được tính tới mà phương trình động học được chia ra làm hai nhóm: nhóm một yếu tố và nhóm nhiều yếu tố.

Trong các *phương trình một yếu tố* có tính tới sự ảnh hưởng đến tốc độ tăng trưởng chỉ của một yếu tố môi trường. Người ta giả thiết rằng các yếu tố ảnh hưởng còn lại được giữ ở mức tối ưu.

Mô hình động học nhiều yếu tố có thể nhóm lại theo số yếu tố được sử dụng và cả theo tính chất quan hệ lẫn nhau của các yếu tố.

Mô tả toán học của động học sinh tổng hợp dựa trên các giả thiết sau:

1. trạng thái ổn định theo nghĩa sinh học có đặc trưng là thành phần sinh khối nói chung không thay đổi trong thời gian tuy có sự tăng trưởng của những cá thể.

2. tế bào hình thành với các hàm số không đổi trong thời gian.

3. các tính chất trung bình của tế bào phụ thuộc vào môi trường.

4. đối với sinh khối phân bố tổng thể của vi sinh vật và quần thể theo tuổi (cũng như theo những đặc trưng di truyền: khả năng thích nghi, khả năng sống sót, tính đột biến, tính chọn lọc) là không đổi trong thời gian.

Theo các kết quả nghiên cứu đã công bố, cấu trúc của động học ở thời điểm xuất phát của quá trình liên tục làm sạch nước thải sinh hoạt thường được chọn là một trong hai mô hình: Monod hoặc Herbert.

Trên cơ sở mô hình lựa chọn của quá trình làm sạch, người ta đã tiến hành tính toán với việc sử dụng cả hai mô hình động học tăng trưởng vi sinh vật. Nhờ các chương trình tính toán đã tính được nồng độ đầu ra của mỗi mô đun thiết bị phản ứng sinh hoá ở những nồng độ ban đầu khác nhau của môi trường dinh dưỡng.

Cân bằng chất theo sinh khối và cơ chất có dạng:

+ Đối với mô hình Monod:

$$\frac{dX}{dt} = \mu_m \frac{S}{K_1 + S} X$$

$$\frac{dS}{dt} = -\alpha_s \mu_m \frac{S}{K_1 + S} X$$

+ Đối với mô hình Herbert:

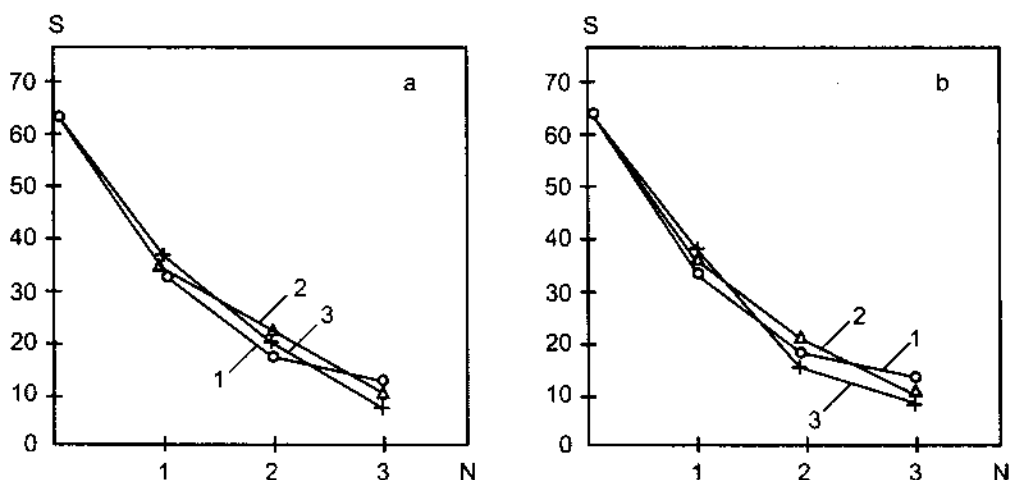
$$\frac{dX}{dt} = \mu_m \frac{S}{K_1 + S} X - K_2 X$$

$$\frac{dS}{dt} = -\alpha_s \mu_m \frac{S}{K_1 + S} X$$

Sử dụng từng mô hình này để tính profin (biên dạng) nồng độ từng đơn nguyên của thiết bị sau đó tính đường cong nồng độ chất bẩn với điều kiện:

$$\Delta S = \sum_{i=1}^N \left(S_i^{\text{th.ng}} - S_i^{\text{t.t}} \right)^2 \rightarrow \min$$

Kết quả tính toán được đưa vào hình 3.14 đối với cả hai mô hình động học. Từ kết quả ta thấy quá trình làm sạch được mô tả tốt hơn bằng mô hình Herbert. Ở các phần tiếp theo tất cả tính toán và nghiên cứu tiến hành cho mô hình toán học của thiết bị phản ứng sinh hoá đều được thực hiện với việc sử dụng mô hình Herbert.



Hình 3.14. Kết quả phân tích hai mô hình cạnh tranh

ở những nồng độ chất bẩn ban đầu khác nhau

1. Số liệu thực nghiệm; 2. Mô hình Herbert; 3. Mô hình Monod.

$$\Delta S = \sum_{i=1}^3 (S_i^{\text{th. ng}} - S_i^{\text{t. t}})^2$$

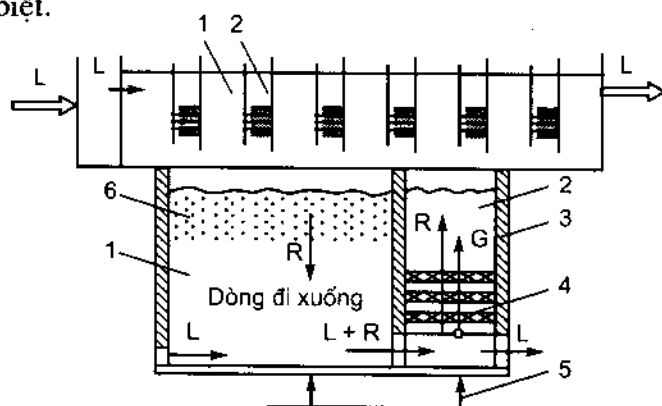
	S_0	$\Delta S - \text{Herbert}$	$\Delta S - \text{Monod}$
a	61,0	5,21	5,94
b	64,0	5,03	6,46

3.4. MÔ HÌNH TOÁN HỌC ĐẦY ĐỦ CỦA THIẾT BỊ PHẢN ỨNG SINH HOÁ

Việc nghiên cứu cấu trúc và hiệu quả hoạt động của các công trình xử lý nước thải hợp lý hơn cả là tiến hành trên cơ sở mô hình toán học đầy đủ của quá trình trong điều kiện ổn định. Mô hình toán học đầy đủ cho ta khả năng phân tích và dự báo diễn biến của quá trình sinh hoá đối với những chế độ vận hành thiết bị khác nhau. Sau đó, trên cơ sở tiêu chuẩn tối ưu ra quyết định về những bước tiếp theo của khảo sát thực nghiệm và chuyển đến giai đoạn thiết kế, hoàn thiện cấu trúc thiết bị ở điều kiện thực tế.

Như đã nói ở các phần trước, mô hình toán học đầy đủ bao gồm các phương trình cân bằng chất của sinh khối, sử dụng cơ chất và ôxi hoà tan. Ngoài ra, mô hình còn tính tới cả chuyển khối ôxi từ pha khí vào pha lỏng và phản ánh hoạt động của tất cả các đơn nguyên của thiết bị. Toàn bộ thiết bị được xem như là một chuỗi của các mô đun liên tiếp. Ở mỗi mô đun có hai

vùng hoạt động. Vùng thứ nhất là vùng phản ứng với đệm bơi trong dung dịch và vi sinh vật bám dính trên các hạt đệm. Vùng này đảm bảo việc phân huỷ sinh học chất bẩn hữu cơ. Vùng thứ hai là vùng thông khí, chỉ có không khí đưa vào cấp cho môi trường. Sự bố trí và định hướng của các mô đun đơn nguyên được trình bày trên hình 3.15. Mỗi mô đun hoạt động như một thiết bị độc lập. Đối với nó hoàn toàn đúng các phương trình cân bằng chất theo pha lỏng L và pha khí G . Nếu coi thiết bị như là một thiết bị trao đổi chất thì cần phân rõ nó và xem xét quá trình làm sạch sinh học cho mô đun i riêng biệt.



Hình 3.15. Sơ đồ mô đun thiết bị phản ứng sinh hoá với sinh khối cố định

1. Vùng phản ứng; 2. Vùng thông khí; 3. Vách ngăn; 4. Lưới phân tán; 5. Đường dẫn không khí; 6. Đệm bơi với sinh khối cố định; Các kí hiệu G , L , R như hình 3.13

Sự phân tích cho thấy có thể mô tả từng đơn nguyên riêng biệt – theo quan hệ với chuyển động của chất lỏng – như một mô hình đẩy lí tưởng, còn toàn bộ mô đun – từ cơ chế diễn biến của quá trình – như là mô hình phân rã với dòng tuần hoàn kín phía trong (R).

Các thông số động học và công nghệ của mô hình

Trong mô hình toán học của quá trình làm sạch nước thải thể hiện bằng hệ phương trình (3.39) có sử dụng một loạt hằng số động học và công nghệ. Để đánh giá chúng cần có những số liệu thực nghiệm về quá trình ở chế độ làm việc thực.

Điều kiện chủ yếu của việc đánh giá các hằng số của mô hình toán học là lựa chọn tiêu chuẩn tìm kiếm. Thường thì người ta chọn độ lệch nhỏ nhất (δ) của các giá trị đường cong tính toán so với thực nghiệm làm tiêu chuẩn, tức là:

$$\delta = \min \sum_{i=1}^N (y_i^{\text{th. ng}} - y_i^{\text{t. t}})^2$$

Trong đó: $y_i^{\text{th. ng}}$, $y_i^{\text{t. t}}$ tương ứng là các giá trị thực nghiệm và tính toán của đường cong đáp ứng. Đường cong đáp ứng là đường cong của nồng độ cơ chất tức là độ bẩn của nước và lượng ôxi ở đầu ra mỗi mô đun thiết bị.

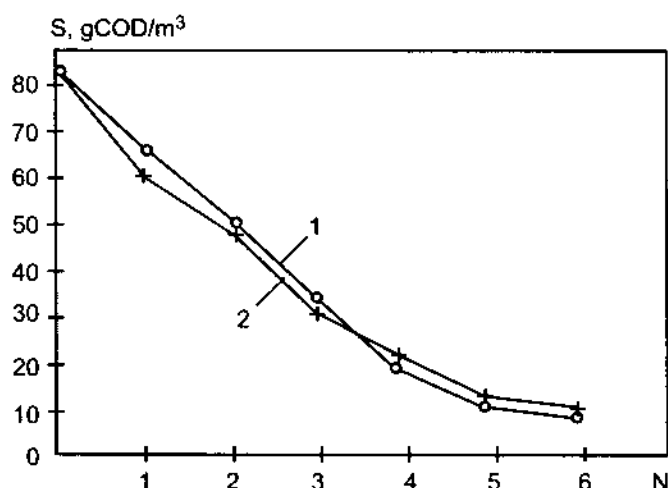
Mô hình toán học của quá trình làm sạch nước thải sinh hoạt theo thiết bị phản ứng sinh hoá kiểu mô đun đã nói ở trên bao gồm 7 hằng số động học và 5 hằng số công nghệ được đánh giá theo thực nghiệm. Đầu tiên tiến hành đánh giá các hằng số với việc sử dụng số liệu thực nghiệm chỉ cho một mô đun. Điều này làm được từ những giả thiết sau:

1. Cho rằng các hằng số nhận được sẽ được sử dụng cho toàn bộ thiết bị và các độ lệch theo mô hình sẽ không lớn.
2. Không có đủ số liệu thực nghiệm cho phân bố nồng độ chất bẩn và ôxi theo toàn bộ các mô đun của thiết bị và ở những chế độ làm việc khác nhau.
3. Giả thiết rằng một sự tìm kiếm thực hiện theo chương trình như thế sẽ đơn giản hơn, quá trình tìm kiếm sẽ xảy ra nhanh hơn.

Nhờ thuật toán và chương trình tính được xây dựng, đã tiến hành đánh giá các hằng số động học đi từ những lập luận nêu trên. Sau đó, trên cơ sở đánh giá các thông số đã giải bài toán trực tiếp tức là tính profin nồng độ chất bẩn theo các đơn nguyên. Kết quả tính toán được đưa vào bảng 3.1, còn các đường cong tính toán và thực nghiệm trên hình 3.16. Ở đây, cân bằng theo mô hình nhận được không đúng bởi vì các độ lệch so với giá trị thực nghiệm tương đối lớn. Ngoài ra, còn có cả những tính toán trong đó số mô đun tính được cho điều kiện làm việc đã cho của thiết bị không trùng với số đơn nguyên đã tiến hành thí nghiệm.

BẢNG 3.1. CÁC HẰNG SỐ CỦA MÔ HÌNH TOÁN HỌC

HẰNG SỐ	GIÁ TRỊ	ĐƠN VỊ TÍNH	HẰNG SỐ	GIÁ TRỊ	ĐƠN VỊ TÍNH
R	115,289	m ³ /h	K _L a	261,796	h ⁻¹
μ _m	0,1128	h ⁻¹	α _s	0,9	kg/kg
K _i	41,467	kg/m ³	α _{O2}	0,223	kg/kg



Hình 3.16. *Profin nồng độ chất bẩn theo các đơn nguyên*
 1. Các điểm thực nghiệm; 2. các giá trị tính toán

Để tăng độ tin cậy của kết quả tính, người ta thực hiện việc đánh giá các hằng số động học trên cơ sở các giá trị thực nghiệm nhận được cho tất cả các mô đun của thiết bị. Việc này dẫn đến phức tạp hoá chương trình đánh giá các thông số. Tiêu chuẩn tối ưu được xây dựng sao cho cực tiểu hoá tổng các độ lệch của đường cong thực nghiệm so với tính toán nhận được ở tổ hợp thông số đã cho đối với mọi mô đun của thiết bị. Tư tưởng cơ bản bây giờ là phải tìm tập hợp hằng số động học thoả mãn tiêu chuẩn tối ưu theo tất cả các mô đun của thiết bị đối với đường cong thực nghiệm đã cho.

Để đánh giá các hằng số động học và công nghệ yêu cầu đã xây dựng thủ tục tìm kiếm. Các hằng số đánh giá theo số liệu thực nghiệm thể hiện trong bảng 3.2. Hàm mục tiêu của việc tìm kiếm được chọn là phiếm hàm F_1 dạng

$$F_1 = \sum_i \sum_j (y_{ij}^{th.ng} - y_{ij}^{t.t})^2$$

Trong đó: $y_{ij}^{th.ng}$ – các điểm thực nghiệm của đường cong đáp ứng; $y_{ij}^{t.t}$ – các giá trị tính toán của các thông số theo mô hình; j – số thông số cần đánh giá; i – số mô đun làm việc của thiết bị quy định bởi đường cong thực nghiệm.

**BẢNG 3.2. CÁC ĐIỂM THỰC NGHIỆM ĐỂ ĐÁNH GIÁ CÁC HẰNG SỐ CỦA
MÔ HÌNH TOÁN HỌC ĐẦY ĐỦ VÀ KIỂM ĐỊNH TÍNH TƯƠNG HỢP CỦA MÔ HÌNH
(NỒNG ĐỘ SINH KHỐI $X_v = 2500\text{g/m}^3$; $S_0 \rightarrow S_6$ ở gCOD/m^3)**

L, m ³ /h	S ₀	S ₁	S ₂	S ₃	S ₄	S ₅	S ₆
10	69	42	17	—	—	—	—
23	64	36	18	13	9	—	—
35	81	67	48	36	18	11	7
40	60	33	24	17	12	8	—

Điểm cực tiểu của hàm mục tiêu tìm được theo chương trình chuẩn của phương pháp dung sai đàn hồi (flexible tolerance). Khi tìm các hằng số động học có các ràng buộc sau:

1. Các hằng số động học và công nghệ nằm trong khoảng cho phép định trước.
2. Các giá trị tính toán của đường cong đáp ứng phải là những số dương.

Việc giải mô hình toán học dẫn đến giải hệ 5 phương trình đại số phi tuyến dạng:

$$F_i(x_j) = 0$$

Trong đó: $i = 1, 2, \dots, N$ (N – số phương trình của mô hình toán học), x_j – các biến số (nồng độ chất bẩn, vi sinh vật và ôxi hoà tan ở mỗi mô đun).

Để giải hệ phương trình của mô hình đã sử dụng phương pháp dung sai đàn hồi. Các giá trị x_j được xác định bằng cách cực tiểu hoá phiếm hàm

$$\Phi = \sum [F_i(x_j)]^2$$

Vì các phương trình cân bằng chất của quá trình làm sạch xảy ra trong từng mô đun thiết bị là phương trình của mô hình nên phiếm hàm phải tiến tới 0. Sử dụng các phương pháp tính để giải hệ phương trình của mô hình ta nhận được lời giải gần đúng.

Trong cách phát biểu tổng quát, bài toán quy hoạch phi tuyến dẫn đến cực tiểu hoá hàm số $f(x)$, $x \in E^n$ với những ràng buộc :

$$h_i(x) = 0 \quad i = 1, \dots, m$$

$$g_i(x) \geq 0 \quad i = m+1, \dots, p$$

(các hàm số $f(x)$, $h_i(x)$, $g_i(x)$ có thể là tuyến tính hoặc phi tuyến).

Thuật toán dung sai đàn hồi cho phép làm tốt hơn các giá trị của hàm mục tiêu không chỉ bởi thông tin nhận được ở những điểm cho phép của không gian nghiệm (lời giải) mà còn bởi thông tin có thể nhận được khi qua một vài điểm nằm ở ngoài vùng cho phép nhưng là gần sát với cho phép. Với chiến lược tìm kiếm tối ưu như vậy có thể thay thế bài toán bằng bài toán cực tiểu hoá đơn giản hơn là tìm cực tiểu $f(x)$, $x \in E^n$ với ràng buộc $\Phi^{(k)} - T(x) \geq 0$ trong đó $\Phi^{(k)}$ – giá trị của tiêu chuẩn dung sai đàn hồi trên bước tìm kiếm thứ k , còn $T(x)$ là một phiếm hàm xác định dương trên tập hợp tất cả các hàm đặt điều kiện ràng buộc.

Để xác định các thông số của mô hình toán học đã thực hiện kế hoạch thực nghiệm xuất phát "thụ động" cấu thành từ 18 thí nghiệm cho vùng thay đổi rộng của các biến điều khiển với nồng độ cơ chất hữu cơ ban đầu S_0 và tốc độ pha loãng D . Thực nghiệm tiến hành trên trạm xử lý nước thải sinh hoạt quy mô công nghiệp thực tế đang hoạt động.

Kết quả thực nghiệm công nghệ của quá trình làm sạch liên tục ổn định và tính toán theo mô hình đối với những giá trị của các biến điều khiển S_0 và D cho trước được đưa vào bảng 3.3 ($S_{th.ng}$ – giá trị thực nghiệm, $S_{t.t}$ – giá trị tính toán).

BẢNG 3.3. SO SÁNH GIÁ TRỊ TÍNH TOÁN VỚI SỐ LIỆU THỰC NGHIỆM

N ^o THÍ NGHIỆM	$S^{th.ng}$ g COD/m ³	$S^{t.t}$ g/m ³	N ^o THÍ NGHIỆM	$S^{th.ng}$ g COD/m ³	$S^{t.t}$ g/m ³
1	38,0	41,0	10	7,0	7,0
2	22,0	24,0	11	29,0	27,0
3	13,0	13,0	12	9,0	9,0
4	8,0	7,0	13	67,0	62,0
5	43,0	46,0	14	48,0	46,0
6	32,0	34,0	15	36,0	32,0
7	27,0	24,0	16	18,0	21,0
8	15,0	17,0	17	11,0	14,0
9	10,0	11,0	18	7,0	9,0

Khi không có thí nghiệm lặp và phương sai tái sinh, có thể đánh giá chất lượng xấp xỉ của các phương trình vừa nhận được bằng cách so sánh phương sai dư s_{du}^2 và phương sai ứng với giá trị trung bình s_y^2 .

Kiểm định tính tương hợp được thực hiện nhờ tiêu chuẩn Fisher. Phương sai dư được tính theo các số liệu thực nghiệm về sử dụng cơ chất cho tất cả các mô đun của thiết bị.

Theo tính toán nhận được cho s_y^2 và $s_{dư}^2$, tiêu chuẩn Fisher sẽ là:

$$F = \frac{s_y^2(f_y)}{s_{dư}^2(f_{dư})}$$

Trong trường hợp này, tiêu chuẩn Fisher chỉ ra rằng sự phân tán giảm đi bao nhiêu lần theo phương trình nhận được của mô hình so với sự phân tán theo giá trị trung bình. Giá trị tính toán của tiêu chuẩn Fisher càng lớn hơn giá trị tra bảng đối với mức ý nghĩa $p = 0,05$ và các số bậc tự do f_y và $f_{dư}$ thì phương trình của mô hình lựa chọn càng hiệu quả.

$$s_{dư}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (s_i^{th.ng} - s_i^{t.t})^2}{f_{dư}}$$

Trong đó:

N – số thí nghiệm;

$s_i^{th.ng}$ – giá trị thực nghiệm của đường cong đáp ứng;

$s_i^{t.t}$ – giá trị tính toán của đường cong đáp ứng theo mô hình, $i = \overline{1, N}$;

$f_{dư}$ – số bậc tự do.

$$f_{dư} = N - (K + 1)$$

Trong đó: K – số thông số được đánh giá, $K = 12 (f_{dư} = 5)$.

Với việc sử dụng các giá trị bảng 3.3 ta được:

$$s_{dư}^2 = \frac{1444}{5} \approx 289$$

Phương sai so với giá trị trung bình s_y^2 tính theo công thức:

$$s_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (s_i^{th.ng} - s_{t.b})^2}{f_y} \quad s_{t.b} = \frac{\sum_{i=1}^N s_i^{th.ng}}{N}$$

Trong đó: f_y – số bậc tự do; $f_y = N - 1$ (trong trường hợp này $f_y = 17$).

Thay các giá trị vào ta có:

$$s_y^2 = \frac{125316}{17} \approx 7371$$

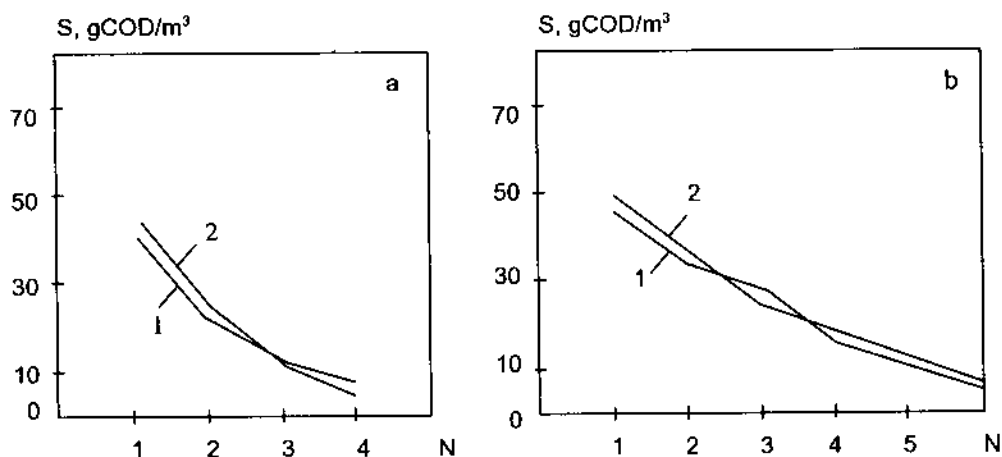
Khi đó $F_{t,t} = \frac{7371}{289} \approx 25$

Giá trị tiêu chuẩn Fisher tra bảng

$$F_p(f_1, f_2) = F_{0,05}(f_y, f_{du}) = F_{0,05}(17,5) = 8,7$$

Do $F_{t,t} > F_p(f_1, f_2)$ nên có đủ độ tin cậy để nói về sự tương hợp của mô hình toán học với quá trình thực làm sạch nước thải.

Để minh hoạ sự tương hợp của mô hình toán học đã tiến hành tính toán ở những tải trọng đầu vào khác nhau và so sánh với giá trị thực nghiệm của nồng độ. Từ kết quả trên hình 3.17 ta thấy độ lệch lớn nhất giữa giá trị tính toán và giá trị thực nghiệm của nồng độ theo các đơn nguyên thiết bị phản ứng không vượt quá giá trị tuyệt đối 3gCOD/m^3 .



Hình 3.17. Profin nồng độ chất bẩn theo các đơn nguyên ở những tải trọng đầu vào khác nhau

a) $L = 23\text{m}^3/\text{h}$; $S_0 = 64\text{gCOD/m}^3$; b) $L = 40\text{m}^3/\text{h}$; $S_0 = 60\text{gCOD/m}^3$

1. Số liệu thực nghiệm; 2. Giá trị tính toán.

3.5. XÁC ĐỊNH NỒNG ĐỘ VI SINH VẬT CỐ ĐỊNH TRÊN CHẤT MANG

Để xác định nồng độ vi sinh vật cần phải tính lượng sinh khối hình thành trên bề mặt chất mang. Chất mang là những hạt hình cầu làm từ polystyrol bột đường kính khoảng 3mm đảm bảo khối lượng riêng vật liệu từ 250 đến 300 kg/m³ là yêu cầu công nghệ để thực hiện quá trình.

Chiều dày màng sinh học được xác định theo công thức:

$$\delta_x = r_b - r_h = \frac{d_b}{2} - \frac{d_h}{2}$$

Trong đó:

d_h – đường kính của hạt chất mang;

d_b – đường kính hạt sinh học tức là của chất mang và màng sinh học phủ trên nó;

r – bán kính với chỉ số h, b như trên.

Vì các hạt nằm ở trạng thái chất đông trong thiết bị, đối với đường kính đã cho độ rỗng ε chấp nhận bằng 0,4. Như vậy, thể tích thực tế các hạt chất mang chiếm giữ V_t bằng

$$V_t = V_m(1 - \varepsilon)$$

Trong đó: V_m – thể tích chất mang chiếm ở trạng thái chất đông.

Khi đó số hạt chiếm giữ một thể tích nhất định của một đơn nguyên thiết bị có thể tính theo công thức:

$$N = \frac{V_m}{V_h}(1 - \varepsilon) = \frac{V_m \varepsilon_c}{V_h}$$

Trong đó:

V_h – thể tích một hạt chất mang;

ε_c – độ rỗng hiệu quả của hạt.

Thể tích của một hạt chất mang $V_h = \frac{\pi d_h^3}{6}$, còn thể tích một hạt sinh học với vi sinh vật cố định trên màng sẽ là $V_b = \frac{\pi d_b^3}{6}$.

Như vậy, lượng sinh khối cố định trên một hạt được xác định như sau:

$$m = (V_b - V_h)\rho_b$$

Trong đó: ρ_b – khối lượng riêng của màng sinh học, còn tổng lượng sinh khối nằm ở một đơn nguyên thiết bị phản ứng sẽ bằng

$$M = N.m \text{ (kg)}$$

Sau khi biến đổi ta được:

$$M = N\rho_b \frac{\pi}{6} (d_b^3 - d_h^3)$$

tức là lượng sinh khối ở một đơn nguyên có thể xác định qua ρ_b và sự khác nhau của đường kính hạt sinh học và hạt chất mang. Nồng độ vi sinh vật ở một đơn nguyên ta xác định như là tổng lượng sinh khối gắn kết trên một đơn vị thể tích pha lỏng của một đơn nguyên thiết bị.

Như vậy:

$$X = \left[(N\rho_b \pi / 6) (d_b^3 - d_h^3) / V_l \right] = \frac{V_m \varepsilon_c \rho_b (V_b - V_h)}{V_h V_l}$$

Vì V_l – thể tích chất lỏng ở một đơn nguyên thiết bị, còn V_h – thể tích hạt chất mang, chúng ta có thể thay $V_m/V_l = q$ (một số không đổi nào đó). Khi ấy:

$$X = \frac{\varepsilon_c \rho_b (V_b - V_h) q}{V_h}$$

Thực hiện biến đổi thêm, cuối cùng ta được:

$$X = \frac{\varepsilon_c \rho_b (d_b^3 - d_h^3) q}{d_h^3}$$

Các tính toán tiến hành cho hạt có đường kính $d_h = 3,0.10^{-3}m$, khối lượng riêng màng sinh học $\rho_b = 1020 \text{ kg/m}^3$, đường kính hạt sinh học $d_b = 3,1.10^{-3}m$ tức là chiều dày màng sinh học khoảng $50\mu m$; $q = 0,04$. Khi đó:

$$X = 0,6 - 1020 \{ [(3,1.10^{-6})^3] / 3,0 \} 0,04 = 2500g/m^3$$

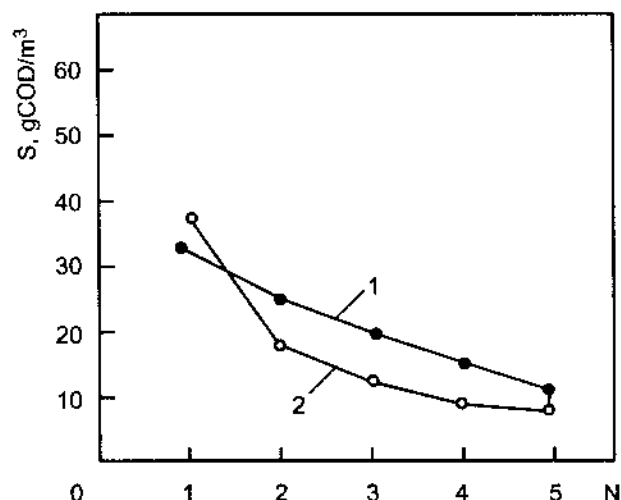
Do những nghiên cứu trong phòng thí nghiệm chỉ ra rằng chiều dày màng sinh học từ 50 đến $70\mu m$ nên ở các tính toán tiếp theo sẽ chấp nhận nồng độ vi sinh vật có thể tới $2700g/m^3$ đối với thể tích đã cho bị các hạt chất mang chiếm giữ. Vì chiều dày màng sinh học đạt giới hạn đã cho nên có thể điều chỉnh nồng độ sinh khối trong thiết bị bằng cách thay đổi lượng hạt chất mang và như vậy là giá trị của số q .

Để đảm bảo nồng độ vi sinh vật cần thiết trong thiết bị, phải cấp cho nó (thiết bị) bùn hoạt tính nhờ dòng tuần hoàn kín. Ở chế độ như vậy thiết bị phản ứng làm việc được hơn 3 tháng, nồng độ vi sinh vật được giữ từ 800 đến 12.000 g/m³. Đồng thời, thiết bị phản ứng hoạt động như một thiết bị thông khí với vi sinh vật lơ lửng trong nó. Kết quả làm việc được ghi lại vào sổ theo dõi. Sau đó, đưa vào cả 6 đơn nguyên thiết bị lượng chất mang dạng hạt cần thiết. Để gia tốc quá trình cố định sinh khối, người ta xử lý trước chất mang để tạo bề mặt nhám. Ở một nồng độ nhất định của vi sinh vật trong thiết bị, quá trình cố định kéo dài khoảng một tháng sau đó ngắt bỏ dòng tuần hoàn kín, còn lưu lượng nước đưa lên đến 7 – 10m³/h. Ở chế độ như thế thiết bị phản ứng sinh hoá làm việc đến khi chiều dày màng được hình thành tốt. Nó đủ cho ta nhận thấy bằng mắt thường chiều dày của màng dao động từ 40 đến 70µm. Đối với các tính toán chấp nhận chiều dày màng sinh học bằng 50µm. Đã tiến hành các khảo sát với màng sinh học được hình thành, trong đó lưu lượng nước thải cấp vào thiết bị phản ứng thay đổi trong khoảng 20 – 40m³/h, còn nồng độ theo COD phụ thuộc vào tải trọng chất bẩn của nước thải, tức là điều chỉnh nó hay là không thể giữ được. Các số liệu thực nghiệm ở những chế độ làm việc khác nhau được đưa vào bảng 3.4. Lưu lượng không khí ở mỗi đơn nguyên được giữ khoảng 25m³/h.

BẢNG 3.4. SỐ LIỆU THỰC NGHIỆM VỀ HOẠT ĐỘNG CỦA THIẾT BỊ PHẢN ỨNG VỚI CHẤT MANG VÀ SINH KHỐI CỐ ĐỊNH TRÊN NÓ ($S_0 - S_6$ Ở gCOD/m³)

L, m ³ /h	S_0	S_1	S_2	S_3	S_4	S_5	S_6
10	26	—	—	—	—	—	—
10	17	—	—	—	—	—	—
10	69	42	17	—	—	—	—
10	43	—	26	—	16	—	—
40	60	33	24	17	12	8	—
40	34	—	25	—	17	—	—
40	52	28	20	15	12	10	—
40	25	17	—	—	—	—	—
35	81	67	48	36	18	11	7
35	45	40	—	27	—	18	—
35	45	30	—	17	—	8	—
35	27	—	—	9	—	—	—

So sánh hoạt động của thiết bị với sinh khối cố định và thiết bị với sinh khối lơ lửng cho thấy phương án thứ nhất ưu việt hơn. Điều này được thấy trên hình 3.18 trong đó chỉ ra quá trình sử dụng cơ chất bằng cả hai phương pháp.



Hình 3.18. Profin thay đổi nồng độ chất bẩn

1. Đối với bùn hoạt tính (tốc độ làm sạch $\omega = 18,3\text{g}/(\text{m}^3 \cdot \text{h})$, $\tau = 3\text{h}$);

2. Với sinh khối cố định ($\omega = 19,25\text{g}/(\text{m}^3 \cdot \text{h})$, $\tau = 2\text{h}$)

Có thể giải thích tốc độ ôxi hoá lớn hơn của quá trình với sinh khối cố định bằng sự có mặt của nồng độ không đổi của vi sinh vật cố định và cả thành phần không đổi của chúng. Ngoài ra, theo hiệu quả thiết bị và tốc độ làm sạch thì cấu trúc mới tốt hơn cấu trúc cũ.

Tất cả những điều này cho ta cơ sở đề xuất thiết bị phản ứng sinh hoá airlift với sinh khối cố định để sử dụng ở trạm xử lý nước thải sinh hoạt đang hoạt động trong thực tiễn.

3.6. THIẾT BỊ PHẢN ỨNG SINH HOÁ AIRLIFT VỚI ĐỆM TRÔI NỔI VÀ VI SINH VẬT CỐ ĐỊNH TRÊN ĐỆM

Airlift (từ các từ tiếng Anh: air – không khí, lift – nâng) theo nghĩa thông thường là thiết bị để nâng chất lỏng có dạng ống thẳng đứng nhúng vào chất lỏng. Ở phía dưới cấp không khí đủ mạnh sao cho tạo thành hỗn hợp khí–lỏng dâng cao hơn mực chất lỏng ban đầu.

Thiết bị phản ứng thí nghiệm trong trường hợp của chúng ta là một bể chiều dài 10m, rộng 3,5m và sâu 2,5m. Về cấu trúc bể được chia thành các đơn nguyên (section) thực hiện theo nguyên lý mô đun. Ở mỗi mô đun có các vùng thông khí và vùng phản ứng (hình 3.5). Các mô đun tách nhau bằng vách ngăn đặc cao 2m.

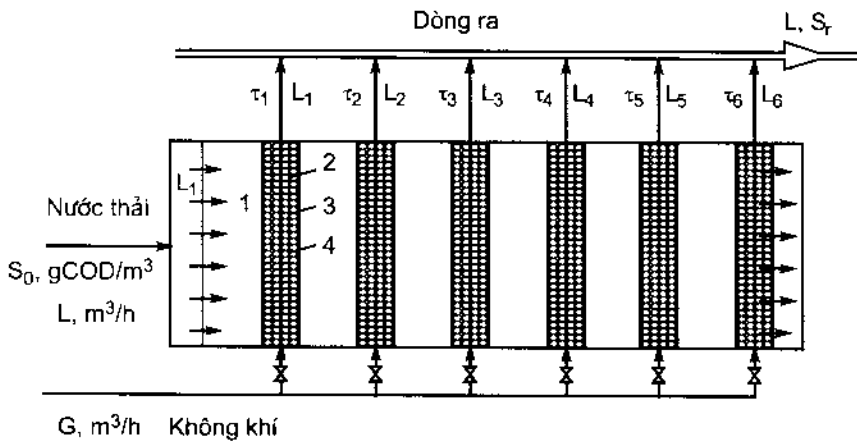
Vùng thông khí:

Vùng thông khí có chiều rộng 0,2m. Ở độ cao 0,2m tính từ đáy thiết bị có các ống đục lỗ để thực hiện bão hoà thiết bị bằng không khí. Phía trên bộ phận sủi khí đó đặt 3 dãy lưới phân tán cách nhau 0,2m. Những dãy lưới này dùng để đẩy sinh khối tích lũy trên các hạt chất mang và điều chỉnh chiều dày màng sinh học. Ở vùng thông khí chỉ thực hiện quá trình thổi khí. Dòng tuần hoàn kín phía trong tạo ra do sự khác nhau về khối lượng riêng của hai pha lỏng của các vùng thông khí và vùng phản ứng. Vùng thông khí tách khỏi vùng phản ứng bằng vách ngăn đặc chiều cao 1,8m. Mực nước trong thiết bị được giữ ở chiều cao này, điều đó làm thuận lợi cho dòng khí thổi vào chuyển các hạt chất mang qua các lỗ của tường vào vùng phản ứng.

Vùng phản ứng:

Vùng phản ứng có chiều rộng 0,6m. Các hạt chất mang với vi sinh vật bám dính trên đó nằm ở vùng này. Kết quả hình thành hạt sinh học khối lượng riêng $200 - 300 \text{ kg/m}^3$ và đường kính khoảng 3mm. Nhờ độ nhám có được trên bề mặt mà vi sinh vật bám dính vững chắc ở các tâm hoạt động của hạt và tạo nên vỏ màng sinh học. Khối lượng riêng của màng sinh học thực tế bằng khối lượng riêng của nước 1020 kg/m^3 . Màng sinh học tương đối mềm, tơi và xốp và không gây khó khăn cho sự khuếch tán vào phía trong sinh khối. Quá trình làm sạch tức là sử dụng cơ chất hữu cơ được thực hiện do giữ nồng độ vi sinh vật tạo thành màng sinh học ở mức không đổi. Trong làm sạch sinh học có cả sự tham gia của những vi sinh vật trôi nổi trong dung dịch, nhưng nồng độ của chúng thấp hơn một bậc và thường là dao động nên sự đóng góp của chúng không lớn. Toàn bộ bể sinh học được làm đầy bởi 6 mô đun như thế.

Hình dạng chung của bể sinh học cũng như là cấu tạo thiết bị và sự bố trí của các mô đun riêng biệt được thể hiện trên các hình 3.15 và 3.19.



Hình 3.19. Hình dạng thiết bị phản ứng sinh hoá và sơ đồ dòng

1. Vùng phản ứng; 2. Vùng thông khí; 3. Các lưới phân tán; 4. Ống dẫn không khí

Nguyên lý hoạt động của một mô đun

Như đã đề cập, mô đun cấu tạo từ vùng phản ứng và vùng thông khí. Ở vùng phản ứng là các hạt chất mang ở dạng chất đồng chiếm 1/20 thể tích của vùng. Vì khối lượng riêng của hạt nhỏ hơn khối lượng riêng của nước, các hạt bao giờ cũng lơ lửng trên mặt nước. Theo thời gian chúng bị bao phủ bằng vi sinh vật và bắt đầu sự hình thành màng sinh học. Chiều dày màng sinh học dần dần tăng, nhờ đó khối lượng của hạt sinh học cũng tăng. Không khí với lưu lượng khoảng 25m³/h được cấp liên tục vào vùng thông khí. Do có sự khác nhau về khối lượng riêng môi trường ở các vùng này mà một dòng tuần hoàn kín bên trong được tạo ra. Dòng này chuyển động từ phía dưới vùng thông khí lên trên và chuyển sang vùng phản ứng sau đó hướng xuống phía dưới vùng này. Cùng với dòng các hạt cũng bị cuốn theo và dưới tác động của trọng lực đi xuống phía dưới. Dòng tuần hoàn hướng các hạt sinh học lên trên và khi chúng qua các lưới phân tán một phần màng sinh học bị mài mòn cơ học do ma sát giữa các hạt sinh học. Các hạt sinh học lơ lửng trên và cùng với dòng tuần hoàn kín một lần nữa lại vào vùng phản ứng. Quá trình này xảy ra liên tục, sinh khối bị loại bỏ lắng xuống đáy và sau đó được đưa ra khỏi thiết bị cùng dòng.

Trong cấu trúc, người ta đặc biệt chú ý để vách ngăn tách các mô đun có chiều cao lớn hơn chiều cao của vách ngăn giữa các vùng.

Đầu dưới của vách ngăn đặt cách đáy 10cm để giữ các hạt chất mang và xúc tiến khuấy trộn chúng lên phía trên. Vách ngăn giữa các vùng nằm ở khoảng cách 20cm cách đáy bể, như vậy tạo cho các hạt sinh học khả năng vận chuyển tự do từ vùng phản ứng vào vùng thông khí.

Màng sinh học được hình thành trên các hạt làm từ polystyrol bọt khối lượng riêng $200 - 300 \text{ kg/m}^3$. Các hạt này dưới tác động của lực li tâm chuyển động cùng với bột màu đặc biệt, kết quả là bề mặt chúng được bao phủ bằng lớp bột rất mịn trên đó vi sinh vật bị giữ lại. Chất mang được xử lí như thể đem chất vào thiết bị phản ứng sinh hoá, vào tất cả các vùng phản ứng.

3.6.1. Kết quả thực nghiệm và xử lí kết quả

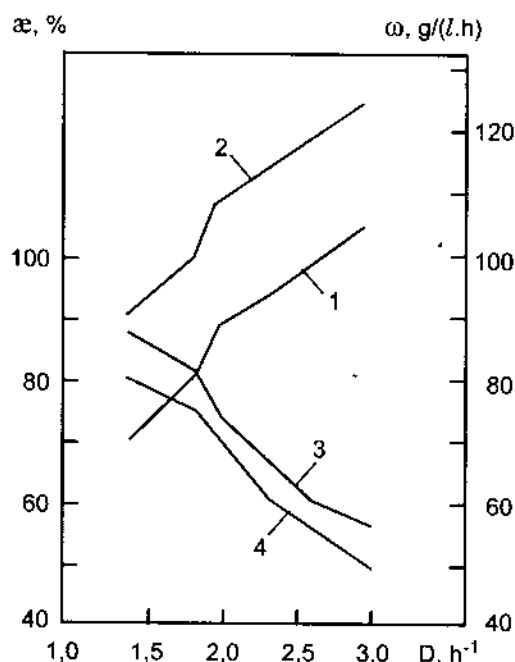
Lúc đầu thiết bị hoạt động như là thiết bị airlift với vi sinh vật lơ lửng trong môi trường lỏng. Nồng độ sinh khối được đảm bảo do dòng ngược của bùn hoạt tính. Sau đó, ta đưa một lượng chất mang cần thiết vào thiết bị, trên bề mặt chất mang hình thành màng sinh học. Khi quá trình này hoàn toàn kết thúc việc cấp bùn hoạt tính cũng ngừng. Sự hình thành tiếp theo của màng sinh học được tiếp tục chỉ trên bề mặt hạt chất mang, một phần vi sinh vật phát triển trong pha lỏng. Kết quả đặc lên của nó có nghĩa là cơ chất được sử dụng, tức là xảy ra quá trình làm sạch chất hữu cơ. Số liệu thực nghiệm nhận được trình bày trong bảng 3.4.

3.6.2. Kết quả mô hình hoá

Nhờ mô hình toán học đầy đủ đã tiến hành tính toán thiết bị phản ứng sinh hoá cho những điều kiện chế độ khác nhau. Bằng thay đổi tải trọng theo COD và lưu lượng nước vào trong những giới hạn cho phép, người ta xác định được số đơn nguyên tối ưu và sự thay đổi của nồng độ chất hữu cơ theo các đơn nguyên cho một tổ hợp thông số cụ thể đặc trưng hoạt động của thiết bị phản ứng sinh hoá. Các giá trị tính toán (bảng 3.5) có thể là cơ sở để đề xuất công nghệ tiến hành quá trình. Đã nghiên cứu ảnh hưởng của tốc độ pha loãng đến độ làm sạch ở dung tích thiết bị không đổi và số đơn nguyên bằng 6.

Ở những lưu lượng nhỏ tức là tốc độ pha loãng thấp đã đạt được nồng độ đầu ra cho trước ở các đơn nguyên 3 và 4, trong đó độ làm sạch là 82 – 87%. Điều này minh chứng cho việc thiết bị với dung tích như vậy sử dụng ở nồng độ đầu vào là $S_0 = 60 \text{ gCOD/m}^3$ và lưu lượng nước nhỏ hơn $30 \text{ m}^3/\text{h}$ không hiệu quả.

Nhờ mô hình đã khảo sát cả ảnh hưởng của tốc độ pha loãng đến độ làm sạch ở những nồng độ ban đầu khác nhau theo COD. Sau đó, đối với các điều kiện này đã tính cả tốc độ của quá trình làm sạch (hình 3.20).



Hình 3.20. Sự phụ thuộc của độ làm sạch nước ε (3,4) và tốc độ làm sạch chất bẩn ω (1,2) trong thiết bị vào tốc độ pha loãng D

$$1,3 S_0 = 60 \text{gCOD/m}^3 \quad 2,4 \quad S_0 = 80 \text{gCOD/m}^3$$

Từ những đường cong nhận được ta thấy với việc tăng tốc độ pha loãng ở dung tích không đổi của thiết bị thì tốc độ quá trình loại bỏ chất hữu cơ cũng tăng lên. Ngoài ra, có thể nhận thấy rằng ở $S_0 = 80 \text{gCOD/m}^3$ tốc độ làm sạch lớn hơn ở 60gBOD/m^3 . Như vậy, thiết bị phản ứng với dung tích như thế có thể sử dụng ở những nồng độ các chất bẩn cao hơn mà điều đó có thể có trên thực tế.

Khi kiểm tra ảnh hưởng của nồng độ đầu vào đến độ làm sạch nước, người ta thấy rằng với việc tăng S_0 độ làm sạch đối với thể tích đã cho giảm đi. Độ làm sạch cao hơn nhận được ở lưu lượng $30 \text{m}^3/\text{h}$. Điều này đúng hơn về mặt logic, bởi vì ở trường hợp đầu tiên khoảng thời gian tiếp xúc của vi sinh vật với nước bẩn lớn hơn là ở trường hợp thứ hai.

Với việc tăng lưu lượng nước đầu vào ở dung tích thiết bị phản ứng sinh hoá không đổi và ở hai nồng độ ban đầu cho trước, nồng độ chất bẩn ở đầu ra thiết bị tăng lên tức là ở những nồng độ ban đầu cao và những tốc độ dòng cao thì nước không kịp làm sạch.

Như vậy, để đưa nồng độ đầu ra của chất bẩn đến tiêu chuẩn vệ sinh cần thiết (trong trường hợp của chúng ta là 10gCOD/m^3), cần phải tăng số đơn nguyên.

Nhờ mô hình toán học cũng đã thử dự đoán số đơn nguyên đối với những lưu lượng ban đầu L và nồng độ ban đầu S_0 . Đã xác định ảnh hưởng của L và dung tích thiết bị phản ứng sinh hoá tương ứng đến thời gian lưu của nước trong thiết bị, trong đó đạt được độ làm sạch đã cho. Ví dụ, để đảm bảo $\bar{x} > 80\%$ ở $S_0 = 60\text{ gCOD/m}^3$ và $L = 80\text{ m}^3/\text{h}$ cần thiết bị phản ứng dung tích $V = 50\text{ m}^3$ và thời gian lưu $0,63\text{ h}$, còn ở $L = 80\text{ m}^3/\text{h}$ và $S_0 = 80\text{ gCOD/m}^3$ dung tích cần thiết của thiết bị sẽ là 66 m^3 , còn thời gian lưu trong nó $0,82\text{ h}$. Như vậy, việc phân tích chỉ ra rằng ở những lưu lượng giống nhau và ở những nồng độ ban đầu S_0 bằng 80 và 60 gCOD/m^3 , để đạt được nồng độ đầu ra cần thiết với nồng độ ở đầu vào thấp hơn, cần thời gian lưu nhỏ hơn.

Việc xác định các thông số tối ưu hoạt động của thiết bị ở lưu lượng không khí thấp nhất là một trong những mục đích cơ bản của tính toán thiết bị.

Hiện nay, tiết kiệm với chất lượng cao của nước làm sạch – vấn đề cực kì cấp bách. Vì vậy, đã tính toán profin nồng độ theo COD ở nồng độ đầu vào và số đơn nguyên cho trước, còn lưu lượng không khí G vào mỗi đơn nguyên giữ không đổi bằng $25\text{ m}^3/\text{h}$. Một profin như thế quan sát được ở cả điều kiện thực. Cũng rất thú vị kiểm tra thiết bị phản ứng sẽ hoạt động như thế nào khi giảm lưu lượng không khí theo những đơn nguyên tương ứng. Ý tưởng này được quy định bởi điều kiện sau: nồng độ COD theo các đơn nguyên ở đầu ra giảm, vì thế lượng ôxi cần thiết để giữ cho hoạt động sống của vi sinh vật và ôxi hoá cơ chất cũng phải giảm. Nhờ mô hình đã tiến hành các tính toán với việc giảm lưu lượng không khí theo mỗi đơn nguyên.

Profin nồng độ theo COD đối với từng đơn nguyên nhận được không khác profin cho trường hợp khi lưu lượng không khí không đổi. Điều này cho phép đối với quá trình làm sạch thực tế ở dung tích thiết bị cho trước đề xuất phương án giảm dần lượng không khí từ đơn nguyên đầu tiên đến đơn nguyên cuối cùng. Với chế độ làm việc như thế tiết kiệm lưu lượng không khí đạt 14% . Kết quả hoạt động của thiết bị phản ứng sinh hoá ở chế độ mới được đưa vào bảng 3.5.

**BẢNG 3.5. CATALÔ CÔNG NGHỆ ĐỂ DỰ BÁO HOẠT ĐỘNG CỦA THIẾT BỊ
PHẢN ỨNG Ở YÊU CẦU $S_{RA} \leq 10 \text{ gCOD/m}^3$**

L, m ³ /h	S ₀ , gCOD/m ³			
	40	60	80	100
20	15,24 3 77 0,739	15,24 3 83 0,793	20,32 4 87 0,993	25,4 5 90 1,247
30	15,24 3 77 0,493	20,32 4 83 0,66	30,48 6 87 1,02	30,48 6 90 1,001
40	20,32 4 77 0,497	30,48 6 83 0,751	35,56 7 87 0,878	40,68 8 90 1,005
60	30,48 6 77 0,5	40,64 8 83 0,67	50,80 10 87 0,839	55,88 11 90 0,924
80	35,56 7 77 0,439	50,80 10 83 0,629	66,04 13 87 0,82	76,2 15 90 0,947
100	45,72 9 77 0,453	66,04 13 83 0,656	81,28 16 87 0,808	91,44 18 90 0,91
V N æ τ		V – dung tích chung của thiết bị (m ³) N – số đơn nguyên æ – độ làm sạch (%) τ – thời gian lưu (h)		

Ngoài ra đã khảo sát ảnh hưởng của việc giảm nồng độ sinh khối theo các đơn nguyên đến quá trình làm sạch. Do lượng môi trường nuôi dưỡng và không khí cấp cho sử dụng cơ chất thấp hơn nên cũng cần lượng vi sinh vật ít hơn.

Nếu đi từ lập luận rằng có thể điều chỉnh nồng độ vi sinh vật bằng cách thay đổi lượng chất mang trong vùng phản ứng thì thay đổi lưu lượng không khí có thể làm thay đổi sự phân bố nồng độ vi sinh vật theo các đơn nguyên. Ở đây, chọn profin thay đổi nồng độ sao cho cấp vào thiết bị nhiều không khí hơn ở nồng độ sinh khối cao hơn khi tải trọng cơ chất lớn hơn.

Như vậy, theo tất cả các đơn nguyên, tổng lượng không khí và sinh khối lại nhỏ hơn là trong trường hợp giữ chúng không đổi. Điều này có nghĩa là dẫn đến tiết kiệm vật liệu chất mang và năng lượng.

Để đánh giá tốc độ làm sạch trong thiết bị phản ứng mới, đã so sánh hoạt động của nó ở những nồng độ đầu vào như nhau với hoạt động của bể sinh học truyền thống có 6 máy thổi khí nhúng ngập vào chất lỏng. Bể sinh học có nồng độ cơ chất đầu vào 61gCOD/m^3 cho phép nhận được nồng độ ở đầu ra 17gCOD/m^3 với thời gian lưu 4 giờ, trong khi đó như số liệu thực nghiệm chỉ ra thiết bị mới cho phép nhận được ở đầu ra tới 10g/m^3 với nồng độ đầu vào tận 81g/m^3 và thời gian lưu chỉ có 2 giờ.

Sau khi tất cả những kết quả này đã được tính theo mô hình toán học, ta thấy rõ ràng những kết quả nhận được cho thiết bị phản ứng sinh hoá mới có dung tích nhỏ hơn hai lần dung tích bể sinh học truyền thống. Điều này được giải thích bằng việc các tính toán thực hiện từ đơn nguyên đến đơn nguyên cho đến khi đạt được nồng độ đã cho ở đơn nguyên, còn sau đó dung tích của các đơn nguyên cộng lại và xác định dung tích chung của thiết bị. Ở bể sinh học thực, toàn bộ dung tích thiết bị hoạt động. Khi phân tích những kết quả nhận được thấy rõ là thiết bị phản ứng mới theo các kết quả thực nghiệm có tốc độ làm sạch 3 lần lớn hơn thiết bị truyền thống, còn theo những tính toán lí thuyết tốc độ làm sạch trong thiết bị phản ứng mới cao hơn tốc độ trong bể những 6 lần. Như vậy, đối với bể sinh học đang tồn tại khi tính tới những kết quả nêu trên tốc độ làm sạch sẽ là:

$$\omega_1 = (61,0 - 17,0)/4 = 11\text{ gCOD}/(\text{m}^3.\text{h})$$

Đối với thiết bị phản ứng sinh hoá mới, ở thời gian lưu nhận được bằng thực nghiệm 2 giờ, tốc độ làm sạch là:

$$\omega_2 = (81,0 - 10,0)/2 = 35\text{ gCOD}/(\text{m}^3.\text{h})$$

Trong tính toán theo mô hình toán học đối với $S_0 = 81\text{gCOD/m}^3$, để đảm bảo nồng độ ở đầu ra bằng 10gCOD/m^3 thì dung tích thiết bị phản ứng mới phải bằng 35m^3 , còn tải trọng của nó $35\text{m}^3/\text{h}$. Khi đó thời gian lưu trong thiết bị là 1 giờ còn tốc độ làm sạch sẽ là:

$$\omega_3 = (81,0 - 10,0)/1,0 = 71,0\text{ gCOD}/(\text{m}^3.\text{h})$$

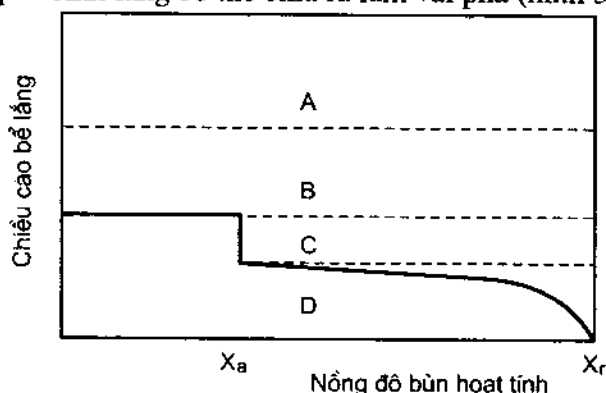
Sự phân tích vừa tiến hành cho phép dự báo việc sử dụng hiệu quả từng mô đun của cấu trúc đề xuất. Để đạt hiệu quả đã nêu trên cần phải lấy đi dòng nước từ mô đun nơi đã đạt được nồng độ yêu cầu ở những tải trọng đầu vào với việc sử dụng dòng tuần hoàn kín R tương ứng (hình 3.15).

3.7. MÔ HÌNH TOÁN HỌC CỦA QUÁ TRÌNH LẮNG

Quá trình lắng là một trong những nhân tố quan trọng của xử lý nước thải, đặc biệt là xử lý bằng phương pháp sinh học. Ta sẽ xem xét cơ chế lắng của các hạt trong bể lắng thứ cấp.

Những yếu tố như kích thước và hình dạng hạt, nồng độ của chúng, độ nhớt môi trường ảnh hưởng đến động học của quá trình lắng. Khi lắng các hạt bông bùn, xảy ra quá trình dính chúng lại với nhau, điều đó làm nhanh quá trình lắng. Cũng cần phải tính tới ảnh hưởng của các yếu tố thủy động về chuyển động chất lỏng trong bể lắng bởi vì trên thực tế quá trình lắng được thực hiện liên tục.

Quan sát quá trình lắng có thể chia ra làm vài pha (hình 3.21).



Hình 3.21. Phân bố nồng độ bùn hoạt tính theo chiều sâu của bể lắng

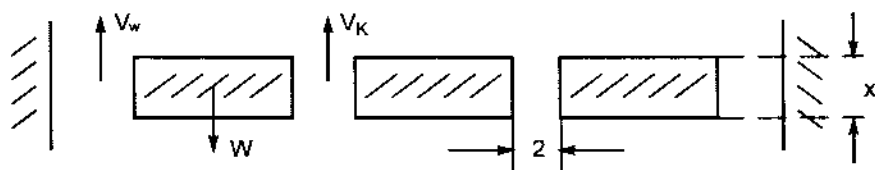
A – vùng trong ($X \approx 0$); B – vùng trung tính ($0 < X < X_a$); C – vùng thành phần không đổi ($X \approx X_a$); D – vùng lèn chặt ($X_a < X < X_r$); (C, D – vùng bùn)

Ở pha thứ nhất (A) các hạt bông đều lắng với tốc độ giống nhau hầu như theo toàn bộ chiều sâu, vì thế nồng độ các hạt bùn ở pha này không đổi. Tốc độ chuyển động của ranh giới trong pha A phụ thuộc vào nồng độ ban đầu của các hạt bông: nồng độ càng lớn, tốc độ lắng càng nhỏ.

Ở pha thứ hai (B) chuyển động của ranh giới xuống dưới chậm dần, xảy ra việc tách lớp chất lỏng trong ra khỏi khối bùn. Điều này liên quan đến việc cùng với tích lũy sinh khối trên đáy thì các lớp phía trên của khối bùn bắt đầu chịu ảnh hưởng kìm hãm từ phía các lớp phía dưới.

Ở pha thứ ba (C) nồng độ các bông bùn trở nên lớn đến nỗi các lớp dưới của chúng lèn chặt lại. Dưới tác động lực ép của các lớp phía trên nước bị đẩy qua khối bùn (pha D), khối lượng riêng của khối bùn tăng lên còn ranh giới phân chia nước đã làm sạch và khối bùn tiếp tục hạ thấp. Phân bố nồng độ bùn hoạt tính theo chiều sâu bể lắng được chỉ ra trên hình 3.21.

Như vậy, trong các bể lắng thứ cấp của công trình đồng thời xảy ra ba quá trình: tách hỗn hợp bùn, làm trong nước, lèn chặt sơ bộ bùn hoạt tính. Để mô tả quá trình làm trong nước đã xử lý qua aeroten ở trong bể lắng thứ cấp E.Eggers và M.Dorn đề xuất "lí thuyết các kênh nhỏ". Người ta coi bùn lắng như là một cái chần chứa đựng trong nó một hệ thống kênh nhỏ phục vụ cho việc đẩy nước qua. Sơ đồ tương ứng thể hiện trên hình 3.22.



Hình 3.22. Sơ đồ quá trình lắng bùn

Bùn (chần) chuyển dịch theo hướng xuống dưới với tốc độ W (so với tường bất động) đồng thời qua các kênh nhỏ có trong bùn nước bị đẩy lên trên với tốc độ V_k (cũng so với tường bất động) và tốc độ V_w khi xem xét dòng dọc theo tường.

Mô hình đã được xây dựng cho các điều kiện lắng trong đó không có sự gia tăng hay giảm hãm tức là W , V_k , V_w là những đại lượng không đổi. Sự thiếu vắng gia tăng hay giảm hãm chuyển động của bùn ở vùng xem xét có nghĩa là lực tổng tác động lên bùn bằng không. Từ đó trọng lực tác động lên bùn sẽ bằng lực chuyển dịch tổng xuất hiện do kết quả chênh lệch tốc độ vận chuyển của bùn và chất lỏng. Cân bằng lực được viết như sau:

$$F_z = F_s + F_w$$

Trong đó: F_z – trọng lực tác động lên lớp bùn; F_s và F_w – các lực chuyển dịch tác động lên bùn thể hiện bởi dòng chảy chất lỏng theo các kênh nhỏ và dòng chảy chất lỏng dọc theo tường của bể lắng.

Đến lượt mình, trọng lực F_z tác động lên lớp bùn chiều dày ΔX sẽ bằng:

$$F_z = C_v(\rho_b - \rho_n)gS\Delta X$$

Trong đó: C_v – nồng độ thể tích của bùn; ρ_b – khối lượng riêng của bùn cùng nước trong nó; ρ_n – khối lượng riêng của nước; g – gia tốc trọng trường; S – tiết diện bề lửng hình trụ.

Đối với lực chuyển dịch F_s tính cho lớp bùn ΔX có thể viết:

$$F_s = n\pi R^2 \Delta P_k$$

Trong đó: n – số kênh nhỏ trong tiết diện; R – bán kính trung bình của kênh nhỏ trong bùn; ΔP_k – chênh lệch áp suất trong kênh nhỏ chiều dài ΔX .

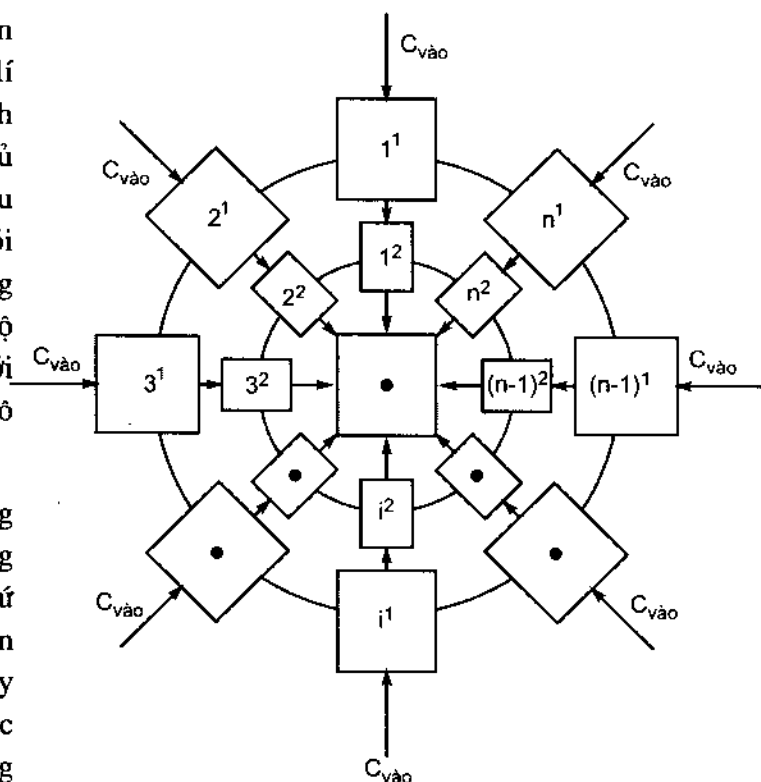
Bằng cách biến đổi tiếp theo đã nhận được quan hệ giữa tốc độ lắng W , nồng độ chất khô C_m và đường kính bề lửng D

$$W = A(D)C_m \exp(-C_m/K)$$

Trong đó: $A(D)$ – đại lượng đặc trưng ảnh hưởng của đường kính bề lửng đến quá trình lắng; K – hằng số đặc trưng ảnh hưởng của bùn.

Mô hình nhận được dựa trên "lí thuyết các kênh nhỏ" ở mức độ đủ thỏa mãn các yêu cầu đòi hỏi khi nói về hình dạng đường cong lắng ở chế độ "lắng theo dõi" với nồng độ chất khô 2,9 – 6 kg/m³.

Quá trình lắng các chất lơ lửng trong bể lắng thứ cấp có thể biểu diễn ở dạng mô hình dây hộp, hơn nữa các hộp trộn lí tưởng nằm theo chu vi bề lửng (hình 3.23).



Hình 3.23. Cấu trúc dòng trong bể lắng

Nước thải đã làm sạch từ aeroten với nồng độ chất lơ lửng (bùn hoạt tính) bằng $C_{\text{vào}}$ đi vào từng hộp. Chất lỏng cần làm sạch từ các hộp n^1 này (ta gọi chúng là bậc đầu tiên) với nồng độ $C_{1\text{ra}}$ (theo chất lơ lửng) cấp vào hộp n^2 của bậc thứ hai, từ đó chất lỏng cần làm sạch lại vào hộp tiếp theo – hộp cuối cùng K với nồng độ $C_{2\text{ra}}$ còn từ nó chất lỏng trong với nồng độ dư C_{ra} chảy ra bằng dòng tổng Q .

Ta sẽ coi các dòng tương hỗ giữa các hộp bậc thứ nhất và bậc thứ hai bởi thường cho nhau bởi vì nồng độ và trường tốc độ trong chúng giống nhau.

Ta mô tả thủy động học của các hộp bằng mô hình trộn lí tưởng. Các dòng cấp như nhau $Q_i = Q/n(\text{m}^3/\text{h})$ vào từng hộp của bậc một và bậc hai. Mô tả toán học của quá trình lắng trong bể lắng thứ cấp có thể biểu diễn ở dạng hệ phương trình:

$$\begin{aligned}\frac{dC_1}{dt} &= \frac{Q}{V_1 n} (C_{\text{vào}} - C_1) \\ \frac{dC_2}{dt} &= \frac{Q}{V_2 n} (C_1 - C_2) \\ \frac{dC_3}{dt} &= \frac{Q}{V_3 n} (C_2 - C_3)\end{aligned}\tag{3.40}$$

Trong đó: V_1, V_2, V_3 – tương ứng là thể tích các hộp bậc một, bậc hai và bậc ba; Q – lưu lượng chung nước thải trong bể lắng thứ cấp; n – số hộp trong bậc.

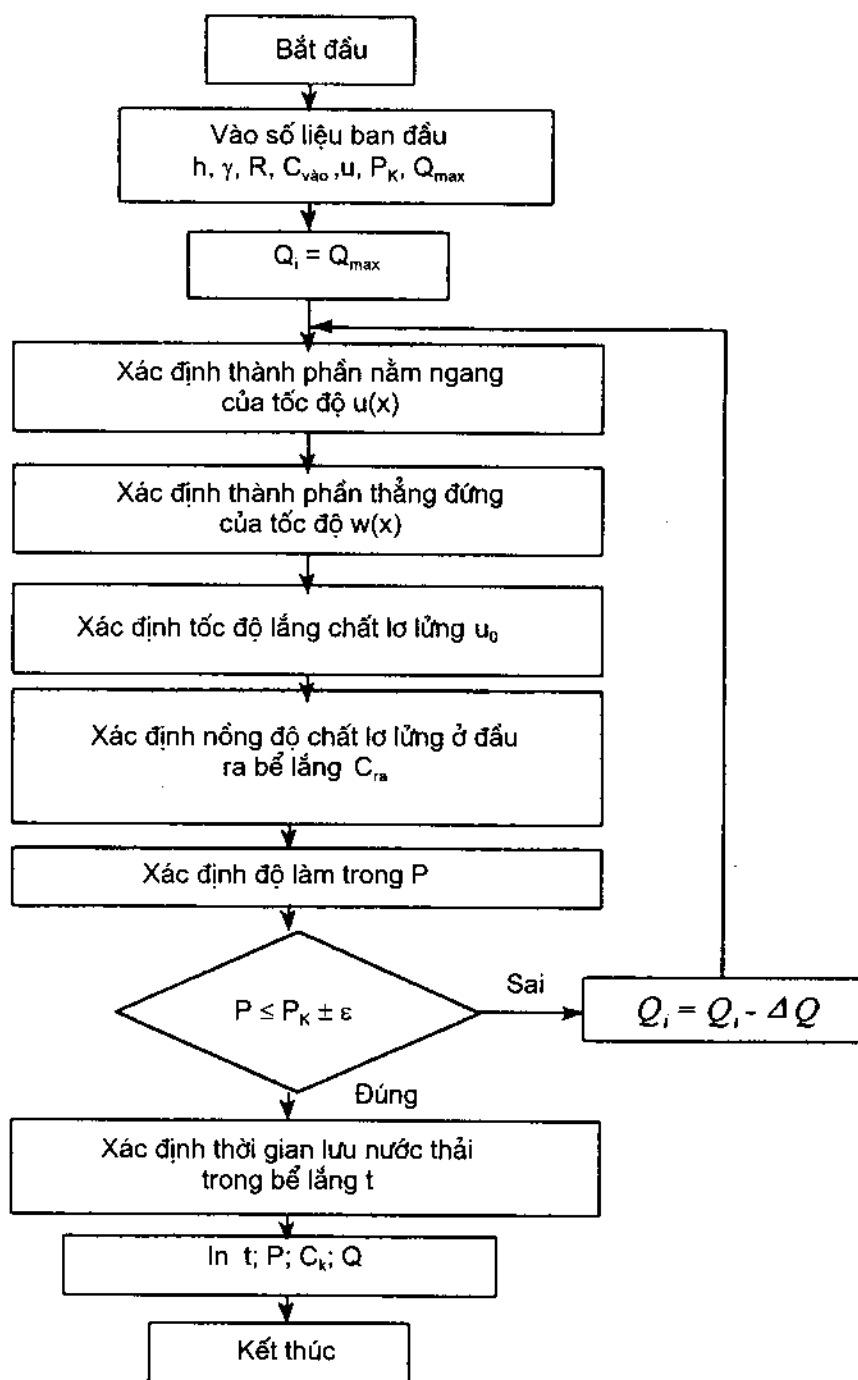
Hệ phương trình (3.40) là mô hình toán học tổng quát của bể lắng.

Thuật toán tính bể lắng thứ cấp (hình 3.24)

Thuật toán dựa trên cơ sở sử dụng sự phụ thuộc của thành phần nằm ngang tốc độ chuyển động của nước vào khoảng cách x

$$u(x) = \frac{dx}{dt} = \frac{Q}{2\pi x(H - \gamma x)}$$

Trong đó: x – khoảng cách từ tâm bể lắng đến điểm mà ở đó xác định tốc độ nằm ngang; H – chiều sâu của bể lắng ở tâm; γ – độ nghiêng của đáy bể lắng.



Hình 3.24. Sơ đồ khối thuật toán tính bể lắng thứ cấp

Tốc độ lắng của chất lơ lửng được xác định là :

Thứ tự tính bể lắng hướng tâm

1. Bắt đầu

2. Cho trước các giá trị: h – chiều sâu phần dòng chảy của bể lắng; γ ; R – bán kính; C – nồng độ các chất lơ lửng; $u(x)$ – tốc độ lắng của các hạt lơ lửng (được xác định bằng thực nghiệm theo đường cong lắng); P_K – độ làm trong; $Q_{\max}$ – lượng nước cấp cực đại có thể sau aeroten; ΔQ .

3. Gán giá trị $Q_{\max}$ cho đại lượng Q

4. Xác định thành phần nằm ngang theo công thức:

$$u(x) = Q / (2\pi x(h + xtg\gamma))$$

5. Xác định giá trị của thành phần thẳng đứng của tốc độ

$$W(x) = \frac{1}{26} u(x)$$

6. Xác định giá trị tốc độ lắng u_0 ở chế độ rơi chuyển động của nước (lơ lửng) đặc trưng cho bể lắng; sự lắng của các hạt bị kìm hãm bởi sự có mặt của thành phần thẳng đứng $W(x)$

$$u_0 = u(x) - W(x)$$

7. Xác định giá trị của nồng độ chất lơ lửng ở đầu ra bể lắng

$$C_{ra} = C_{vào} \exp(-\tau/t)$$

8. Xác định giá trị của độ làm trong P ở đầu ra bể lắng:

$$P = [(C_{vào} - C_{ra}) / C_{vào}] \cdot 100$$

9. Kiểm tra sự tuân thủ điều kiện độ làm sạch cần thiết. Nếu điều kiện không tuân thủ thì lượng nước cấp từ aeroten vào bể lắng giảm đi một lượng ΔQ và tính toán làm lại từ mục 4. Chu trình này lặp cho đến khi đạt điều kiện $P \leq P_K$.

10. Xác định thời gian lưu của nước thải trong bể lắng

$$t = \frac{V}{Q}$$

11. In kết quả tính toán. Kết quả tính toán gồm có: lượng nước có thể được cấp vào bể lắng để trong đó đạt được độ làm trong cho trước.

3.8. MÔ HÌNH TOÁN HỌC CỦA QUÁ TRÌNH LÀM SẠCH NƯỚC THẢI BẰNG PHƯƠNG PHÁP SINH HỌC

Mô hình toán học của quá trình làm sạch nước thải trong aeroten là một hệ phương trình vi phân có tính tới mô hình sử dụng cơ chất bởi vi sinh vật trong trường hợp tăng trưởng và chết đồng thời của chúng (mô hình Herbert), tùy thuộc vào tổ chức dòng trong aeroten có thể được biến dạng thành những hệ đơn giản hơn.

Như ta đã biết, một trong những sơ đồ tổ chức dòng trong thiết bị thường gặp nhất là cấp tập trung nước thải và bùn hoạt tính. Mô hình toán học (3.12) trong trường hợp này có dạng:

$$\begin{aligned} D \frac{d^2 S}{dl^2} - u \frac{dS}{dl} - \alpha_s \mu_m \frac{SX}{K_1 + S} &= 0 \\ D \frac{d^2 X}{dl^2} - u \frac{dX}{dl} + \mu_m \frac{SX}{K_1 + S} - K_2 X &= 0 \quad (3.41) \end{aligned}$$

với điều kiện biên:

$$\begin{aligned} l = 0 \quad D \frac{dS}{dl} &= u(S - S_{\text{vào}}) \\ D \frac{dX}{dl} &= u(X - X_{\text{vào}}) \\ l = L \quad \frac{dS}{dl} = \frac{dX}{dl} &= 0 \end{aligned} \quad (3.42)$$

Kết quả ta nhận được hệ gồm 2 phương trình vi phân phi tuyến bậc hai với các điều kiện biên ở hai đầu khác nhau.

Ta đưa các hệ (3.41) và (3.42) về dạng vô thứ nguyên:

$$\begin{aligned} \frac{1}{L^2} \frac{d^2 S}{dz^2} - \frac{u}{D} \frac{1}{L} \frac{dS}{dz} - \frac{1}{D} \alpha_s \mu_m \frac{SX}{K_1 + S} &= 0 \\ \frac{1}{L^2} \frac{d^2 X}{dz^2} - \frac{u}{D} \frac{1}{L} \frac{dX}{dz} + \frac{1}{D} \left(\mu_m \frac{SX}{K_1 + S} - K_2 X \right) &= 0 \end{aligned} \quad (3.43)$$

còn điều kiện biên:

$$Z = 0 \quad \frac{1}{L} \frac{dS}{dz} = \frac{u}{D} (S - S_{\text{vào}})$$

$$\frac{1}{L} \frac{dX}{dZ} = \frac{u}{D} (X - X_{\text{vào}})$$

$$Z = 1 \quad \frac{dS}{dZ} = \frac{dX}{dZ} = 0$$

$$\text{Do } Pe = \frac{uL}{D} \text{ và } \frac{L^2}{D} = \frac{L^2}{D} \cdot \frac{u}{u} = \frac{Lu}{D} \cdot \frac{L}{u} = Pe \cdot \bar{\tau}$$

($\bar{\tau}$ – thời gian lưu trung bình), hệ phương trình (3.43) được đưa về dạng:

$$\begin{aligned} \frac{d^2S}{dZ^2} &= Pe \frac{dS}{dZ} - Pe \bar{\tau} \alpha_s \mu_m \frac{SX}{K_1 + S} \\ \frac{d^2X}{dZ^2} &= Pe \frac{dX}{dZ} + Pe \bar{\tau} \left(\mu_m \frac{SX}{K_1 + S} - K_2 X \right) \end{aligned} \quad (3.44)$$

với điều kiện biên:

$$\begin{aligned} Z = 0 \quad \frac{dS}{dZ} &= Pe (S - S_{\text{vào}}) \\ \frac{dX}{dZ} &= Pe (X - X_{\text{vào}}) \\ Z = 1 \quad \frac{dS}{dZ} &= 0 \\ \frac{dX}{dZ} &= 0 \end{aligned}$$

Giải hệ này có thể bằng một trong những phương pháp giải bài toán biên, ví dụ phương pháp bắn. Để làm việc này ta cho trước những giá trị gần đúng của nồng độ cơ chất (S) và bùn hoạt tính (X) ở trong aeroten – những giá trị này sẽ khác nồng độ cơ chất $S_{\text{vào}}$ và bùn hoạt tính $X_{\text{vào}}$ (ngoài aeroten), hơn nữa S sẽ hơi nhỏ hơn $S_{\text{vào}}$ còn X lớn hơn $X_{\text{vào}}$ do khuấy trộn dọc.

Vì mô hình toán học (3.44) là hệ phương trình vi phân phi tuyến nên độ chính xác của việc lấy điều kiện biên cho trước có ý nghĩa rất lớn. Lời giải của hệ phụ thuộc vào điều đó. Do đó, chấp nhận $S = S_{\text{vào}}$ và $X = X_{\text{vào}}$ tương tự như trường hợp chế độ đẩy lí tưởng trong trường hợp này là không nên.

Sau khi chọn các giá trị gần đúng S và X , ta xác định theo (3.44) các đại lượng dS/dZ và dX/dZ . Kết quả là bài toán biên được đưa về bài toán Côsi khi các điều kiện biên S , X , dS/dZ cho trước chỉ ở một đầu. Việc giải bài toán như thế có thể thực hiện bằng một phương pháp tính bất kì, ví dụ phương pháp Runghe–Kuta.

Như vậy, S và X phải cho trước sao cho ở $Z = 1$ thoả mãn điều kiện:

$$M_{Z=1} = \frac{dS}{dZ} = 0 \quad ; \quad N_{Z=1} = \frac{dX}{dZ} = 0 \quad (3.45)$$

$$\text{Vậy thì } M_{Z=1} = F_1(S, X) \quad ; \quad N_{Z=1} = F_2(S, X) \quad (3.46)$$

tức là bài toán được đưa về giải hệ hai phương trình đại số:

$$F_1(S, X) = 0$$

$$F_2(S, X) = 0 \quad (3.47)$$

Nếu không tuân thủ điều kiện (3.47) ta tìm những giá trị gần đúng với S và X (bằng phương pháp Niuton–Rafxôn) và đối với chúng tìm những giá trị mới của $M_{Z=1}$ và $N_{Z=1}$. Quá trình giải tiếp tục cho đến khi thoả mãn điều kiện (3.45).

Cần nhấn mạnh rằng việc giải các phương trình dạng (3.44) là một bài toán phức tạp bởi vì ở đây xuất hiện các hiện tượng của tính không ổn định và sai số tính toán bắt đầu tích lũy và tăng dần. Kết quả là không phải bao giờ cũng tìm được nghiệm của hệ (3.46). Điều này quan sát được khi S và X ta cho trước những giá trị thiếu độ chính xác cần thiết. Vì thế, việc giải cần được tiến hành ở những giá trị Pe nhỏ, ví dụ $Pe = 0,1$ khi đó hệ ổn định. Đối với chuẩn số Pe này, cho trước các giá trị S và X sau đó tiến hành tính toán tiếp theo như đã xem xét ở trên. Các giá trị tính toán nhận được S và X ở $Z = 0$ đối với $Pe = 0,1$ sẽ là những giá trị gần đúng S và X ở $Z = 0$ đối với $Pe = 0,2$, còn giá trị tính toán S và X đối với $Pe = 0,3 \dots$ Tiếp tục giải cho đến khi thoả mãn điều kiện $Pe = Pe_K$ (Pe_K – là giá trị cho trước).

Trong trường hợp hoạt động của aeroten ở chế độ cấp nước thải kiểu phân tán cũng như khi sử dụng các máy thổi khí cơ học, mô hình toán học của quá trình làm sạch nước thải bằng phương pháp sinh hoá (3.12) như đã nói ở trên biến thành mô hình dây hộp với dòng ngược (3.21), (3.22) và là một hệ phương trình đại số phi tuyến. Việc giải hệ này được thực hiện bằng phương pháp Niuton–Rafxôn.

Xin giới thiệu những thông tin về thuật toán chuyển hệ 4 phương trình vi phân về hệ các phương trình đại số.

$$\text{Ta kí hiệu } R_1 = \frac{dS}{dZ}, R_2 = S, R_3 = \frac{dX}{dZ}, R_4 = X$$

$$\text{và viết } \frac{d^2S}{dZ^2} = \frac{dR_1}{dZ}, \frac{d^2X}{dZ^2} = \frac{dR_3}{dZ}$$

Khi đó hệ (3.43) có dạng:

$$\frac{dR_1}{dZ} = PeR_1 - Pe\tau\alpha_s\mu_m \frac{R_2R_4}{K_1 + R_2}$$

$$\frac{dR_2}{dZ} = R_1$$

$$\frac{dR_3}{dZ} = PeR_3 + Pe\tau\left(\mu_m \frac{R_2R_4}{K_1 + R_2} - K_2R_4\right)$$

$$\frac{dR_4}{dZ} = R_3$$

Với điều kiện biên:

$$\begin{array}{ll} Z = 0 & \begin{array}{l} R_1 = Pe(R_2 - S_{\text{vào}}) \\ R_3 = Pe(R_4 - X_{\text{vào}}) \end{array} \\ Z = 1 & \begin{array}{l} R_1 = 0 \\ R_3 = 0 \end{array} \end{array}$$

Ta đưa bài toán biên về bài toán Còsi

$$(I) \quad Z = 0 \quad R_1 = Pe(R_2^0 - S_{\text{vào}})$$

$$(II) \quad Z = 0 \quad R_2 = R_2^0$$

$$(III) \quad Z = 0 \quad R_3 = Pe(R_2^0 - X_{\text{vào}})$$

$$(IV) \quad Z = 0 \quad R_4 = R_4^0$$

Các đại lượng $R_2 = S$ và $R_4 = X$ đối với $Z = 0$ ta cho trước. Bây giờ bài toán dẫn về việc giải hệ phương trình đại số dạng (3.47):

$$F_1(R_2^0, R_4^0) = 0$$

$$F_2(R_2^0, R_4^0) = 0$$

Việc giải hệ phương trình này được thực hiện bằng phương pháp Niuton-Rafxôn.

Để kiểm tra độ chính xác của mô hình toán học với quá trình xử lý nước thải thực tế ta tiến hành so sánh số liệu lý thuyết và thực nghiệm. Do một thực nghiệm bất kỳ bao giờ cũng liên quan đến sai số ngẫu nhiên, nên số liệu thực nghiệm không cho phép tìm giá trị thực của các thông số mà chỉ là ước lượng của chúng. Hiện nay, người ta sử dụng những phương pháp khác nhau để đánh giá các thông số: phương pháp bình phương tối thiểu, nguyên lý hợp lý nhất, phương pháp đánh giá trên cơ sở lý thuyết Baiexơ... Để làm được cần có số liệu nhận được từ những xêri thí nghiệm lặp.

3.9. MÔ HÌNH HOÁ TOÁN HỌC QUÁ TRÌNH TẠO BÔNG

Nước thải của các xí nghiệp công nghiệp thường là những hệ dị thể, cấu thành từ các hạt của pha đa phân tán nguồn gốc khác nhau. Người ta tiến hành làm sạch những nước thải như thế bằng cách tách pha rắn phân tán ra khỏi pha lỏng trong bể lắng mà ở đó các hạt keo và phân tán mịn do kết quả của keo tụ (tách dung dịch keo ra hai pha: dung môi và khối keo tụ) và tuyển nổi (đẩy các hạt rắn với bọt khí) mà hợp nhất lại thành những hợp thể lớn hơn. Trong trường hợp keo tụ lực đẩy tĩnh điện giữa các hạt bị loại trừ và xảy ra quá trình lớn lên của các hạt phân tán do tác động tương hỗ giữa chúng. Trong kết quả của bông tụ xảy ra việc liên kết các hạt với sự tham gia của những phân tử mạch dài (các polyme cao phân tử).

Từ quan điểm phân tích hệ thống quá trình hợp thể hoá (keo tụ, bông tụ) xảy ra ở các phần tử của hệ làm sạch nước, có thể chia thành hai mức: mức vi mô và mức vĩ mô (động học vi mô và động học vĩ mô).

Thuộc về các yếu tố động học vi mô gồm tập hợp các hiệu ứng hoá lý quyết định tốc độ xảy ra của các hiện tượng vật lý và hoá học trên mức phân tử và ở thể tích cục bộ của thiết bị.

Động học vĩ mô quyết định hành vi của hệ hoá lý ở quy mô toàn bộ thiết bị. Ở đây là các hiện tượng thuỷ động và khuếch tán tính chất quy mô lớn được gây ra bởi những đặc điểm cấu tạo của các phần tử thiết bị, tính chất cấp nhiệt cho thiết bị, kiểu các máy khuấy trộn...

Chúng ta hãy xem xét động học quá trình keo tụ và bông tụ các hạt lơ lửng.

Để tạo nên các điều kiện của quá trình keo tụ cần làm cho những hạt tạm thời không bền vững nằm ở khoảng cách mà lực kéo tác động giữa chúng (lực Van-đơ-Vanxơ và liên kết hoá học tính cộng hoá trị). Một sự gần nhau như thế nếu được đảm bảo bằng chuyển động nhiệt Braunơ thì ta có keo tụ động học–phân tử hay keo tụ cận động học; còn nếu được đảm bảo bằng chuyển động của dòng chất lỏng thì ta có keo tụ octo – động học.

Keo tụ động học–phân tử kết thúc khi các hợp thể đạt được kích thước từ 1 đến 10µm và thực tế theo thời gian trùng với chu kì phân bố chất keo tụ trong nước khi khuấy trộn. Keo tụ tiếp theo (octo–động học) xảy ra do kết quả sự va chạm lẫn nhau của các hạt pha rắn trên ranh giới của các dòng vĩ mô và vi mô đang chuyển động với những tốc độ khác nhau xuất hiện trong thể tích nước bị khuấy trộn.

Quan hệ động học đặc trưng cho sự thay đổi một phần của nồng độ hạt trong trường hợp keo tụ cận động học ở dạng gián đoạn như sau:

$$\frac{\partial n_k}{\partial t} = 2\pi(D_i - D_{k-i})(R_i + R_{k-i}) \left(\sum_{i=1}^k n_i n_{k-i} - 2n_k \sum_{j=1}^{\infty} n_j \right)$$

Trong đó: $k = 1, 2, 3, \dots, \infty$; D – hệ số khuếch tán; R – bán kính tác động của một hạt; n – nồng độ số hạt.

Phương trình xác định sự va chạm và hợp nhất các hạt với kích thước l và m nhận được từ công thức trên như sau:

$$\left. \frac{\partial n_l}{\partial t} \right|_{Br} = -4\pi(D_l + D_m)(R_l + R_m) n_l n_m$$

Để tính tốc độ hợp thể hoá các hạt trong dòng theo octo động học mà không tính tới khuếch tán M . Xmolukhốpsky đã đề xuất phương trình cải tiến cho trường hợp các hạt với kích thước l và m :

$$\left. \frac{\partial n_l}{\partial t} \right|_{Br} = -\frac{4}{3}(R_l + R_m)^3 n_l n_m \frac{\partial w}{\partial y}$$

trong đó $\frac{\partial w}{\partial y}$ – gradient cục bộ của tốc độ

Trong trường hợp dòng rối phương trình có dạng:

$$\left. \frac{\partial n_l}{\partial t} \right|_{turb} = -\frac{4}{3}(R_l + R_m)^3 n_l n_m \hat{G}$$

Trong đó: $\hat{G}$ – gradient trung bình của tốc độ.

Phương trình này là cơ sở và được sử dụng để đưa ra động học quá trình bông tụ. H.Harris đề xuất phương trình tốc độ thay đổi lượng hạt nguyên khai (sơ cấp) n_1 :

$$-\frac{\partial n_1}{\partial t} = K_0 \delta n_1 \hat{G} = r_0 \quad (3.48)$$

Trong đó: δ – hàm phân bố kích thước xác định số đo mức độ lớn của hạt;

K_0 – hệ số tạo bong.

$$\delta = \frac{\sum_{k=1}^{\infty} n_k \left(1 + k^{\frac{1}{3}}\right)^3}{\sum_{k=1}^{\infty} k n_k}$$

M.Cavanow biến đổi phương trình (3.48):

$$r_0 = K_0 n_1 \hat{G} = -\frac{\partial n_1}{\partial t} \quad (3.49)$$

Phương trình này là cơ bản khi mô tả quá trình hợp thể hoá các hạt trong hệ.

Ngoài ra, hợp thể hoá các hạt trong hệ còn xảy ra cả quá trình ngược – phá vỡ các bong gây ra bởi tác động của dòng rối đến các hợp thể, tác động của gradient tốc độ G , độ chênh lệch áp suất và sự xói mòn bề mặt. Phương trình tốc độ phá vỡ bong có dạng:

$$r_p = K_p n_2 \hat{G}^m \quad (3.50)$$

Trong đó: m – chỉ số mũ (xác định bằng thực nghiệm);

K_p – hệ số phá vỡ bong.

Từ những phân trình bày ở trên ta thấy để mô tả động học quá trình keo tụ và bong tụ cần sử dụng các quy luật tính tới sự hợp thể của các hạt (3.49) và sự phá vỡ một phần của chúng (3.50). Thống nhất chúng ta được:

$$R = r_0 - r_p = K_0 n_1 \hat{G} - K_p n_2 \hat{G}^m \quad (3.51)$$

Để nhận được mô hình toán học đầy đủ của quá trình tạo bong cần bổ sung thêm vào mô hình động học (3.51) mô tả toán học hoàn cảnh thủy động của buồng tạo bong. Khi đó cần chú ý rằng các bong vi mô và vĩ mô chuyển động qua thiết bị giống như các phần tử chất lỏng và sự chuyển động của chúng được mô tả bằng mô hình khuếch tán một tham số, còn nồng độ các hạt lơ lửng n_1 và n_2 được biểu thị tương ứng là C_1 và C_2 . Tính tới điều đó, phương trình mô hình toán học của quá trình tạo bong trong thiết bị ở chế độ ổn định có thể viết ở dạng:

$$D \frac{d^2 C_1}{dl^2} - u \frac{dC_1}{dl} + R = 0 \quad (3.52)$$

Trong đó: D – hệ số khuấy trộn dọc;

u – tốc độ chuyển động của dòng;

l – chiều dài đường đi của dòng.

Thay vào (3.52) phương trình động học tạo bọt (3.51) ta được:

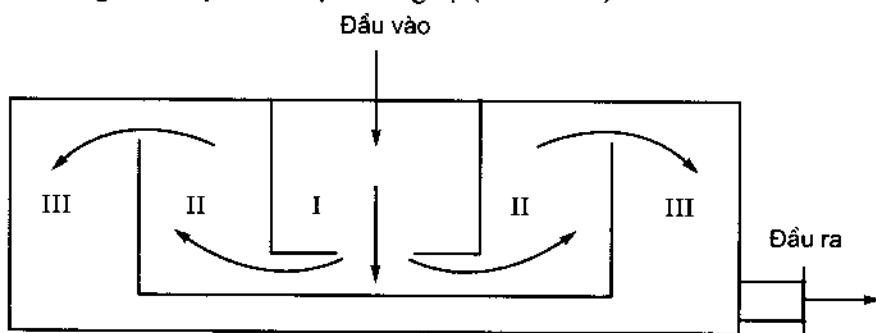
$$D \frac{d^2 C_1}{dl^2} - u \frac{dC_1}{dl} + K_0 \hat{G} C_1 - K_p \hat{G}^m C_2 = 0 \quad (3.53)$$

Đối với phương trình này các điều kiện biên như sau:

$$l = 0 \quad D \frac{dC_1}{dl} = u (C_1|_{l=+0} - C_1|_{l=-0}) \quad (3.54)$$

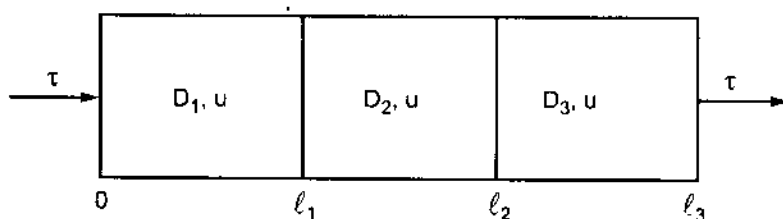
$$l = L \quad \frac{dC_1}{dl} = 0$$

Phương trình (3.53) với điều kiện biên (3.54) là mô tả toán học của quá trình tạo bọt ở một đoạn (đơn nguyên) thiết bị "cánh khuấy hình trụ". Trên thực tế trong thiết bị có 3 đoạn tương tự (hình 3.25)



Hình 3.25. Sơ đồ thiết bị "cánh khuấy hình trụ"

I, II, III - các vùng khuấy trộn của thiết bị



Hình 3.26. Sơ đồ mô hình thiết bị "cánh khuấy hình trụ"

Tính tới những điều vừa trình bày, mô hình toán học đầy đủ của quá trình tạo bông trong thiết bị "cánh khuấy hình trụ" có thể mô tả, theo hình 3.26, ở dạng:

$$D_1 \frac{d^2 C_1}{dl^2} - u \frac{dC_1}{dl} + K_0 \hat{G} C_1 - K_p \hat{G}^m C_2 = 0; \quad 0 \leq l \leq l_1$$

$$D_2 \frac{d^2 C_1}{dl^2} - u \frac{dC_1}{dl} + K_0 \hat{G} C_1 - K_p \hat{G}^m C_2 = 0; \quad l_1 \leq l \leq l_2$$

$$D_3 \frac{d^2 C_1}{dl^2} - u \frac{dC_1}{dl} + K_0 \hat{G} C_1 - K_p \hat{G}^m C_2 = 0; \quad l_2 \leq l \leq L$$

với điều kiện biên:

$$l = 0 \quad D_1 \left(\frac{dC_1}{dl} \right)_0 - u C_{(0)} = 0$$

$$l = l_1 \quad D_1 \left(\frac{dC_1}{dl} \right)_{l_1^-} - u C_{l_1^-} = D_2 \left(\frac{dC_1}{dl} \right)_{l_1^+} - u C_{l_1^+}$$

$$C_{l_1^-} = C_{l_1^+}$$

$$l = l_2 \quad D_2 \left(\frac{dC_1}{dl} \right)_{l_2^-} - u C_{l_2^-} = D_3 \left(\frac{dC_1}{dl} \right)_{l_2^+} - u C_{l_2^+}$$

$$C_{l_2^-} = C_{l_2^+}$$

$$l = L \quad \left(\frac{dC_1}{dl} \right)_L = 0$$

Nếu giả thiết rằng giá trị của hệ số khuấy trộn dọc D ở tất cả các vùng như nhau thì mô hình toán học (3.55) sau những phép biến đổi tương ứng có thể biểu diễn ở dạng vô thứ nguyên:

$$\frac{d^2 C_1}{dZ^2} - Pe \frac{dC}{dZ} - (PeCaK_0 + PeCaK_p \hat{G}^{m-1}) = PeCaK_0 \hat{G}^{m-1} \quad (3.56)$$

với điều kiện biên:

$$l = C_{(0)} - \frac{1}{Pe} \left(\frac{dC}{dZ} \right)_0$$

Ở đây, nồng độ tương đối:

$$C = \frac{C_1}{C_1 + C_2} = 1 - \frac{C_2}{C_1 + C_2}$$

còn đại lượng Pe , chiều dài tương đối của thiết bị (Z) và đại lượng Campa (Ca) tương ứng bằng:

$$Pe = \frac{uL}{D}; \quad Z = \frac{l}{L}; \quad Ca = \bar{G} \cdot \bar{t}$$

Trong đó: $\bar{t}$ – thời gian lưu trung bình

Nghiệm của phương trình đặc trưng (3.56) có dạng:

$$k_{1,2} = \frac{1}{2} \left[Pe \pm \sqrt{Pe^2 + 4PeCa(K_0 + K_p \hat{G}^{m-1})} \right] \quad (3.57)$$

Khi đó nghiệm tổng quát của phương trình (3.56) có thể viết như sau:

$$C = T_1 \exp(k_1 Z) + T_2 \exp(k_2 Z) + \frac{K_p \hat{G}^{m-1}}{K_0 + K_p \hat{G}^{m-1}} \quad (3.58)$$

Để tìm các hệ số T_1 và T_2 ta sử dụng điều kiện biên (3.57):

$$T_1 + T_2 + \frac{K_p \hat{G}^{m-1}}{K_0 + K_p \hat{G}^{m-1}} - \frac{T_1 K_1}{Pe} - \frac{T_2 k_2}{Pe} = 1 \quad (3.59)$$

$$T_1 k_1 \exp k_1 + T_2 k_2 \exp k_2 = 0$$

Sau các phép biến đổi thì:

$$T_1 = \frac{K_0}{(K_0 + K_p \hat{G}^{m-1}) \left[\frac{k_1}{k_2} \exp(k_1 - k_2) - 1 + \frac{1}{Pe} k_1 (\exp k_2 - \exp k_1) \right]}$$

$$T_2 = \frac{K_0}{(K_0 + K_p \hat{G}^{m-1}) \left[1 - \frac{k_1}{k_2} \exp(k_1 - k_2) + \frac{1}{Pe} k_2 (\exp k_2 - \exp k_1) \right]} \quad (3.60)$$

Thay các giá trị T_1 và T_2 vào phương trình (3.58) và ở $Z = 1$ ta được giá trị nồng độ ở đầu ra thiết bị:

$$C|_{Z=1} = \frac{(k_1 - k_2) K_0}{(K_0 + K_p \hat{G}^{m-1}) \left[k_1 \exp k_2 - k_2 \exp k_1 + \frac{1}{Pe} k_1 k_2 (\exp k_1 - \exp k_2) \right]} + \frac{K_p \hat{G}^{m-1}}{K_0 + K_p \hat{G}^{m-1}}$$

Sau biến đổi các phương trình (3.59) và (3.60) có thể viết:

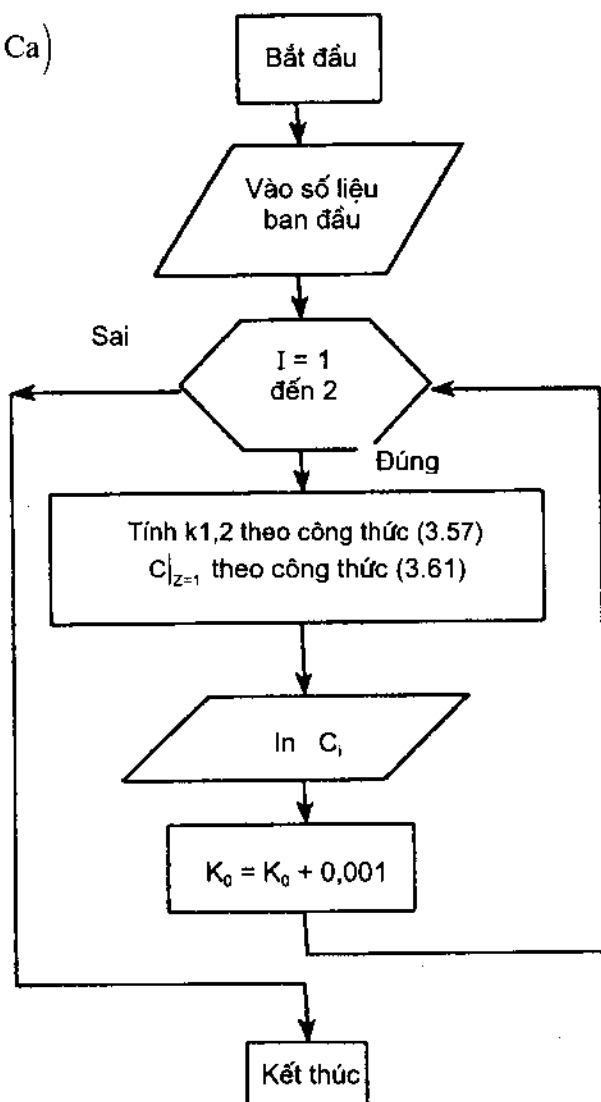
$$C|_{Z=1} = \frac{(k_1 - k_2)K_0Pe}{(K_0 + K_p\hat{G}^{m-1})[k_1^2 \exp(k_1 - Pe) - k_2^2 \exp(k_2 - Pe)]} + \frac{K_p\hat{G}^{m-1}}{K_0 + K_p\hat{G}^{m-1}} \quad (3.61)$$

Từ phương trình (3.61) thấy rằng nồng độ của các hạt nguyên khai ở đầu ra thiết bị ($Z = 1$) là hàm số của 4 thông số:

$$C|_{Z=1} = f(K_0, K_p, \hat{G}, Pe, Ca)$$

Để khảo sát ảnh hưởng của các thông số này đến đại lượng C , ta tiến hành phân tích phương trình (3.61). Trên hình 3.27 đưa ra sơ đồ khối tính nồng độ các hạt nguyên khai ở đầu ra thiết bị khi thay đổi hệ số hình thành bông K_0 từ 0 đến 7.10^{-4} ở những giá trị không đổi của $K_p, \hat{G}$, Pe và Ca .

Hình 3.27. Sơ đồ khối tính nồng độ các hạt nguyên khai ở đầu ra thiết bị với những giá trị khác nhau của hệ số hình thành bông



Sơ đồ khối được sử dụng để tính nồng độ C khi thay đổi các thông số còn lại của mô hình. Kết quả tính toán được đưa vào bảng 3.6.

BẢNG 3.6. SỰ PHỤ THUỘC CỦA NỒNG ĐỘ C VÀO CÁC THÔNG SỐ CỦA MÔ HÌNH K_0 , $K_p \hat{G}$, Pe, Ca

C_n	$K_0 \cdot 10^4$	C_n	$K_p \hat{G} \cdot 10^3$	C_n	$C_n \cdot 10^{-3}$	C_n	Pe
1,0	0,0	0,098	0,0	1,0	0,0	0,291	0,0
0,63	1,0	0,667	1,0	0,626	1,0	0,199	2,0
0,417	2,0	0,8	2,0	0,414	2,0	0,165	4,0
0,287	3,0	0,857	3,0	0,284	3,0	0,147	6,0
0,203	4,0	0,889	4,0	0,202	4,0	0,136	8,0
0,147	5,0	0,909	5,0	0,147	5,0	0,129	10,0
0,109	6,0	0,923	6,0	0,11	6,0	0,123	12,0
0,082	7,0	0,933	7,0	0,084	7,0	0,119	14,0
0,063	8,0	0,941	8,0	0,066	8,0	0,116	16,0
0,049	9,0	0,947	9,0	0,053	9,0	0,113	18,0
0,039	10,0	0,952	10,0	0,043	10,0	0,111	20,0

Phân tích số liệu cho thấy việc tăng hệ số tạo bọt K_0 , đại lượng Ca và chuẩn số Pe dẫn đến tăng cường quá trình tạo bọt. Việc giảm thông số $K_p \hat{G}$ của mô hình cũng kèm theo sự gia tăng quá trình tạo bọt.

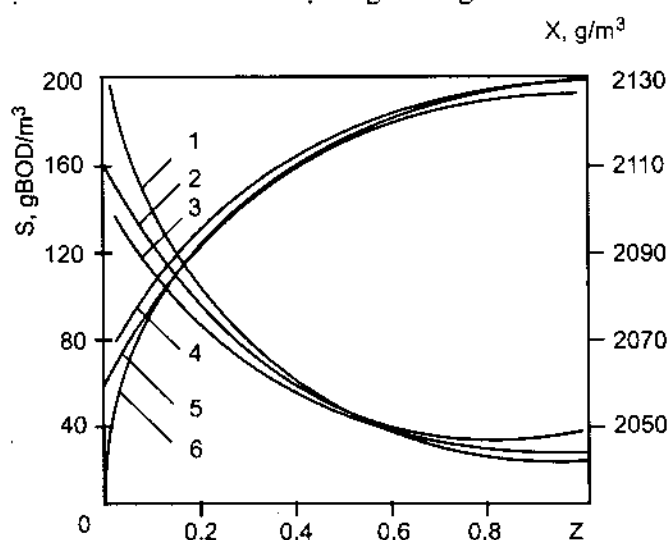
3.10. TỔ CHỨC DÒNG TRONG AEROTEN CỦA QUÁ TRÌNH LÀM SẠCH NƯỚC THẢI BẰNG PHƯƠNG PHÁP SINH HỌC

Ưu điểm của mô hình toán học tổng quát (3.12) là nó tính tới chế độ thủy động, tổ chức dòng trong aeroten và động học sử dụng cơ chất bởi vi sinh vật và do đó nó có thể biến đổi thành những mô hình đơn giản hơn.

Sử dụng tính chất này của mô hình toán học và dựa vào các kết quả nhận dạng các thông số của nó, chúng ta sẽ xác định ảnh hưởng của tổ chức dòng trong aeroten đến quá trình làm sạch nước thải bằng phương pháp sinh học.

3.10.1. Cấp tập trung nước thải và bùn hoạt tính

Quá trình xử lý nước thải bằng phương pháp sinh hoá trong aeroten với việc cấp tập trung nước thải và bùn hoạt tính và lấy đi tập trung nước đã làm sạch được mô tả bằng mô hình khuếch tán một tham số. Đại lượng Pe đặc trưng cho trạng thái thuỷ động trong thiết bị phụ thuộc vào hình học của aeroten và lưu lượng không khí cấp cho việc thông khí. Đại lượng này có thể thay đổi theo mức độ cần thiết. Để đánh giá ảnh hưởng của đại lượng Pe đến diễn biến của quá trình làm sạch nước thải đã tiến hành tính toán theo mô hình (3.43) ở những giá trị Pe khác nhau. Từ kết quả tính toán (3.28) phân bố profin nồng độ cơ chất theo chiều dài aeroten ta thấy chất lỏng cần làm sạch (hỗn hợp nước thải và bùn hoạt tính) với nồng độ chất bẩn $S_{vào} = 240\text{g/m}^3$ và $X_{vào} = 2000\text{g/m}^3$ đi vào aeroten và bị pha loãng rất nhanh do khuấy trộn dọc: ở giá trị cao $Pe = 9,0$ nồng độ chất bẩn S đạt 195g/m^3 còn nồng độ bùn hoạt tính X đạt 2054g/m^3 ; ở giá trị thấp $Pe = 3,0$: $S = 150\text{g/m}^3$, còn $X = 2030\text{g/m}^3$. Nói cách khác, độ pha loãng tỉ lệ thuận với độ khuấy trộn. Đến lượt mình, các giá trị nồng độ cơ chất S và sinh khối X ảnh hưởng đến tốc độ loại trừ chất bẩn và tốc độ tăng trưởng sinh khối.



Hình 3.28. Các đường cong (1,2,3) sử dụng cơ chất (S) và (4,5,6) tăng trưởng sinh khối (X) trong aeroten với cấp tập trung nước thải và bùn hoạt tính

$Pe = 3,0$	(các đường cong 1,4)
$Pe = 7,0$	(các đường cong 2,5)
$Pe = 9,0$	(các đường cong 3,6)

Phân tích quan hệ thay đổi tốc độ sử dụng cơ chất (dS/dt) bởi vi sinh vật ở những giá trị Pe khác nhau chỉ ra rằng khi tăng Pe từ 3,0 đến 9,0 thì tốc độ ôxi hoá chất bẩn cũng tăng lên theo toàn bộ chiều dài thiết bị: ở đầu vào aeroten khi $Pe = 3,0$ thì $dS/dt = -267g/m^3$, còn $Pe = 9,0$ thì $dS/dt = -398g/m^3$ tức là tốc độ sử dụng cơ chất bởi vi sinh vật trong trường hợp thứ hai hơn trường hợp thứ nhất $1319/(m^3.h)$. Điều này nói lên rằng việc tăng Pe lên 3 lần dẫn đến tăng tốc độ ôxi hoá cơ chất bằng bùn hoạt tính ở đầu vào aeroten lên 1,5 lần. Kết quả là độ sâu quá trình làm sạch nước thải khi $Pe = 3,0$ ở đầu ra aeroten đạt $28g/m^3$. Trong khi đó, cũng độ sâu làm sạch như thế với nước thải như nhau cấp vào aeroten để xử lí khi $Pe = 9,0$ đã đạt được ở cuối hành lang thứ ba (3/4 chiều dài tổng) của aeroten bốn hành lang. Từ đó suy ra để tăng năng suất thiết bị cần phải giảm đại lượng khuấy trộn dọc. Điều này có thể đạt được bằng cách giảm lưu lượng không khí cấp cho sục khí. Nhưng điều đó lại dẫn đến: thứ nhất là giảm nồng độ ôxi hoà tan cần cho hoạt động sống của vi khuẩn, thứ hai là có thể tạo nên tình thế không đảm bảo đủ cho việc trộn bùn hoạt tính và cơ chất.

3.10.2. Cấp phân tán đều nước thải và cấp tập trung bùn hoạt tính

Mô hình toán học của trường hợp này là mô hình dãy hộp với dòng ngược. Phân tích số liệu hoạt động của các aeroten cho thấy trong trường hợp cấp phân tán đều nước thải vào aeroten, nồng độ chất lỏng cần làm sạch ở những điểm lấy mẫu sau ở một vài trường hợp cao hơn nồng độ chất lỏng cần làm sạch ở những điểm trước đó. Sự phân bố như thế của profin nồng độ cơ chất theo chiều dài công trình được giải thích trước hết bởi phương pháp tổ chức dòng trong aeroten. Trong trường hợp này toàn bộ dung tích công trình như là được chia ra n phần (ngăn, hộp) – trong đó n là số điểm cấp nước thải vào aeroten. Khi đó nước thải đi vào hộp thứ nhất được pha loãng bằng bùn hoạt tính hồi lưu, với nồng độ $S^p_{lvào}$ được xác định theo công thức:

$$S^p_{lvào} = \frac{S_{vào}G_l + S_b g}{G_l + g} \quad (3.62)$$

Ở đây, G_l, g – lưu lượng khối nước thải và bùn hoạt tính hồi lưu, chỉ số p thuộc S là phân bố đều nước thải với lưu lượng không đổi ở mỗi điểm đầu vào.

Thường thì nồng độ chất bẩn ở trong bùn hoạt tính hồi lưu (S_b) nhỏ nên phương trình (3.62) có thể viết ở dạng:

$$S^p_{lvào} \approx \frac{S_{vào}G_l}{G_l + g} \quad (3.63)$$

Trong hộp một phần chất bẩn bị ôxi hoá bởi bùn hoạt tính đến nồng độ S_1^p .

Cũng như vào hộp đầu tiên, vào hộp thứ hai là nước thải từ dòng chung với lưu lượng $G_2 = G/n$ và nồng độ $S_{vào}$, đồng thời cả chất lỏng cần làm sạch sau hộp đầu tiên với chất bẩn dư S_1^p và lưu lượng khối $Q_1 = G_1 + g$. Như vậy, nồng độ trung bình các chất bẩn cấp vào hộp thứ hai sẽ bằng:

$$S_{2vào}^p = \frac{S_{vào} G_2 + Q_1 S_1^p}{G_2 + Q_1} \quad (3.64)$$

So sánh (3.63) và (3.64) có thể nói rằng giá trị nồng độ $S_{2vào}^p$ cao hơn nhiều giá trị $S_{1vào}^p$. Ngoài ra, thời gian lưu trung bình của chất lỏng ở hộp thứ nhất lớn hơn $t_1 > t_2$. Vì thế, độ sâu làm sạch ở hộp thứ hai phải nhỏ hơn ở hộp thứ nhất tức là $S_2^p > S_1^p$. Như vậy, nước thải với hàm lượng chất bẩn vào hộp thứ ba là nhiều hơn vào hộp thứ hai, nên nồng độ dư ở đầu ra khỏi hộp thứ ba S_3^p sẽ lớn hơn nồng độ dư của chất bẩn sau hộp thứ hai S_2^p . Mở rộng quy luật này cho các hộp tiếp theo có thể viết: $S_i^p > S_{i-1}^p$; $i = 1, 2, \dots, n$.

Như vậy, trong trường hợp cấp phân bố đều nước thải dọc theo aeroten và cấp tập trung bùn hoạt tính ở đầu vào aeroten có thể có tình thế trong đó nồng độ chất bẩn trong chất lỏng cần làm sạch khi chuyển động dọc theo công trình không giảm mà ngược lại còn tăng. Giả thiết này được khẳng định bằng tính toán tiến hành theo mô hình dây hộp với dòng ngược. Nồng độ tổng nước thải cấp vào ống $S_{vào} = 200\text{g/m}^3$ theo BOD₅, lưu lượng khối tổng G trong aeroten bằng $1500\text{m}^3/\text{h}$, lượng bùn hồi lưu g chấp nhận bằng $750\text{m}^3/\text{h}$ ở nồng độ $X_{vào} = 4000\text{g/m}^3$. Tổng dung tích aeroten $V = 4000\text{m}^3$. Hệ số khuấy trộn dọc thay đổi từ 0 đến $2000\text{m}^2/\text{h}$ ở số đầu cấp vào $n = 3, 5, 9, 17$ và 20. Phân tích kết quả tính toán thực hiện ở những giá trị hằng số động học $K_1 = 240\text{g/m}^3$; $K_2 = 0,005\text{h}^{-1}$; $\alpha_s = 1,97\text{g/g}$; $\mu_m = 0,381/\text{h}$ cho thấy nồng độ chất bẩn ở mỗi hộp sau đó lớn hơn ở hộp trước cho bất kì số điểm cấp vào nào. Ví dụ, $n = 3$ nồng độ cơ chất ở hộp thứ nhất $S_1^p = 10,3\text{g/m}^3$, còn ở hộp thứ ba $S_3^p = 14,2\text{g/m}^3$. Với $n = 20$ thì đại lượng $S_1^p = 8,4\text{g/m}^3$, còn $S_{20}^p = 15,7\text{g/m}^3$.

Có thể nhận thấy rằng với việc tăng số điểm đầu vào cấp nước thải nồng độ cơ chất ở các hộp đầu tiên giảm. Điều này được giải thích bởi việc khi tăng số đầu cấp vào n lượng nước thải cấp G_1 giảm đi, do đó độ pha loãng nước thải bằng bùn hoạt tính kèm theo sự chết của vi sinh vật. Nhưng việc tăng số đầu cấp vào dẫn đến giảm độ sâu của làm sạch. Ví dụ, thay đổi số đầu cấp và từ 3 đến 9 ảnh hưởng đáng kể đến profin nồng độ chất bẩn theo chiều dài aeroten, còn ở n từ 17 đến 20 các đường cong sử dụng cơ chất bởi

bùn hoạt tính hầu như không khác nhau. Từ việc phân tích kết quả tính toán quá trình làm sạch nước thải bằng bùn hoạt tính ở những giá trị khác nhau của hệ số khuấy trộn dọc thấy rõ rằng giá trị của hệ số khuếch tán D_T ảnh hưởng đáng kể đến tiến trình của quá trình ở đầu vào aeroten và giảm đi ở đầu ra aeroten. Hiển nhiên, điều này có thể giải thích bởi $\Delta S = S_i - S_{i-1}$ (hiệu số nồng độ chất bẩn) ở lân cận các điểm cấp vào cạnh nhau ở đầu vào aeroten là lớn nhất và giảm dần đến nhỏ nhất ở đầu ra aeroten.

Tóm lại, trong trường hợp cấp phân tán đều nước thải:

1. Nồng độ chất lỏng cần làm sạch ở mỗi hộp sau lớn hơn nồng độ ở hộp trước ($S_i^p > S_{i-1}^p$) với bất kì lượng đầu cấp vào n nào tức là ở mọi $i = 1, 2, \dots, n$.
2. Khi tăng số điểm cấp nước thải vào aeroten n từ 3 đến 20 thì độ pha loãng nước thải bằng bùn hoạt tính tăng lên ở đầu vào aeroten, nhờ đó khắc phục được những ảnh hưởng tiêu cực của tải trọng cao điểm khi xả hàng loạt.
3. Việc tăng hệ số khuấy trộn dọc ảnh hưởng đáng kể đến tiến trình quá trình ở đầu vào aeroten và giảm đi ở đầu ra aeroten.

3.10.3. Cấp phân tán không đều nước thải và cấp tập trung bùn hoạt tính

Những kết quả nhận được của tính toán aeroten áp dụng cho trường hợp cấp phân tán đều nước thải và cấp tập trung bùn hoạt tính chỉ ra rằng phương pháp tổ chức dòng như thế, một mặt cho phép tránh ở mức độ này khác sự chết của vi sinh vật khi xả hàng loạt bởi vì có thể giảm tải trọng theo chất bẩn lên bùn ở phần đầu aeroten. Mặt khác, một tổ chức dòng như thế sẽ dẫn đến giảm cường độ làm sạch. Chính vì thế xuất hiện sự cần thiết phải tìm phương pháp tổ chức dòng trong đó có thể tăng cường độ làm sạch nước thải với việc giữ được tất cả những ưu điểm đặc trưng cho aeroten với việc cấp phân tán đều nước thải.

Một trong những phương pháp như thế là cấp phân tán không đều nước thải. Ưu điểm của phương pháp cấp như thế trước cấp phân tán đều ở chỗ trong phương pháp thứ nhất tổ chức dòng trong aeroten đạt được khả năng có tải trọng đều theo chất bẩn lên bùn trên toàn bộ chiều dài aeroten. Điều này được quy định bởi sự thay đổi của hàm phân bố lưu lượng nước thải theo chiều dài công trình $G_1^H = f(Q, L)$ điều mà hiển nhiên làm tốt hơn các chỉ số hoạt động của aeroten.

Chúng ta hãy xem xét một trong những trường hợp như thế. Giả sử rằng cần cấp nước thải tổng lưu lượng khối $Q \text{ m}^3/\text{h}$ vào aeroten phân tán ở 3 điểm, hơn nữa lưu lượng nước thải cấp vào điểm thứ nhất G_1^H phải lớn hơn lưu lượng nước thải cấp vào điểm thứ hai G_2^H một lượng như G_2^H lớn hơn lưu lượng nước thải cấp vào điểm thứ ba G_3^H , tức là phải thoả mãn điều kiện:

$$G_1^H - G_2^H = G_2^H - G_3^H = \Delta G \quad (3.65)$$

(chỉ số "H" có nghĩa là cấp phân tán không đều nước thải).

Phân bố như thế có được ở điều kiện:

$$G_1 = \frac{5}{9}G; \quad G_2 = \frac{3}{9}G \quad \text{và} \quad G_3 = \frac{1}{9}G$$

Khi đó

$$\Delta G = G_1 - G_2 = G_2 - G_3 = \frac{2}{9}G \quad (3.66)$$

Ta hãy tưởng tượng trong trường hợp cấp vào 4 điểm phân bố nước thải cũng tuân thủ quy luật trên. Khi đó để thoả mãn điều kiện (3.65) cần:

$$G_1 = \frac{7}{16}G; \quad G_2 = \frac{5}{16}G; \quad G_3 = \frac{3}{16}G; \quad G_4 = \frac{1}{16}G$$

Đối với trường hợp này

$$\Delta G = G_1 - G_2 = G_2 - G_3 = G_3 - G_4 = \frac{2}{16}G \quad (3.67)$$

Khi đối chiếu các giá trị ΔG ở các đẳng thức (3.66) và (3.67) có thể thấy rằng tỉ số trong cả hai trường hợp đều bằng 2, còn mẫu số bằng bình phương số điểm cấp vào, tức là:

$$\Delta G = \frac{2}{n^2}G$$

Lưu lượng nước thải cấp vào hộp cuối cùng trong cả hai trường hợp đều bằng:

$$G_n = \frac{1}{n^2}G$$

còn ở các hộp trước nó phải lớn hơn một lượng ΔG và bằng:

$$G_{n-1} = \frac{1}{n^2}G + \frac{2}{n^2}G = \frac{3}{n^2}G = \frac{1+2.1}{n^2}G$$

Tương tự:

$$G_{n-2} = \frac{3}{n^2} G + \frac{2}{n^2} G = \frac{5}{n^2} G = \frac{1+2.2}{n^2} G$$

Như vậy, lưu lượng khối cấp cho các hộp (n-1) và (n-2) được xác định như sau:

$$G_{n-1} = \frac{1+2[n-(n-1)]}{n^2} G$$

$$G_{n-2} = \frac{1+2[n-(n-2)]}{n^2} G$$

Khi đó mở rộng định luật này cho hộp i:

$$G_i = \frac{1+2(n-i)}{n^2} G \quad (3.68)$$

Trong đó: i- số thứ tự hộp hay là số thứ tự điểm cấp vào.

Ta hãy xem xét hoạt động của sơ đồ tổ chức dòng của một aeroten như thế với hoạt động của aeroten với cấp phân tán đều nước thải.

Từ (3.68) suy ra ở điểm cấp vào đầu tiên lưu lượng nước thải bằng:

$$G_1^H = \frac{1+2(n-1)}{n^2} G$$

Khi đó ở $n = 3, 5, 10$ và 15 giá trị của G_1^H tương ứng sẽ là $\frac{5}{9}, \frac{9}{25}, \frac{19}{100}, \frac{29}{225}$

phần của dòng G cấp vào đường nước tổng. Giá trị này của lưu lượng nước thải hầu như 2 lần lớn hơn lưu lượng trong trường hợp cấp tập trung. Kết quả là độ pha loãng bằng bùn hoạt tính của chất bẩn cấp vào aeroten ở những hộp đầu tiên trong trường hợp cấp không đều G_1^H sẽ nhỏ hơn trong trường hợp cấp đều, tức là $S_{1\text{vào}}^P < S_{1\text{vào}}^H$. Ở hộp thứ nhất nước thải được làm sạch đến nồng độ S_1^H và sau khi trộn lẫn với dòng thứ hai sẽ đi vào hộp thứ hai. Nồng độ dư sau hộp thứ nhất S_1^H sẽ lớn hơn nồng độ tương ứng S_1^P vì khối chất bẩn cùng với nước thải cấp vào hộp thứ nhất trong trường hợp thứ hai (cấp không đều nước thải) sẽ hầu như 2 lần lớn hơn trong trường hợp đầu

tiên (cấp đều), còn thời gian lưu trung bình của chất lỏng τ ở hộp đầu tiên ngược lại lại nhỏ hơn: $\tau_1^H < \tau_1^P$. Vì thế, giá trị nồng độ S_2^H sẽ hơi cao hơn S_2^P . Hiệu số $\Delta S^H = S_2^H - S_1^H$ sẽ nhỏ hơn hiệu số $\Delta S^P = S_2^H - S_1^H$. Nhờ vậy trong trường hợp cấp không đều nước thải xảy ra sự san bằng tải trọng lên bùn hoạt tính theo chiều dài aeroten. Điều đó cho phép tiến hành quá trình ôxi hoá cơ chất bởi vi sinh vật ở những điều kiện thuận lợi hơn là trong trường hợp cấp phân tán đều.

Phân tích kết quả tính toán tiến hành trong trường hợp quy luật phân bố nước thải đã xem xét ở cùng những giá trị của các hằng số chỉ ra rằng với việc cấp phân tán không đều nước thải, nồng độ chất bẩn ở đầu aeroten tăng dần và đạt cực đại sau đó giảm dần và ở đầu cuối cùng aeroten đạt cực tiểu. Điều này xảy ra vì trong phương pháp tổ chức dòng trên: 1) một phần cơ bản nước thải được cấp ở đoạn đầu tiên của aeroten, còn phần còn lại (rất ít) được phân bố theo các đoạn sau đó; 2) trong quá trình chuyển động của chất lỏng cần làm sạch xảy ra sự loại bỏ chất bẩn. Ta cũng nhấn mạnh rằng tăng số điểm cấp nước thải vào aeroten dẫn đến tăng độ pha loãng chất bẩn bằng bùn hoạt tính ở đầu aeroten (cũng cho cả trường hợp cấp phân tán đều nước thải). Độ sâu làm sạch ở cuối aeroten trong trường hợp này (với việc tăng số điểm cấp vào n) cũng tăng lên khác với trường hợp cấp đều thì tăng số điểm cấp vào lại dẫn đến giảm độ sâu làm sạch. Điều này có thể được giải thích như sau: trong cấp phân tán đều nước thải ở đoạn phía đầu aeroten lượng chất bẩn thấp nhất, trong khi đó cũng trên đoạn này nồng độ vi sinh vật lại lớn nhất và vì thế bùn hoạt tính không làm việc hết tải của mình. Ở phương pháp cấp phân tán không đều nước thải, bùn hoạt tính lại được nạp đều hơn ngay từ đoạn phía đầu aeroten, do đó đảm bảo năng suất cao của aeroten. Ảnh hưởng của khuấy trộn dọc đến quá trình sử dụng cơ chất bằng bùn hoạt tính trong trường hợp cấp phân tán không đều nước thải cũng giống như trong trường hợp cấp phân tán đều nước thải.

Chương IV

MÔ HÌNH HOÁ QUÁ TRÌNH XỬ LÝ NƯỚC THẢI BẰNG PHƯƠNG PHÁP SINH HỌC KỊ KHÍ

4.1. MỞ ĐẦU

Quá trình xử lý nước thải bằng phương pháp sinh học kị khí có một số ưu điểm. Trước hết đó là sự hình thành sản phẩm phụ có ích như khí metan làm chất đốt, dung dịch humic được sử dụng làm phân bón. Ngoài ra, bằng phương pháp sinh học kị khí có thể phân huỷ được những hợp chất ngoại lai với giới sinh vật (xenobiotic) bởi chỉ những vi sinh vật sống trong điều kiện kị khí mới có khả năng chuyển hoá chúng. Tuy nhiên, quá trình phân huỷ kị khí chưa được sử dụng rộng rãi trong thực tế. Vấn đề cơ bản liên quan đến việc điều khiển nó. Hiện tại kiến thức điều khiển mới chỉ bao gồm tập hợp những quy tắc kinh nghiệm, chưa đủ để xây dựng một chiến lược điều khiển hợp lý đảm bảo cho quá trình hoạt động ổn định và có hiệu quả.

Mô hình hoá quá trình xử lý nước thải bằng phương pháp sinh học kị khí là góp phần xây dựng các phương pháp điều khiển quá trình, tăng tính ổn định của nó để có thể khai thác được những ưu điểm của quá trình phân huỷ kị khí, giải quyết tốt các nhiệm vụ đặt ra trước yêu cầu phát triển kinh tế gắn liền với bảo vệ môi trường.

4.2. XÂY DỰNG MÔ HÌNH

Trong khoảng ba chục năm nay đã có nhiều công trình nghiên cứu đề cập đến xây dựng mô hình toán cho quá trình phân huỷ kị khí. Theo dõi ta có thể thấy sự tiến hoá của các mô hình toán.

Ở những mô hình đầu tiên chủ yếu xem xét tới dãy phản ứng xảy ra trong quá trình xử lý kị khí. Đó là những mô hình ổn định (trạng thái dừng) dựa trên cơ sở lý thuyết nuôi cấy liên tục sử dụng quan hệ Monod để mô tả sự tác động tương hỗ giữa nồng độ cơ chất quyết định quá trình và tốc độ tăng trưởng. Tuy nhiên, các mô hình sử dụng quan hệ Monod có thể dự đoán

sự đứt đoạn của quá trình chỉ trong trường hợp quá tải thuỷ lực. Chúng không dùng được cho các cơ chất như axit dễ bay hơi có thể quyết định tăng trưởng ở những nồng độ thấp và ức chế sự phát triển của vi sinh vật ở những nồng độ cao.

Cần phải mở rộng mô hình Monod để dự đoán hành vi của vi sinh vật trong quá trình xử lý nước thải bằng phương pháp sinh học kị khí. Các hiệu ứng ức chế bởi cơ chất được tính tới bằng cách đưa hàm số ức chế vào biểu thức mô tả quan hệ giữa nồng độ cơ chất và tốc độ tăng trưởng. Việc thêm hàm số ức chế này cho phép dự đoán được sự đứt đoạn của quá trình trong trường hợp quá tải thuỷ lực và cả trong trường hợp quá tải chất hữu cơ quan sát được trên thực tế. Ở phương án khác, hàm số ức chế được thay đổi để có thể coi các axit dễ bay hơi không bị ion hoá là cơ chất. Sự thay đổi này rất quan trọng bởi vì nó xúc tiến giải quyết những bất đồng tồn tại về việc sự ức chế có phải là hậu quả của nồng độ cao của các axit dễ bay hơi hay là của pH thấp. Do nồng độ của axit không bị ion hoá là hàm số của nồng độ tổng các axit dễ bay hơi và của cả pH nên cả hai yếu tố đều có vai trò.

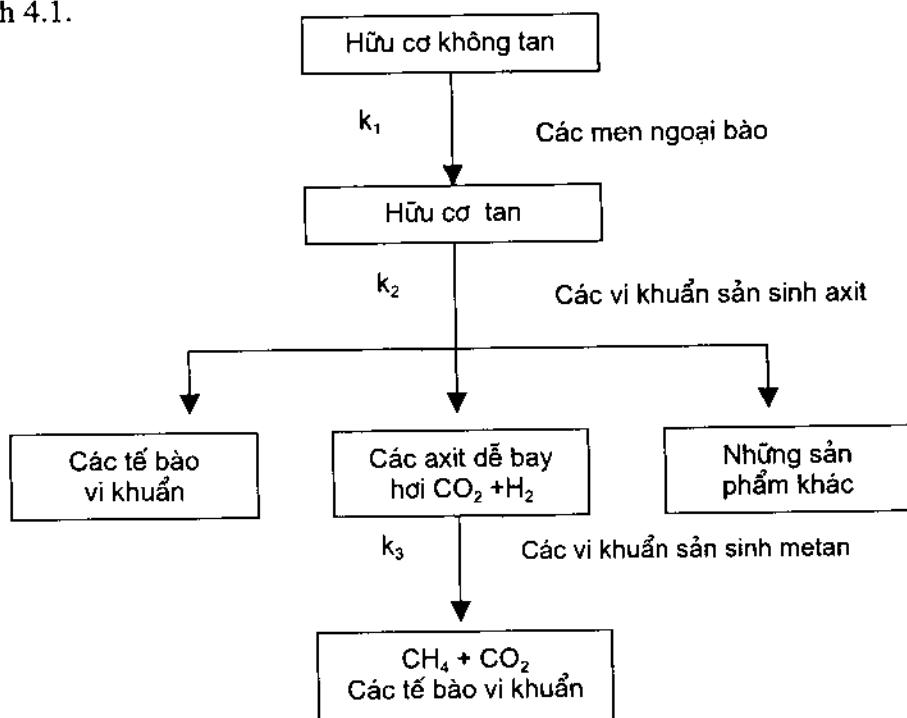
J.F.Andrews và S.P.Graef tiếp tục phát triển mô hình; xem xét các tác động tương hỗ xuất hiện giữa pha lỏng, pha khí và pha sinh học trong thiết bị. Nghiên cứu những tác động lẫn nhau này cho phép xây dựng mô hình dự đoán được hành vi động theo thời gian của năm biến số thường sử dụng để điều khiển quá trình:

- 1 – Nồng độ của axit dễ bay hơi
- 2 – Độ kiềm
- 3 – pH
- 4 – Lưu lượng khí
- 5 – Thành phần khí

Các tác giả cũng đưa vào mô hình hệ thức phản ánh tác động của các chất độc đến quá trình và như vậy mô hình đã được mở rộng đến mức cho phép dự đoán sự đứt đoạn của quá trình gây ra bởi quá tải thuỷ lực cũng như là quá tải bởi các chất hữu cơ và các chất độc. Sử dụng máy tính để mô hình hoá quá trình có thể nghiên cứu ảnh hưởng của sự thay đổi các thông số thiết kế và các thông số vận hành quá trình đến tính ổn định của nó và nghiên cứu sự đa dạng của các chiến lược điều khiển quá trình.

4.2.1 Các phản ứng sinh học

Thường người ta cho rằng quá trình phân huỷ kỵ khí các phế thải hữu cơ phức tạp bao gồm nhiều phản ứng xảy ra kế tiếp nhau như được chỉ ra trên hình 4.1.

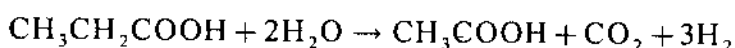
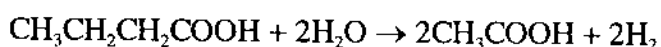


Hình 4.1. Các phản ứng sinh học xảy ra trong quá trình phân huỷ kỵ khí

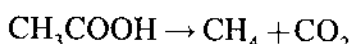
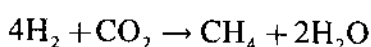
Cần phải lưu ý rằng đây chỉ là sơ đồ gần đúng bởi vì tham gia vào quá trình là một lượng lớn những giống vi sinh vật khác nhau và sự tác động tương hỗ của chúng không phải bao giờ cũng được xác định rõ ràng. Ví dụ có nghiên cứu chứng minh rằng một vài vi khuẩn ngoài khả năng tạo ra metan còn có thể tham gia vào việc chuyển hoá các axit dễ bay hơi thành metan và cacbon đioxit. Tuy nhiên, vì phần lớn các vi khuẩn sản sinh metan có tốc độ tăng trưởng thấp hơn các vi khuẩn sản sinh axit dễ bay hơi nên tổng chuyển hoá các sản phẩm trung gian tức là các axit dễ bay hơi thành metan và cacbon đioxit thường được xem như là giai đoạn quyết định (giới hạn) tốc độ của quá trình. Dưới đây cũng chỉ đề cập đến giai đoạn này. Các vi khuẩn sản sinh metan ngoài ra còn rất nhạy cảm hơn cả các vi khuẩn sản sinh axit đối với những thay đổi điều kiện môi trường như pH, nhiệt độ, nồng độ của các chất ức chế.

Theo sơ đồ trên có hai giai đoạn: giai đoạn sản sinh axit và giai đoạn sản sinh metan. Đối với giai đoạn sản sinh axit chúng ta chỉ nhắc tới axit axetic, axit propionic và axit butiric. Các phản ứng chính như sau:

+ *Giai đoạn sản sinh axit:*



+ *Giai đoạn sản sinh metan:*



Có ba nhóm vi khuẩn kỵ khí chính trong chuyển hoá phế thải hữu cơ phức tạp thành metan:

a) *Nhóm thứ nhất là các vi khuẩn thuỷ phân và lên men*

Clostridium, Streptococcus, Lactobacillus, Escherichia... Chúng chuyển hoá các chất hữu cơ như: cacbohidrat, protein, lipid thành những axit dễ bay hơi, rượu, cacbon đioxit và hiđro. Những axit dễ bay hơi phần lớn là axit butiric, axit propionic và axit axetic.

b) *Nhóm thứ hai là các vi khuẩn sản sinh hiđro*

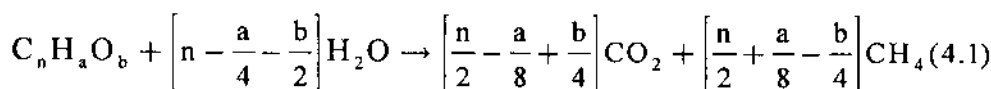
Syntrophomonas wolfei, Syntrophobacter wolinii... Chúng chuyển hoá các sản phẩm của nhóm thứ nhất thành hiđro, cacbon đioxit và axit axetic.

c) *Nhóm thứ ba* bao gồm hai tiểu nhóm vi khuẩn sản sinh metan khác nhau về mặt sinh lí học. Một tiểu nhóm chứa vi khuẩn dưỡng sinh hiđro (hydrogenotrophic bacteria): *Methanobrevibacter, Methanobacterium, Methanoplanus...* Chúng chuyển hoá hiđro và cacbon đioxit thành metan. Tiểu nhóm khác chứa các vi khuẩn dưỡng axetic (Acetotrophic bacteria):

Methanosarcina, Methanotherix ... Chúng chuyển hoá axit axetic thành metan và cacbon đioxit

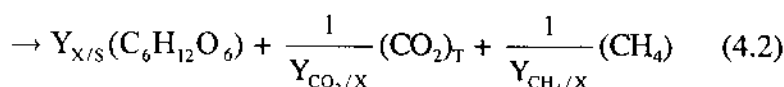
4.2.2. Phép tỉ lượng

A.M Buswell nghiên cứu phân huỷ kỵ khí của nhiều chất hữu cơ và đưa ra công thức chung mô tả chuyển hoá các chất hữu cơ phức tạp thành CO_2 và CH_4 :



Tuy nhiên, công thức này không tính tới phần cơ chất chuyển hoá thành vi sinh vật, tuy là ít ỏi nhưng lại đáng kể trong việc xây dựng mô hình động (dynamic) của quá trình. Dưới đây đưa ra một công thức tổng quát hơn để mô tả sự chuyển hoá các chất hữu cơ thành vi sinh vật, cacbon đioxit và metan:

Các chất hữu cơ

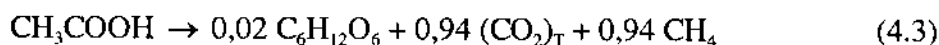


Ở đây $Y_{\text{X/S}}$ – số mol vi sinh vật sinh ra/một mol cơ chất được sử dụng,

$Y_{\text{CO}_2/\text{X}}$ – số mol CO_2 sinh ra/một mol vi sinh vật sinh ra

$Y_{\text{CH}_4/\text{X}}$ – số mol CH_4 sinh ra/một mol vi sinh vật sinh ra

Phương trình dưới đây (4.3) mới là công thức đặc biệt cho trao đổi chất trên axit axetic. Nó được rút ra từ cân bằng ôxi hoá–khử với việc sử dụng các hệ số kinh tế Y tương ứng đã định nghĩa ở trên:



Giả thiết rằng $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$ là thành phần của vi sinh vật. Các giá trị ước lượng $Y_{\text{X/S}}$ đối với axit axetic có công bố trong các công trình nghiên cứu.

P.L McCarthy chỉ ra rằng axit axetic là nguồn của khoảng 70% metan được sinh ra trong quá trình phân huỷ kỵ khí và chính nó được chuyển hoá thành sinh khối. Các hệ số kinh tế sẽ khác đi đối với những axit dễ bay hơi khác. Sự khác nhau của chúng đặc biệt thể hiện rõ ở việc tăng tỉ số metan và cacbon đioxit được sinh ra theo độ tăng chiều dài chuỗi cacbon. Đối với các thiết bị sử dụng những cơ chất phức tạp cần phải tính tới cả cacbon đioxit tạo ra bởi các vi khuẩn sản sinh axit.

Cacbon đioxit tạo ra kí hiệu là $(\text{CO}_2)_T$ vì nó có thể ở dạng tan trong chất lỏng, tham gia vào phản ứng hoá học với việc tạo thành bicacbonat hay cacbonat, chuyển về trạng thái khí hay là kết tủa ở dạng cacbonat. Mức độ xảy ra của tất cả các phản ứng này sẽ phụ thuộc vào sự tác động tương hỗ giữa các axit dễ bay hơi, vào độ kiềm, pH, lưu lượng không khí và cả thành phần của khí. Tất cả các phản ứng này trừ sự hoà tan và kết tủa ở dạng cacbonat đều được xem xét trong mô hình. Metan tạo ra không tham gia vào bất kì phản ứng hoá học nào và do hoà tan kém nên hầu như toàn bộ metan đều chuyển về pha khí.

4.2.3 Mô hình động học

Một trong nhiều quan hệ về lượng đầu tiên mô tả tăng trưởng của vi sinh vật là biểu thức:

$$\frac{dX}{dt} = \mu \cdot X \quad (4.4)$$

Trong đó:

X – nồng độ vi sinh vật (mol/l);

t – thời gian, ngày (ng);

μ – tốc độ tăng trưởng riêng (ng⁻¹).

Về những sinh vật tăng trưởng theo biểu thức này người ta nói rằng chúng có tốc độ tăng trưởng không đổi, hoặc chúng nằm ở pha tăng trưởng logarit. Monod phát hiện rằng tốc độ tăng trưởng riêng thực tế không phải là không đổi mà là phụ thuộc vào nồng độ của một chất dinh dưỡng quyết định nào đó. Ông mô tả sự phụ thuộc này nhờ hàm số hipecbon:

$$\mu = \mu_m \frac{S}{K_s + S} \quad (4.5)$$

Trong đó:

μ_m – tốc độ tăng trưởng cực đại (ngày⁻¹);

K_s – hệ số bão hoà (mol/l).

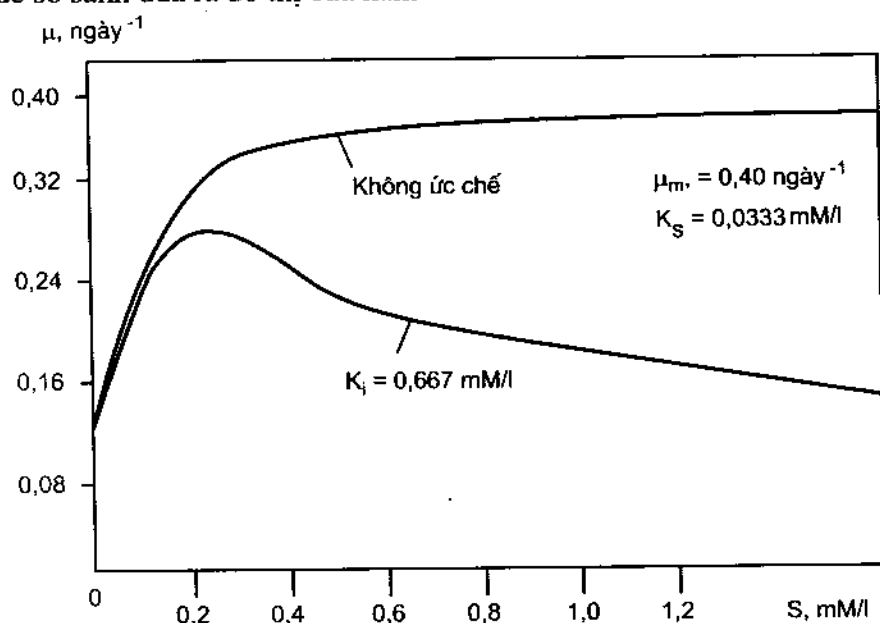
Hàm số này giống như phương trình Michaelis - Menthen được sử dụng để mô tả tác động tương hỗ giữa men và cơ chất. Hàm số Monod như người ta gọi, đến bây giờ vẫn là hệ thức thường dùng để mô tả quan hệ giữa tốc độ tăng trưởng riêng và nồng độ cơ chất tuy rằng người ta cũng đã đề xuất một vài hàm số khác.

Tuy nhiên, hàm số Monod không dùng được cho những cơ chất ví dụ các axit dễ bay hơi quyết định tăng trưởng ở những nồng độ thấp nhưng lại ức chế sự phát triển của vi sinh vật ở những nồng độ cao. J.F.Andrews đề xuất đối với trường hợp này hàm số ức chế:

$$\mu = \mu_m \frac{1}{1 + \frac{K_s}{S} + \frac{S}{K_i}} \quad (4.6)$$

Trong đó: K_i – hệ số ức chế (mol/l).

Sử dụng hàm số này thay cho hàm số Monod cho phép xây dựng mô hình có thể dự đoán sự đứt đoạn của quá trình xuất hiện do kết quả của việc quá tải chất hữu cơ cũng như là trong trường hợp quá tải thủy lực. Trên hình 4.2 để so sánh đưa ra đồ thị của hàm số Monod và hàm số ức chế.



Hình 4.2. Hàm số ức chế và hàm số Monod

Hàm số ức chế có tính chất sau: ứng với mỗi một giá trị của tốc độ tăng trưởng riêng (trừ giá trị lớn nhất) có hai nồng độ khả dĩ của cơ chất. Nồng độ cao hơn trong số hai nồng độ này của cơ chất tương ứng với trạng thái không ổn định của thiết bị trộn lí tưởng hoạt động liên tục. Nhờ sự có mặt của trạng thái này mà mô hình sử dụng hàm số ức chế có thể dự đoán được sự đứt đoạn gây nên bởi quá tải chất hữu cơ của thiết bị.

Dạng tồn tại của cơ chất trong hệ cũng quan trọng. Andrews cải tiến hàm số ức chế theo cách sao cho có thể coi các axit dễ bay hơi không bị ion hoá làm cơ chất quyết định (phương trình 4.8)



$$\mu = \mu_m \frac{1}{1 + \frac{K_s}{HS} + \frac{HS}{K_i}} \quad (4.8)$$

Trong đó: HS – nồng độ cơ chất không bị ion hoá (mol/l);

S – nồng độ cơ chất ion hoá (mol/l);

H⁺ – nồng độ ion hydro (mol/l)..

Đối với các giá trị pH > 6 nồng độ tổng của cơ chất S xấp xỉ bằng nồng độ cơ chất ion hoá S⁻, điều này được phản ánh trong phương trình (4.9). Vì vậy ở một pH và nồng độ cơ chất nhất định có thể tính nồng độ cơ chất không bị ion hoá từ hệ thức cân bằng đối với cơ chất (phương trình 4.10)

$$S = HS + S^- \text{ hay } S \approx S^- \quad (4.9)$$

$$HS + \frac{(H^+)S}{K_a} \quad (4.10)$$

Trong đó: S – nồng độ tổng của cơ chất (mol/l);

K_a – hằng số ion hoá, bằng 10^{-4,5} đối với axit axetic ở nhiệt độ 38°C và lực ion của dung dịch bằng 0,2.

Ảnh hưởng của pH đến hàm số ức chế được thể hiện trên hình 4.3. Có thể thấy rằng, các giá trị pH thấp làm tăng mạnh hơn hiệu ứng ức chế ở những nồng độ cao của cơ chất do sự có mặt nhiều hơn cơ chất không bị ion hoá.

Tuy nhiên, ở những nồng độ tổng thấp của cơ chất, giá trị pH thấp có thể lại thuận lợi hơn bởi vì khi đó có thể có những tốc độ tăng trưởng cao hơn.

Ngoài quá tải thủy lực và quá tải bởi cơ chất hữu cơ, sự đứt đoạn của quá trình còn gây ra bởi các chất độc cấp vào thiết bị. Với tư cách là gần đúng đầu tiên, Graef và Andrews giả thiết rằng việc giảm vi sinh vật do độc hại có thể biểu diễn bằng phương trình bậc một của nồng độ chất độc:

$$r_K = K_T \cdot T_X \quad (4.11)$$

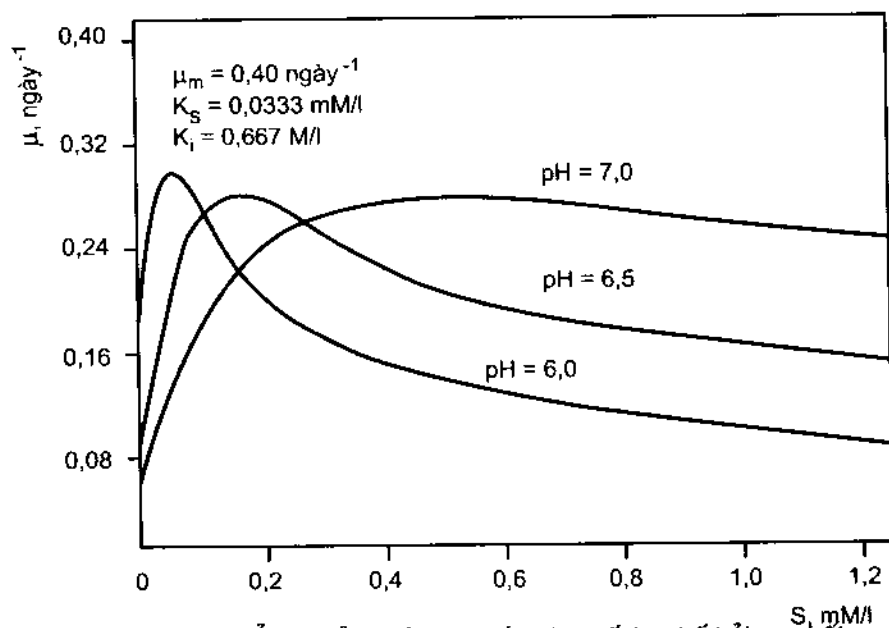
Trong đó:

r_k – tốc độ giảm vi sinh vật (mol/l.ng);

K_T – hệ số độc (số mol vi sinh vật chết trong 1 ngày/mol chất độc);

T_X – nồng độ chất độc (mol/l).

Tốc độ sử dụng cơ chất và tạo thành các sản phẩm như cacbon dioxit và metan có thể được biểu diễn qua tốc độ tăng trưởng vi sinh vật nhờ phép tỉ lượng (phương trình 4.2) và biểu thức đối với tốc độ tăng trưởng (4.14).



Hình 4.3. Ảnh hưởng của pH đến hàm số ức chế bởi cơ chất

Điều này được làm như sau:

$$\frac{dX}{dt} = -Y_{X/S} \frac{dS}{dt} \quad (4.12)$$

$$Q_{CH_4} = DV Y_{CH_4/X} \mu X \quad (4.13)$$

$$R_B = Y_{CO_2/X} \mu X \quad (4.14)$$

Trong đó:

Q_{CH_4} – tốc độ sản sinh metan (l/ng);

D – thể tích 1 mol khí (25,7 l đối với thiết bị ở 38°C và áp suất 1 atm);

V – thể tích chất lỏng trong thiết bị (l).

4.2.4. Các hệ thức khác

Ngoài những hệ thức sinh học kể trên còn cần xem xét một vài hệ thức vật lí và hoá học khác. Các hệ thức cần phải tính tới cho pha lỏng của thiết bị gồm:

Phản ứng hoá học giữa cacbon đioxit hoà tan và bicacbonat (phương trình 4.15), sự cân bằng giữa bicacbonat và cacbon đioxit (phương trình 4.16) và cân bằng ion trong dung dịch (phương trình 4.17, 4.18 và 4.19). Dưới đây là các phương trình đó.



$$\frac{(\text{H}^+)(\text{HCO}_3^-)}{(\text{CO}_2)_D} = K_1 \quad (4.16)$$

$$(\text{H}^+) + (\text{C}) = (\text{HCO}_3^-) + 2(\text{CO}_3^{2-}) + (\text{S}^-) + (\text{OH}^-) + (\text{A}) \quad (4.17)$$

$$(\text{C}) - (\text{A}) = (\text{HCO}_3^-) + (\text{S}) \quad (4.18)$$

$$(\text{HCO}_3^-) = (\text{Z}) - (\text{S}) \quad (4.19)$$

Trong đó:

$(\text{CO}_2)_D$ – nồng độ cacbon đioxit hoà tan (mol/l);

(HCO_3^-) – nồng độ bicacbonat (mol/l);

K_1 – hằng số ion hoá ($10^{-6.0}$ ở 38°C và lực ion của dung dịch 0,2);

C – nồng độ các cation ngoài ion hidro (dl/l);

A – nồng độ các anion ngoài những loại đã chỉ ra ở phương trình (4.17) (dl/l);

Z – nồng độ thuần túy của các cation;

Những phương trình rút gọn đề xuất ở trên đều dựa trên giả thiết mô hình hoạt động ở khoảng pH giới hạn từ 6 đến 8. Trong khoảng pH này có thể bỏ qua các anion (H^+) , (CO_3^{2-}) và (OH^-) khi thành lập các phương trình cân bằng ion. Nồng độ thuần túy của các cation Z có cả một ý nghĩa hoá học hạn chế nào đó bởi vì nó gần bằng nồng độ ion amoni (NH_4^+) . Tốc độ phản ứng hoá học giữa cacbon đioxit hoà tan và bicacbonat rất lớn so với những phản ứng xem xét khác và vì vậy có thể coi là nó xảy ra đến cùng.

Để xác định áp suất riêng phần của cacbon đioxit trong pha khí, cần xem xét các tác động lẫn nhau giữa các pha khí và lỏng. Tốc độ tổng của trao đổi cacbon đioxit giữa pha khí và pha lỏng có thể biểu thị nhờ lí thuyết "hai màng" đối với trao đổi khí như phương trình (4.20) dưới đây:

$$T_G = K_L a[(CO_2)_D^* - (CO_2)_D] \quad (4.20)$$

Trong đó: T_G – tốc độ trao đổi khí (mol/l.ng);

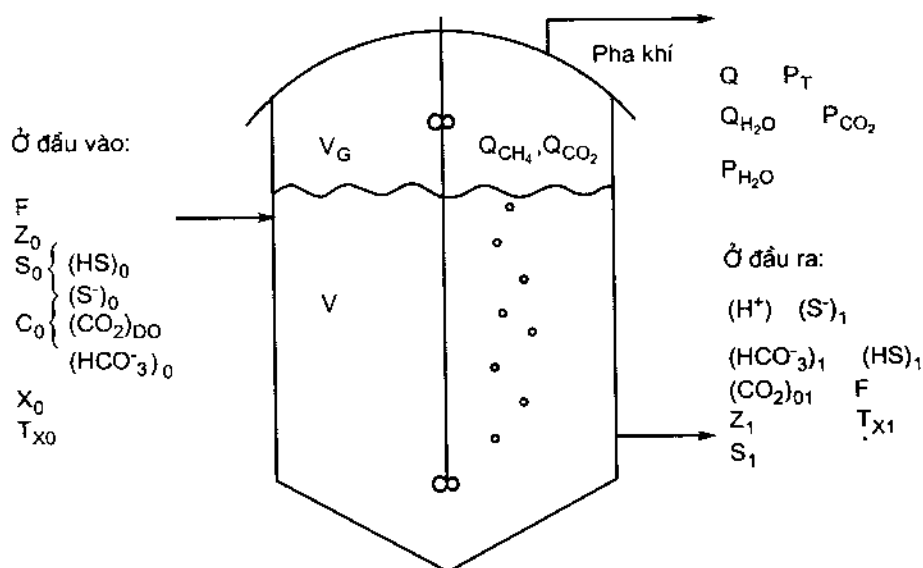
K_L – hệ số trao đổi khí (mol/l.ng);

$(CO_2)_D$ – nồng độ CO_2 hoà tan trong pha lỏng ở điều kiện cân bằng với pha khí (mol/l).

Nồng độ cân bằng của cacbon đioxit hoà tan được tính theo luật Henry

4.2.5. Cân bằng vật liệu

Phần lớn các thiết bị kỹ khí có thể xem xét như là các thiết bị khuấy trộn lí tưởng hoạt động liên tục. Một thiết bị như thế được biểu diễn trên hình 4.4



Hình 4.4. Sơ đồ quá trình phân huỷ kỹ khí

Những phương trình cuối cùng mô tả mô hình động của quá trình có thể viết cho thiết bị theo hình vẽ sau khi ta viết cân bằng vật liệu cho các cấu tử tương ứng với việc sử dụng các hệ thức đã trình bày ở trên. Ở dạng chung cân bằng vật liệu như sau:

$$\begin{array}{ccccccc} \text{Tốc độ cấp} & & \text{Tốc độ xuất} & & \text{Tốc độ thoát} & & \text{Tốc độ tích} \\ \text{chất vào} & + & \text{hiện và biến} & = & \text{của chất ra} & + & \text{luỹ chất} \\ \text{thiết bị} & & \text{mất của chất} & & \text{khỏi thiết bị} & & \text{trong thiết bị} \\ & & \text{do phản ứng} & & & & \end{array} \quad (4.21)$$

Cần nhớ rằng, đối với các quá trình nhiều pha như là quá trình phân huỷ kị khí có thể cần thiết phải thành lập cân bằng vật liệu cho những cấu tử riêng biệt ở từng pha cùng với xem xét việc chuyển các cấu tử đó từ pha này sang pha khác. Ngoài ra, một hoặc nhiều hơn số hạng của phương trình có thể bằng không và có thể bao gồm hơn một cấu tử.

Phương trình cân bằng vật liệu cho cơ chất tổng sẽ có dạng như sau:

$$V \frac{dS_1}{dt} = F(S_0 - S) = \frac{\mu X_1}{Y_{X/S}} V \quad (4.22)$$

Trong đó:

F – lưu lượng khối của chất lỏng (l/ng);

0 – chỉ số kí hiệu nồng độ đầu vào;

1 – chỉ số kí hiệu nồng độ đầu ra thiết bị.

Phương trình sau sẽ là cân bằng sinh khối:

$$V \frac{dX_1}{dt} = F(X_0 - X_1) + \mu X_1 V - K_T T_X V \quad (4.23)$$

Đối với nồng độ thuần tuý của cation và các chất độc không phân huỷ ta có các phương trình:

$$V \frac{dZ_1}{dt} = F(Z_0 - Z_1) \quad (4.24)$$

$$V \frac{dT_{X_1}}{dt} = F(T_{X_0} - T_{X_1}) \quad (4.25)$$

Đối với cacbon đioxit ở pha khí giả thiết rằng khí hoàn toàn được khuấy trộn ta có:

$$\frac{dP_{CO_2}}{dt} = P_T \cdot D \cdot \frac{V}{V_G} \cdot T_G - \frac{P_{CO_2}}{V_G} \cdot Q \quad (4.26)$$

Trong đó:

P_{CO_2} – áp suất riêng phần của CO_2 ở pha khí (mmHg);

P_T – áp suất tổng của CO_2 và CH_4 ở pha khí của thiết bị (mmHg);

Q – lưu lượng tổng của khí khô $Q_{CH_4} + Q_{CO_2}$ (l/ng);

V_G – thể tích khí trong thiết bị (l).

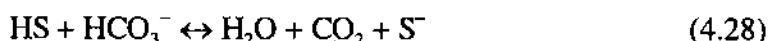
Và cuối cùng cân bằng khối lượng cacbon đioxit hoà tan trong pha lỏng của thiết bị:

$$V \frac{d(CO_2)_{DI}}{dt} = F \{ (CO_2)_{D0} - (CO_2)_{DI} \} + T_G V + R_B \cdot V + R_C \cdot V \quad (4.27)$$

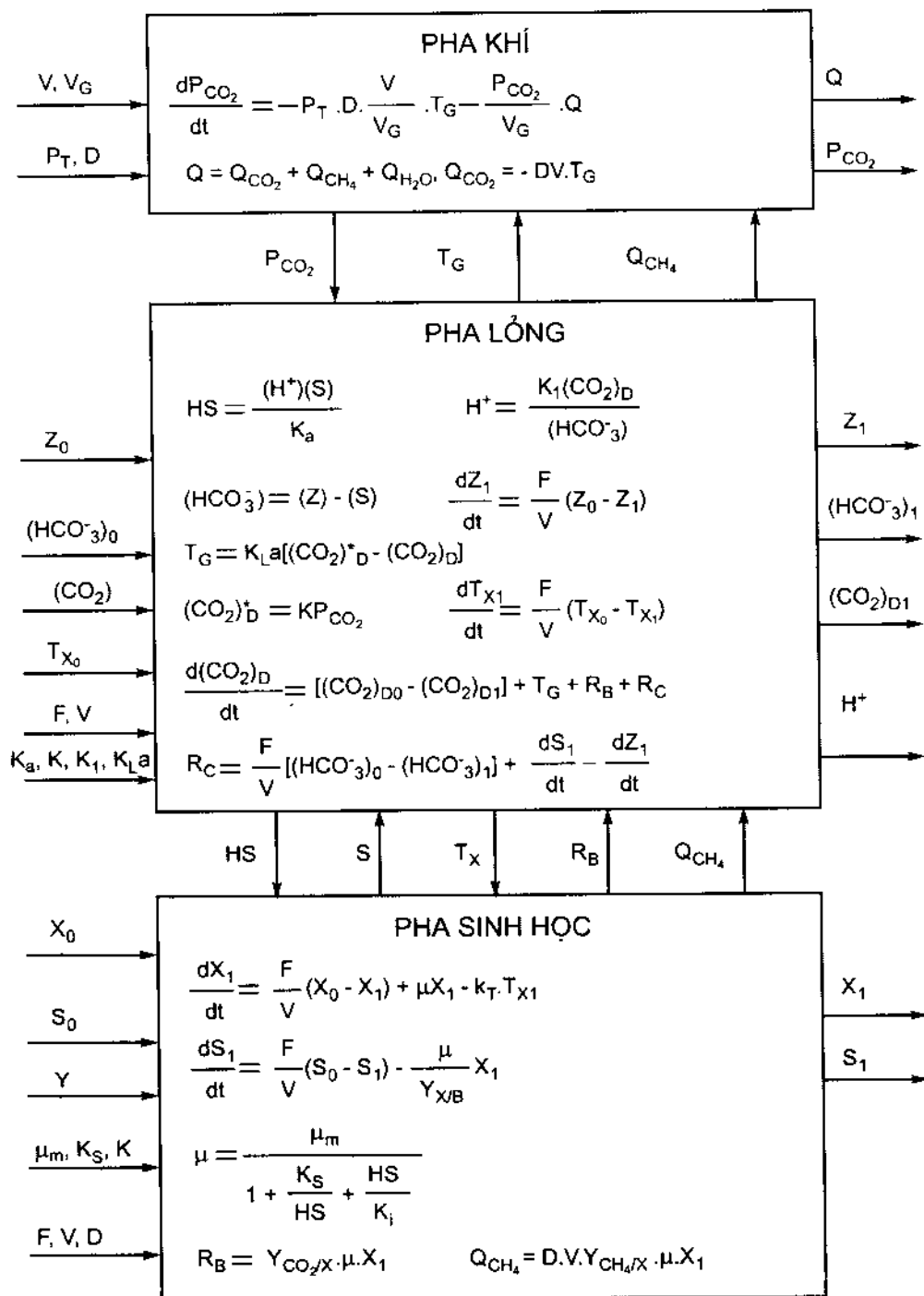
Trong đó:

$$R_C = \frac{F}{V} (HCO_3^-)_0 - \frac{F}{V} (HCO_3^-)_1 + \frac{dS_1}{dt} - \frac{dZ_1}{dt}$$

R_C – tốc độ sản sinh cacbon đioxit từ bicacbonat do kết quả phản ứng của nó với cơ chất (các axit dễ bay hơi). Phản ứng này được mô tả bằng phương trình sau:



Trên hình 3.5 đưa ra tóm tắt mô hình toán của quá trình trên cơ sở tập hợp những biểu thức đã mô tả ở trên. Ta thấy mô hình toán bao gồm ba khối: pha khí, pha lỏng và pha sinh học. Ở mỗi pha, tùy thuộc bản chất của nó có thể có phương trình động học, phương trình cân bằng vật liệu hay phương trình phản ứng hoá học. Mỗi pha đều có những thông số chính ở đầu vào và đầu ra. Ngoài ra, giữa các pha còn có mối liên hệ đặc trưng nhất. Mô hình toán như đã nói ở trên được xây dựng cho trường hợp mô hình cấu trúc dòng là trộn lí tưởng.

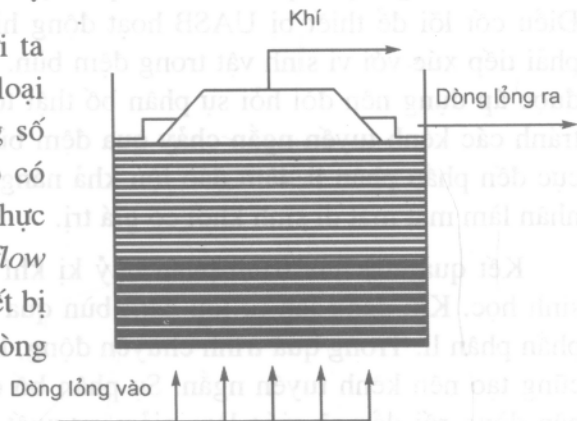


Hình 4.5. Sơ đồ mô hình toán và các dòng thông tin

4.2.6. Mô hình toán của thiết bị UASB

Mấy thập kỉ gần đây người ta đã nghiên cứu chế tạo ra nhiều loại thiết bị phân huỷ kỵ khí. Trong số chúng, loại được đánh giá cao có nhiều kết quả trong vận dụng thực tiễn là thiết bị UASB (*Upflow Anaerobic Sludge Blanket* – thiết bị kiểu chặn bùn kỵ khí với dòng hướng lên).

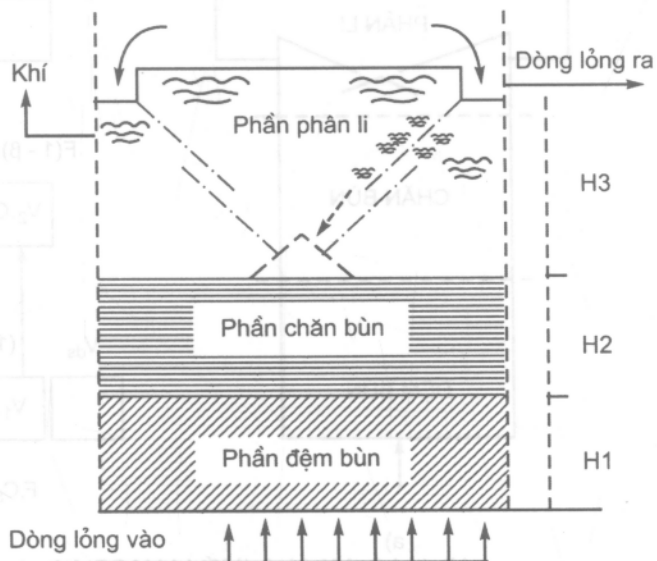
Hình dạng chung của thiết bị UASB như hình 4.6



Hình 4.6 Hình dạng chung của thiết bị UASB

Khi quan sát thiết bị kiểu này ở dạng ống thủy tinh trong phòng thí nghiệm, người ta thấy chúng phân thành 3 phần chính: phần đệm bùn (*the sludge bed*), phần chặn bùn (*the sludge blanket*) và phần phân li hay phần lắng (*the settler*)

Chất lỏng cấp từ phía dưới đi qua đệm bùn, chặn bùn vào phần phân li. Điều cốt lõi để thiết bị UASB hoạt động hiệu quả là chất hữu cơ đưa vào phải tiếp xúc với vi sinh vật trong đệm bùn. Do sự khuấy trộn cơ học không được áp dụng nên đòi hỏi sự phân bố thật tốt chất hữu cơ với bùn, cố gắng tránh các kênh tuyến ngắn chảy qua đệm bùn. Các kênh đó ảnh hưởng tiêu cực đến phần phân li, làm đảo lộn khả năng lọc của chặn bùn và là nguyên nhân làm mất đi sinh khối có giá trị.



Hình 4.7. Sơ đồ thiết bị UASB với 3 phần riêng biệt

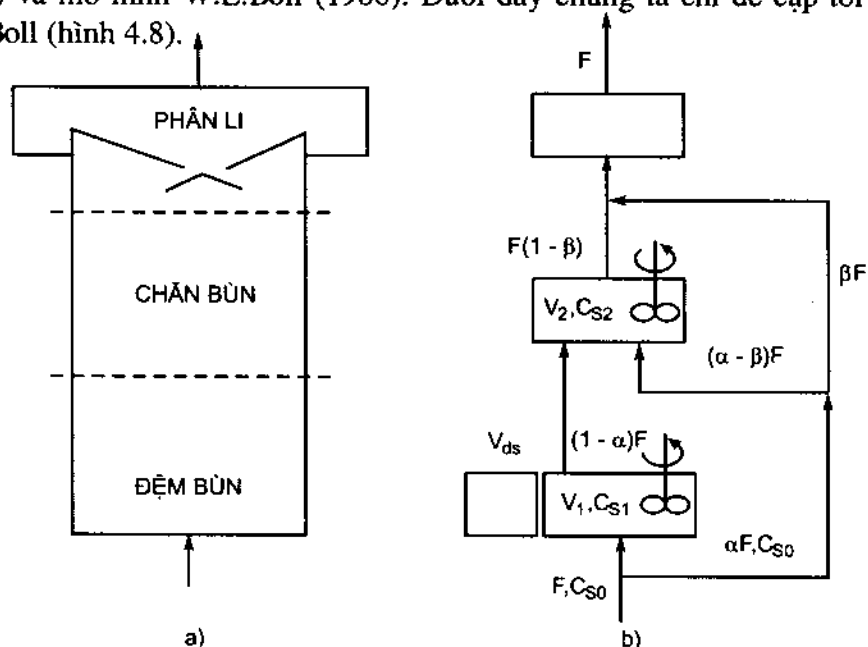
Chất lỏng cấp từ phía dưới đi qua đệm bùn, chặn bùn vào phần phân li. Điều cốt lõi để thiết bị UASB hoạt động hiệu quả là chất hữu cơ đưa vào phải tiếp xúc với vi sinh vật trong đệm bùn. Do sự khuấy trộn cơ học không được áp dụng nên đòi hỏi sự phân bố thật tốt chất hữu cơ với bùn, cố gắng tránh các kênh tuyến ngắn chảy qua đệm bùn. Các kênh đó ảnh hưởng tiêu cực đến phần phân li, làm đảo lộn khả năng lọc của chặn bùn và là nguyên nhân làm mất mát đi sinh khối có giá trị.

Kết quả của quá trình phân huỷ kỵ khí chất hữu cơ là sản xuất ra khí sinh học. Khí dâng lên từ lớp đệm bùn qua lớp chặn bùn và được thu lại ở phần phân li. Trong quá trình chuyển động, khí thường va chạm các bùn nhỏ cũng tạo nên kênh tuyến ngắn. Sự phân bố đều của dòng vào chất lỏng tạo nên dòng rối đều sẽ giúp làm giảm sự xuất hiện các hiệu ứng kênh do các bọt khí nâng lên.

Để mô hình hoá thiết bị UASB cần phân biệt các mô hình mô tả dòng chất lỏng trong thiết bị và các mô hình mô tả dòng chất rắn.

4.2.6.1 Mô hình cấu trúc dòng

Mô hình cấu trúc dòng chất lỏng trong thiết bị UASB đã được nhiều nhà nghiên cứu quan tâm xây dựng. Đáng kể là mô hình R.R Vander Meer (1978) và mô hình W.L.Boll (1986). Dưới đây chúng ta chỉ đề cập tới mô hình Boll (hình 4.8).



Hình 4.8. Mô hình thiết bị UASB (a) và mô hình cấu trúc dòng chất lỏng của W.L.Boll (b)

Mô hình cấu trúc dòng chất lỏng trong thiết bị UASB của W.L.Boll (hình 4.8b) dựa trên cơ sở chia thiết bị thành 3 phần: đệm bùn, chân bùn và phân li (hình 4.8a). Hai phần đầu được coi là thiết bị trộn lí tưởng (trên hình vẽ có cánh khuấy) với dòng liên tục, phần cuối cùng được coi như một thiết bị dòng đẩy lí tưởng.

W.L.Boll bác bỏ lí thuyết của Van der Meer về sự khác nhau của khối lượng riêng giữa dòng lỏng vào và bùn trong đệm là lực chính đằng sau sự phát triển của các tuyến ngắn vì thực tế sự khác nhau của khối lượng riêng không lớn. Ông đi đến mô hình cấu trúc dòng trên hình 4.8b. Sự khác biệt ở đây là không có dòng ngược.

Mô hình W.L.Boll sẽ được sử dụng để mô hình hoá thiết bị UASB ở phần tiếp theo.

4.2.6.2. Phương trình cân bằng cơ chất

Mô hình cấu trúc dòng chất lỏng (hình 4.8b) có thể được sử dụng cho cơ chất qua thiết bị. Phương trình cân bằng cơ chất (chỉ cho pha sản sinh metan) có thể thiết lập cho đệm bùn (phần 1) và chân bùn (phần 2) và đối với chuyển hoá axit axetic ($i = 1$), propionic ($i = 2$) và butyric ($i = 3$). Ở đây sử dụng kí hiệu các đơn vị đo ở dạng thứ nguyên tổng quát.

a) Đệm bùn

+ axit axetic:

$$\frac{dC_{S_{1,1}}}{dt} = \frac{(1-\alpha)F}{V_1} (C_{S_{1,0}} - C_{S_{1,1}}) - R_{1,1} + R_{2,1} + 2R_{3,1} \quad (4.29)$$

+ axit propionic:

$$\frac{dC_{S_{2,1}}}{dt} = \frac{(1-\alpha)F}{V_1} (C_{S_{2,0}} - C_{S_{2,1}}) - R_{2,1} \quad (4.30)$$

+ axit butyric

$$\frac{dC_{S_{3,1}}}{dt} = \frac{(1-\alpha)F}{V_1} (C_{S_{3,0}} - C_{S_{3,1}}) - 2R_{3,1} \quad (4.31)$$

Trong đó:

$C_{S_{i,n}}$ – nồng độ cơ chất i ở phần thiết bị n [$M.L^{-3}$];

$\frac{dC_{S_{i,n}}}{dt}$ – sự thay đổi nồng độ cơ chất i ở phần thiết bị n [$M.L^{-3}.t^{-1}$];

α – phần dòng chất lỏng chảy qua phân thiết bị;

V_n – thể tích phân thiết bị [L^{-3}],

$R_{i,n}$ – tốc độ phản ứng cơ chất i ở phân thiết bị n [$M.L^{-3}.t^{-1}$]

b) *Chấn bùn*

+ axit axetic:

$$\frac{dC_{S_{1,2}}}{dt} = \frac{(1-\alpha)F}{V_2} C_{S_{1,2}} + \frac{(\alpha-\beta)F}{V_2} C_{S_{1,0}} - \frac{(1-\beta)F}{V_2} C_{S_{1,2}} - R_{1,2} + R_{2,2} \quad (4.32)$$

+ axit propionic:

$$\frac{dC_{S_{2,2}}}{dt} = \frac{(1-\alpha)F}{V_2} C_{S_{2,2}} + \frac{(\alpha-\beta)F}{V_2} C_{S_{2,0}} - \frac{(1-\beta)F}{V_2} C_{S_{2,2}} - R_{2,2} \quad (4.33)$$

+ axit butyric:

$$\frac{dC_{S_{3,2}}}{dt} = \frac{(1-\alpha)F}{V_2} C_{S_{3,2}} + \frac{(\alpha-\beta)F}{V_2} C_{S_{3,0}} - \frac{(1-\beta)F}{V_2} C_{S_{3,2}} - 2.R_{3,2} \quad (4.34)$$

Trong đó: β – phần dòng tuyến ngắn của αF mà chảy qua phân thiết bị 2.

Ngoài ra, ở các phương trình trên:

$$R_{i,n} = \frac{\mu_{i,n}}{Y_{M_i, S_i}} . C_{M_{i,n}} \quad (4.35)$$

Trong đó:

$R_{i,n}$ – tốc độ sử dụng cơ chất i ở phân thiết bị n [$M.L^{-3}.t^{-1}$];

$\mu_{i,n}$ – tốc độ tăng trưởng của vi sinh vật i trong phân thiết bị n [t^{-1}];

$c_{M_{i,n}}$ – nồng độ vi sinh vật i ở phân thiết bị n [$M.L^{-3}$];

Y_{M_i, S_i} – hiệu quả chuyển hoá cơ chất i thành vi sinh vật i .

4.2.6.3. Các dòng tuyến ngắn chảy qua

Trong các phương trình cân bằng cơ chất kể trên, các dòng tuyến ngắn chưa được xác định. W.L.Boll đã liên hệ α và β với các đặc tính cấu trúc của quá trình và thiết bị:

$$\alpha = (0,95 - 0,25 H_1) (0,42 V_{AG} + 0,44) \quad (4.36)$$

$$\text{với} \quad V_{AG} = \frac{F_{G,1}}{A_R} \quad (4.37)$$

Trong đó:

H_1 – chiều cao của đệm bùn [L];

V_{AG} – tốc độ tuyến tính trung bình của dòng khí [$L.t^{-1}$];

$F_{G,1}$ – lưu lượng khối của dòng khí qua đệm bùn [$L^3.t^{-1}$];

A_R – tiết diện thiết bị bán kính R [M^2].

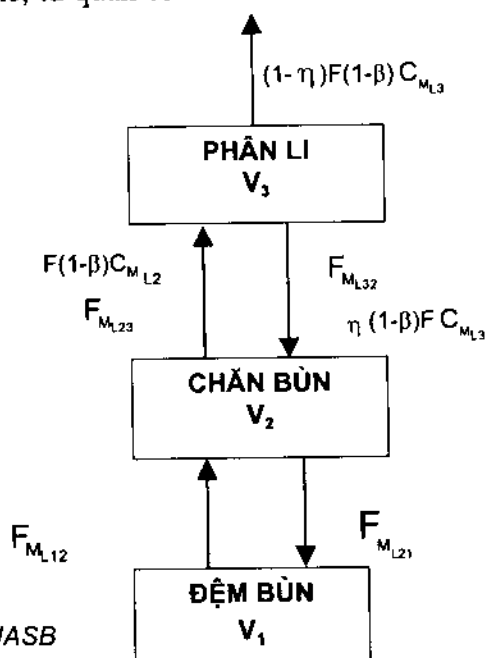
$$\beta = (0,16 H_2^2 - 1,24 H_2 + 2,5) (-0,16 V_{AG}^2 + 1,6 V_{AG}) \propto \quad (4.38)$$

Trong đó: H_2 – chiều cao của chân bùn [L].

4.2.6.4. Mô hình vận tải bùn

Khi mà tính chất thuỷ động của thiết bị đã biết thì sự phân bố của chất rắn trong các phần khác nhau của thiết bị là mối quan tâm lớn thứ hai. Chất rắn có thể là vô cơ (trơ) hoặc hữu cơ (vi sinh). Trong thiết bị UASB tốc độ dòng thấp sẽ cho tích lũy chất vô cơ từ dòng nước thải ở lại trong thiết bị và trong bùn. Kết quả này làm giảm hoạt tính của bùn. Thường thì người ta lưu ý ngăn ngừa tích lũy chất vô cơ. Vì thế, từ quan điểm mô hình hoá chất trơ có thể bỏ qua.

Kết quả là mô hình hoá chất rắn trong thiết bị UASB có thể tập trung cho mô hình hoá vận tải chất hữu cơ (sinh khối). Quan niệm được chấp nhận là cả 3 phần thiết bị mô hình không có sinh khối cấp từ ngoài vào, với sự trao đổi sinh khối giữa 3 phần và với (ít) sinh khối ở dòng ra (hình 4.9).



Hình 4.9 Vận tải bùn trong thiết bị UASB

Mô hình trên hình 4.6 dựa trên việc vận tải sinh khối từ đệm bùn đến chân bùn nhờ sự kết hợp của các bọt khí và các hạt với việc dâng tổ hợp bọt khí – hạt bùn lên trên. Việc vận tải sinh khối từ chân bùn xuống đệm bùn lại bị gây ra bởi sự phân li sinh khối (theo cách giải thích của W.L.Boll và cộng sự, 1986).

4.2.6.5. Phương trình cân bằng theo vi sinh vật

Trên cơ sở mô hình vận tải bùn, các phương trình cân bằng cho những giống vi sinh vật khác nhau có thể được thiết lập cho đệm bùn và chân bùn.

* *Đệm bùn*

$$\frac{dC_{M_{i,1}}}{dt} = -\frac{F_{M_{i,12}}}{V_1} + \frac{F_{M_{i,21}}}{V_1} + R_{M_{i,1}} \quad (4.39)$$

Trong đó:

$\frac{dC_{M_{i,1}}}{dt}$ – sự thay đổi theo thời gian của nồng độ vi sinh vật loài i trong phần thiết bị 1 [$M.L^{-3}.t^{-1}$];

$F_{M_{i,12}}$ – tốc độ dòng của vi sinh vật loài i rời phần thiết bị 1 sang phần thiết bị 2 [$M.L^{-3}$];

$R_{M_{i,1}}$ – tốc độ tăng trưởng của các vi sinh vật loài i trong phần thiết bị 1 [$M.L^{-3}.t^{-1}$].

Trong phương trình này, $F_{M_{i,12}}$ có thể được viết khác để tính dòng các hạt sinh khối riêng là kết quả của việc kết hợp chúng với bọt khí dâng lên (sự kéo lên)

$$F_{M_{i,12}} = F_{G,1} \cdot C_{M_{i,1}} \cdot \eta_{dr} \cdot \chi \quad (4.40)$$

Trong đó: $F_{G,1}$ – tốc độ khối của dòng khí [$L^3.t^{-1}$];

η_{dr} – hiệu quả của việc kéo lên;

χ – hệ số kéo đối với các hạt dâng lên.

Hơn nữa

$$F_{M_{i,21}} = (v_s - v_l) a_R C_{M_{i,2}} \quad (4.41)$$

Trong đó: $(v_s - v_l)$ – tốc độ nâng lên trung bình của bùn phân li lỏng [$L.t^{-1}$]

và

$$R_{M_{i,1}} = \mu_{i,1} \cdot C_{M_{i,1}} \quad (4.42)$$

với $\mu_{i,1}$ – tốc độ tăng trưởng của vi sinh vật [t^{-1}].

* *Chăn bùn*

$$\frac{dM_{M_{i,2}}}{dt} = \frac{F_{M_{i,12}}}{V_2} - \frac{F_{M_{i,21}}}{V_2} - \frac{F_{M_{i,23}}}{V_2} + \frac{F_{M_{i,32}}}{V_2} + R_{M_{i,2}} \quad (4.43)$$

$$F_{M_{i,23}} - F_{M_{i,32}} = (1-\eta)F(1-\beta)C_{M_{i,12}} \quad (4.44)$$

Trong đó: η – hiệu quả phân li.

$$R_{M_{i,2}} = \mu_{i,2} C_{M_{i,2}} \quad (4.45)$$

4.2.6.6. Cân bằng CO₂

CO₂ đóng vai trò quan trọng trong quá trình phân huỷ sinh học. Trong quá trình kỵ khí, CO₂ chỉ sinh ra ở giai đoạn lên men axit (hình thành các axit axetic, propionic và butyric), trong khi CO₂ vừa sinh ra vừa tiêu hao ở giai đoạn sản sinh metan (xem phần 4.2.1).

Hơn nữa, CO₂ liên hệ đến pH của chất lỏng qua vai trò của nó trong hệ có tính kiềm hay axit. Như vậy, CO₂ là một thông số quan trọng của quá trình cung cấp cho ta nhiều nhận biết về quá trình và cần phải thiết lập các phương trình cân bằng cho đệm bùn và chấn bùn của thiết bị UASB

a) Đệm bùn

$$\frac{d(C_{CO_2,l})_{di}}{dt} = \frac{(1-\alpha)F}{V_l} [(C_{CO_2,o})_{di} - (C_{CO_2,l})_{di}] + T_{G,l} + R_{B,l} + R_{C,l} \quad (4.46)$$

Trong đó:

$T_{G,l}$ – tốc độ chuyển CO₂ từ pha lỏng sang pha khí [M.L⁻³.t⁻¹];

$R_{B,l}$ – tốc độ sản xuất CO₂ bằng con đường sinh học trong đệm bùn [M.L⁻³.t⁻¹];

$R_{C,l}$ – tốc độ sản xuất CO₂ bằng con đường hoá học trong đệm bùn [M.L⁻³.t⁻¹].

Cụ thể hơn:

$$T_{G,l} = K_L a_l [C^*_{CO_2} - C_{CO_2,l}] \quad (4.47)$$

Trong đó: $C^*_{CO_2}$ – nồng độ CO₂ hoà tan trong trạng thái cân bằng với CO₂ ở pha khí [M.L⁻³], $C_{CO_2,l}$ – nồng độ hiện tại của CO₂ hoà tan trong đệm bùn [M.L⁻³].

$$R_{B,l} = \sum_{i=1}^2 \mu_{i,l} \cdot C_{M_{i,l}} \cdot Y_{CO_2/M_i} - \mu_{3,l} \cdot C_{M_{3,l}} Y_{CO_2/M_3} \quad (4.48)$$

Trong đó:

Y_{CO_2/M_i} – hiệu suất khối lượng CO₂ trên một đơn vị sinh khối vi sinh vật loài i;

$R_{C,l}$ – sản sinh tiêu hao CO₂ bằng con đường hoá học tính theo HCO₃⁻

$$\frac{d(C_{HCO_3^-,l})}{dt} = \frac{(1-\alpha)F}{V_l} [C_{HCO_3^-,o} - C_{HCO_3^-,l}] + R^*_{C,l} \quad (4.49)$$

Trong đó: $R^*_{C,l}$ – tốc độ sản sinh HCO₃⁻ [M.L⁻³.t⁻¹].

Theo phương trình



thì tốc độ sản sinh HCO_3^- bằng (ngược dấu) tốc độ sản xuất CO_2 . Vì vậy giá trị tuyệt đối

$$R_{c,i} = R_{c,i}^* \quad (4.51)$$

Kết hợp (4.49) và (4.51) ta được:

$$R_{c,i} = \frac{(1-\alpha)F}{V_1} \left[C_{\text{HCO}_3^-,0} - C_{\text{HCO}_3^-,1} \right] - \frac{d[C_{\text{HCO}_3^-,1}]}{dt} \quad (4.52)$$

trong phương trình (4.52) đại lượng $\frac{d[C_{\text{HCO}_3^-,1}]}{dt}$ có thể xác định qua cân bằng điện tích: Σ điện tích cation = Σ điện tích anion

$$[\text{H}^+] + [\text{C}^+] = [\text{OH}^-] + [\text{A}^-] + \sum_{i=1}^3 [S_{i1}^-] + [\text{HCO}_3^-] + 2[\text{CO}_3^{2-}] \quad (4.53)$$

Trong đó:

$[\text{C}^+]$ – nồng độ các cation [dl. L^{-3}]; $[\text{A}^-]$ – Nồng độ các anion [dl. L^{-3}];

$[S_{i1}^-]$ – nồng độ loại cơ chất i ở dạng ion trong đệm bùn.

Cân bằng điện tích có thể đơn giản hoá bằng cách:

1. Định nghĩa $Z_1 = [\text{C}^+] - [\text{A}^-]$

2. Khi giới hạn mô hình trong vùng pH= 6–8, các nồng độ H^+ , OH^- và CO_3^{2-} có thể coi như không đáng kể.

3. Ở gần pH trung tính nồng độ cơ chất $S_{i1} = S_{i1}^-$. Như thế thì kết quả cân bằng điện tích là:

$$[\text{HCO}_3^-] = \sum_{i=1}^3 [S_{i1}^-] - [Z_1] \quad (4.54)$$

Khi các nồng độ là hàm số của thời gian thì phương trình (4.54) biến thành

$$-\frac{d[\text{HCO}_3^-]}{dt} = \sum_{i=1}^3 \frac{d[S_{i1}^-]}{dt} - \frac{d[\gamma Z_1]}{dt} \quad (4.55)$$

Thay (4.55) vào (4.52) ta được:

$$R_{C,1} = \frac{(1-\alpha)F}{V_1} [C_{\text{HCO}_3^-,0} - C_{\text{HCO}_3^-,1}] + \sum_{i=1}^3 \frac{d[S_{i1}^-]}{dt} - \frac{d[Z_1]}{dt} \quad (4.56)$$

b) Chăn bùn

Phương trình cân bằng CO_2 trong chăn bùn tương tự như trong đệm bùn.

$$\begin{aligned} \frac{d[C_{\text{CO}_2,2}]}{dt} = & \frac{(\alpha-\beta)F}{V_2} [C_{\text{CO}_2,0}] + \frac{(1-\alpha)F}{V_2} [C_{\text{CO}_2,2}] - \\ & \frac{(1-\beta)F}{V_2} [C_{\text{CO}_2,2}] + T_{G,2} + R_{B,2} + R_{C,2} \end{aligned} \quad (4.57)$$

$$T_{G,2} = K_L a [C_{\text{CO}_2}^* - C_{\text{CO}_2,2}] \quad (4.58)$$

$$R_{B,2} = \sum_{i=1}^3 \mu_{i,2} C_{M_{i,2}} Y_{\text{CO}_2/M_i} - \mu_{3,2} C_{M_{3,2}} Y_{\text{CO}_2/M_3} \quad (4.59)$$

$$\begin{aligned} R_{C,2} = & \frac{(\alpha-\beta)F}{V_2} [C_{\text{HCO}_3^-,0}] + \frac{(1-\alpha)F}{V_2} [C_{\text{HCO}_3^-,1}] - \\ & - \frac{(1-\beta)F}{V_2} [C_{\text{HCO}_3^-,2}] + \sum_{i=1}^3 \frac{d[S_{i,2}^-]}{dt} - \frac{d[Z_2]}{dt} \end{aligned} \quad (4.60)$$

4.2.6.7. Tốc độ sản sinh CH_4

Sau khi đã có phương trình cân bằng chủ yếu, ta hãy xác định tốc độ sản sinh metan— một thông số quan trọng của quá trình. Tốc độ sản sinh metan có thể xác định từ tốc độ tăng trưởng sinh khối.

$$R_{\text{CH}_4,n} = \sum_{i=1}^3 \mu_{i,n} C_{M_{i,n}} Y_{\text{CH}_4/M_i} \quad (4.61)$$

Trong đó:

$n = 1$ cho đệm bùn, $n = 2$ cho chăn bùn;

$R_{\text{CH}_4,n}$ — tốc độ sản sinh CH_4 trong phần thiết bị n [$\text{M.L}^{-3}.\text{t}^{-1}$];

$C_{M_{i,n}}$ — nồng độ vi sinh vật loài i [M.L^{-3}];

Y_{CH_4/M_i} — hiệu suất của CH_4 từ sinh khối.

Phương trình có được từ việc đơn giản hoá mối quan hệ giữa tốc độ sản sinh metan và nồng độ vi sinh vật. Thực tế xem phần 4.2.1 ta có thể thấy đi từ cơ chất đến metan là một vài bước phản ứng mà mỗi bước có hệ số hiệu suất riêng của mình. Bởi vậy hệ số hiệu suất Y_{CH_4/M_i} trong (4.61) là tổng của các hệ số hiệu suất của những phương trình phản ứng khác nhau.

4.2.6.8. Tóm tắt mô hình toán của thiết bị UASB

Tóm tắt mô hình toán của thiết bị UASB bao gồm 5 khối thông tin: 2 khối cho đệm bùn (pha lỏng và pha sinh học) (hình 4.10) và 3 khối cho chân bùn (pha khí, pha lỏng và pha sinh học) (hình 4.11)

Mỗi một khối trình bày thông tin công nghệ của quá trình: cân bằng khối lượng/ diện tích, phản ứng hoá học, phản ứng động học, dòng.... Vì thế, mỗi khối đòi hỏi thông tin đầu vào (ở bên trái) như: tốc độ, nồng độ, hiệu suất, tốc độ tăng trưởng..., trong khi đó mỗi khối cũng sinh ra thông tin đầu ra (bên phải) như: tốc độ dòng tuyến ngắn, nồng độ sinh khối, nồng độ cơ chất Hơn nữa các pha khí, lỏng và sinh học được kết nối với nhau về mặt thông tin.

Giữa đệm bùn và chân bùn tồn tại sự trao đổi thông tin rất mạnh như: các hằng số, nồng độ sinh khối và nồng độ ion, tốc độ, dòng khí...

PHA LỎNG		
K_i, K_{ai}	$HS_{i1} = \frac{(H_1^+)(S_{i1})}{K_{ai}} \quad (i = 1, 2, 3) \quad (H_1^+) = \frac{K_i(CO_2)_{Di}}{(HCO_3^-)_1}$	H_1^+
$i = 1, 2, 3$		
F, V_i, A_R	$(HCO_3^-)_i - Z_i - \sum_{i=1}^3 (S_{i1}) \quad \frac{dZ_i}{dt} = \frac{F(1-a)}{V_i} \cdot F_i \cdot (Z_0 - Z_i)$	$(HCO_3^-)_i$
$(HCO_3^-)_0$		$(CO_2)_{Di}$
$(CO_2)_{D0}$	$\frac{d(CO_2)_{Di}}{dt} = \frac{F(1-a)}{V_i} [(CO_2)_{D0} - (CO_2)_{Di}] + R_{Bi} + R_{Ci}$	SF_i
Z	$R_{Ci} = \frac{F(1-a)}{V_i} [(HCO_3^-)_0 - (HCO_3^-)_i] + \sum_{i=1}^3 \frac{dS_{i1}}{dt} - \frac{dZ_i}{dt}$	Z_i
	$aF = (-0,25 H_1 + 0,95) (0,42 V_{AG} + 0,44) F$	V_{SG}
	$V_{AG} = F_{g,1}/A_R, \quad H_1 = V_i/A_R$	$F_{g,i}$

	aF	HS _{ij} i = 1, 2, 3	F _{G,i}	S _{ij} i = 1, 2, 3	R _{Di}	
PHA SINH HỌC						
V _S , V _L	$\frac{dC_{M12}}{dt} = \frac{-\chi \cdot F_{G,1}}{V_1} C_{M12} + \frac{(V_S - V_L)A_R}{V_2} C_{M12} + \mu_{12} C_{M12}, i$					C _{M11}
F, V _i , A _R						
S ₁₁ ^o	$\frac{dC_{S1i}}{dt} = \frac{F \cdot (1-a)}{V_i} (C_{S1i}^o - C_{S1i}) - R_{1i} + R_{2i} + 2 \cdot R_{3i}$					C _{S11}
i = 1, 2, 3						i = 1, 2
Y _{CO₂/xi} Y _{xi/Si} Y _{CH₂/xi}	$\frac{dC_{S1i}}{dt} = \frac{F \cdot (1-a)}{V_i} (C_{S1i}^o - C_{S1i}) - R_{1i} \quad (i = 1, 2, 3)$					
i = 1, 2, 3						
X _{i2}	$R_{1i} = \frac{\mu_{i1}}{Y_{xi/Si}} C_{M1i} \quad (i = 1, 2, 3); \quad \mu_{i1} = \frac{\mu_{max, i}}{1 + \frac{K_{Si}}{HS_{11}} + \frac{HS_{11}}{K_{1i}}}$					
i = 1, 2, 3						
μ _{max, i}	$R_{Bi} = \sum_{i=1}^3 \mu_{i1} \cdot C_{M1i} \cdot Y_{CO_2/M1} - \mu_{ii} \cdot C_{M3i} \cdot Y_{CO_2/M3}$					
K _{Si} , K _{ri}						
x _i D	$R_{CH_2-1} = \sum_{i=1}^3 \mu_{i1} \cdot C_{M1i} \cdot Y_{CH_2/Mi} \quad F_{G,1} = F_{CH_2-1} = D \cdot V_i \cdot R_{CH_2, i}$					

Hình 4.10. Tóm tắt mô hình toán và dòng thông tin cho đệm bùn trong thiết bị UASB

PHA KHÍ	
V_2, V_G	$\frac{dP_{CO_2}}{dt} = \frac{P_T \cdot F_{CO_2}}{V_a} - \frac{P_{CO_2} \cdot F_{a,T}}{V_a}$
P_T, D	$F_{a,T} - F_{CH_4,T} + F_{CO_2} \quad F_{CO_2} = -D \cdot V_2 \cdot T_a$
	$P_{CO_2} \quad T_o \quad F_{CH_4,T}$

PHA LỎNG	
K_i, K_f, K_{LG}	$HS_{i2} = \frac{(H_2^+)(S_{i2})}{K_{ai}}, i = 1, 2, 3 \quad H_2^+ = \frac{K_f(CO_2)_{a2}}{(HCO_3^-)_2}$
K_{ai}	$(HCO_3^-)_2 - (Z_2) - \sum_{i=1}^3 (S_{i2})$
$i = 1, 2, 3$	
$(CO_2)_{DO}$	$\frac{dZ_2}{dt} = \frac{F \cdot (1 - \beta)}{V_2} Z_0 + \frac{F \cdot (1 - \alpha)}{V_2} Z_2 - \frac{F \cdot (1 - \beta)}{V_2} Z_2$
$(CO_2)_{Di}$	$T_a = K_{1.0}[(CO_2)^*_{D2} - (CO_2)_{D2}] \cdot (CO_2)^*_{DZ} - K \cdot P_{CO_2}$
F, V_2, A_R	$R_{C2} = \frac{F \cdot (\alpha - \beta)}{V_2} (CO_2)_{DO} + \frac{F \cdot (1 - \alpha)}{V_2} (CO_2)_{D1} -$
Z_0	$- \frac{F \cdot (1 - \alpha)}{V_2} (CO_2)_{D2} + R_{B2} + R_{C2} + T_G$
Z_1	$R_{C2} = \frac{F \cdot (\alpha - \beta)}{V_2} (HCO_3^-)_0 + \frac{F \cdot (1 - \alpha)}{V_2} (HCO_3^-)_2 -$
$(HCO_3^-)_0$	$- \frac{F \cdot (1 - \beta)}{V_2} (HCO_3^-)_2 - \sum_{i=1}^3 \frac{dC_{S_{i2}}}{dt} - \frac{dZ_2}{dt}$
$(HCO_3^-)_i$	
v_{SO}	$\beta F = (0.16 H_2^2 - 1.24 H_2 + 2.5)(-D \cdot 16 v_{AG} - 1.6 v_{AG}) \cdot aF$
$F_{G,1}$	$H_2 = V_2 / A_R$
	$S \quad HS_{i2}, i = 1, 2, 3 \quad H_2 \quad R_{S2} \quad S_{i2}, i = 1, 2, 3$

	β	$HS_{i2}, i = 1, 2, 3$	H_2	RS_2	$S_{i2}, i = 1, 2, 3$
PHA SINH HỌC					
V_S, V_1	$\frac{dC_{M_{i1}}}{dt} = \frac{\chi \cdot F_{G,1}}{V_2} C_{M_{i2}} - \frac{(v_s - v_L)A_R}{V_2} C_{M_{i2}} - \frac{(1 - \eta) \cdot F \cdot (1 - \beta)}{V_2}$				
V_S, V_1 F, V_2, A_0	$i = 1, 2, 3, \quad + \mu_{M_{i2}} \cdot C_{M_{i2}}$				
V_S, V_1					
η, χ, D	$\frac{dC_{S_{i2}}}{dt} = \frac{F \cdot (1 - a)}{V_2} C_{S_{i1}} - \frac{F \cdot (a - \beta)}{V_2} C_{S_{i1}} = \frac{F \cdot (1 - \beta)}{V_2} C_{S_{i2}} = R_{i2} =$				
$C_{H_{i1}}, C_{S_{i1}}$ $i = 1, 2, 3$	$= R_{22} + 2 \cdot R_{32}$				
$C_{S_{i1}}^0$ $i = 1, 2, 3$	$\frac{dC_{S_{i2}}}{dt} = \frac{F \cdot (1 - a)}{V_2} C_{S_{i1}} + \frac{F \cdot (a - \beta)}{V_2} C_{S_{i1}} = \frac{F \cdot (1 - \beta)}{V_2} C_{S_{i2}} = R_{i2} =$				
	$C_{SM_{i2}}$ $C_{S_{i2}}$ $i = 1, 2, 3$				
aF	$R_{i2} = \frac{\mu_{M_{i2}}}{Y_{M/S1}} C_{M_{i2}} \quad \mu_{i2} = \frac{\mu_{\max, i}}{1 + \frac{K_{Si}}{HS_{i2}} + \frac{HS_{i2}}{K_{i1}}} \quad (i = 1, 2, 3)$				
$F_{G, f}$					
$\mu_{\max, i}$ K_{Si}, K_{Ii} $Y_{M/S1}$ $Y_{CO_2/M1}$ $Y_{CH_4/Mi}$ $i = 1, 2, 3$	$R_{CH_4,2} = \sum_{i=1}^3 \mu_{i2} \cdot C_{M_{i2}} \cdot Y_{CH_4/Mi} \quad F_{CH_4,2} = D \cdot V_2 \cdot R_{CH_4,2}$ $F_{CH_4,2} = F_{CH_4,2} + F_{CH_4,1} \left(\frac{10}{10 + H_2 + H_3} \right)$				
H_3	$R_{B2} = \sum_{i=1}^3 \mu_{i2} \cdot C_{M_{i2}} \cdot Y_{CO_2/M1} - \mu_{32} \cdot C_{M_{32}} \cdot Y_{CO_2/M3}$				

Hình 4.11. Tóm tắt mô hình toán và dòng thông tin cho chân bùn trong thiết bị UASB

4.3. KIỂM NGHIỆM MÔ HÌNH

Sự phát triển của mô hình hoá quá trình phân huỷ sinh học kỵ khí có thể nói mới đạt được khoảng 60% về lượng, do như đã nói ở trên trong khi xây dựng mô hình chúng ta đã phải đưa ra một loạt giả thiết đơn giản hoá quá trình, hơn nữa đối với nhiều thông số còn chưa có được những số liệu tin cậy. Tuy nhiên, có thể nhận được đánh giá định tính sự phù hợp của mô hình với quá trình thực bằng cách so sánh kết quả tính toán với số liệu nhận được trên thiết bị hoạt động thực tiễn.

A.W. Lawrence và P.I. McCarty đã mô phỏng cho trường hợp: $\mu = 0,4\text{ng}^{-1}$; $K_s = 0,0333\text{mM/l}$ và $Y_{XS} = 0,02\text{mol/mol}$. Đối với axit axetic các giá trị $Y_{\text{CO}_2/X}$ và $Y_{\text{CH}_4/X}$ như nhau và bằng $47,0\text{mol/mol}$ ước lượng gần đúng $K_i = 0,667\text{mM/l}$ nhận được cho nồng độ tổng các axit dễ bay hơi $2000\text{--}3000\text{ mg/l}$ là nồng độ được coi là ức chế quá trình. Nhiệt độ 38°C . Các hằng số cân bằng được tính cho nhiệt độ này ở lực ion của dung dịch bằng $0,2$. Giá trị $K_{La} = 100\text{ ng}^{-1}$ được chọn để giữ nồng độ cacbon dioxit hoà tan theo khả gần với giá trị cân bằng, vì trong nhiệm vụ không đặt ra việc nghiên cứu ảnh hưởng của tốc độ trao đổi khí đến quá trình. Mô hình đối với thiết bị hoạt động gián đoạn có thể dễ dàng nhận được từ mô hình cho thiết bị khuấy trộn lí tưởng hoạt động liên tục, nếu lưu lượng chất lỏng cho bằng 0 ở mọi chỗ mà nó có mặt trong phương trình cân bằng vật liệu. Các kết quả nghiên cứu mô phỏng thiết bị hoạt động gián đoạn cho thấy việc tăng nồng độ ban đầu của vi sinh vật, việc giảm nồng độ ban đầu của cơ chất, việc tăng pH ban đầu có ảnh hưởng như nhau đến thời gian cần cho quá trình gián đoạn, cụ thể là giảm nó. Kết quả này phù hợp với những số liệu thực nghiệm thường gặp.

Mô phỏng giai đoạn đầu hoạt động của thiết bị khuấy trộn lí tưởng hoạt động liên tục cho những kết quả sau:

1 – Tăng lượng bùn mới hay tăng pH đều giảm thời gian cần thiết để khởi động thiết bị.

2 – Sự đứt đoạn hoạt động của thiết bị có thể xuất hiện do không đủ lượng bùn mới hay giá trị pH quá thấp ở thời điểm khởi động thiết bị.

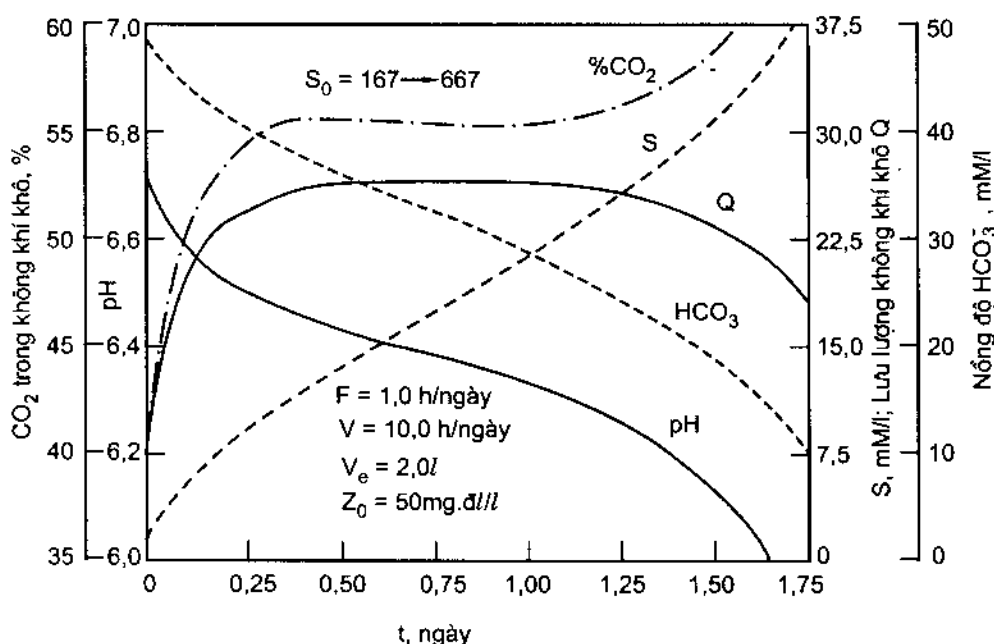
3 – Có thể loại trừ sự đứt đoạn của quá trình trong thời gian khởi động nếu tăng chậm nạp tải vào thiết bị dần dần đưa đến giá trị lớn nhất.

Những kết quả trên cũng tương ứng với quan sát được trên thực tế.

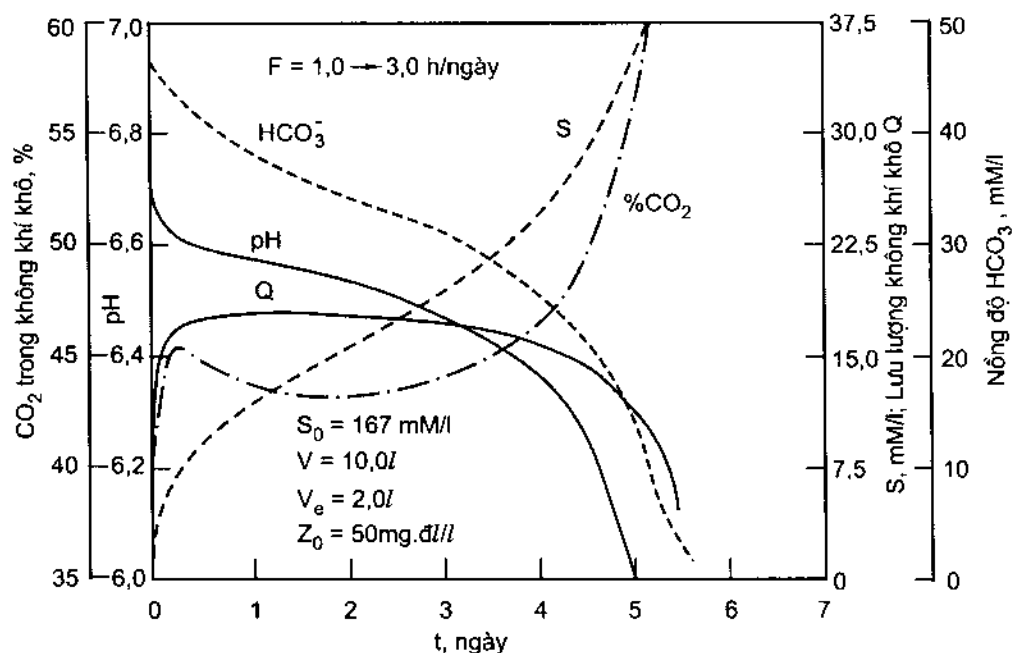
Nhờ việc mô phỏng cũng đã dự đoán sự đứt đoạn gây ra bởi quá tải thủy lực cũng như quá tải chất hữu cơ và chất độc. Hơn nữa, bản thân tính chất sự đứt đoạn cũng trùng về mặt định tính với quan sát thực tế. Về điều này minh chứng bởi hành vi của các biến điều khiển: pH, độ kiềm, nồng độ axit dễ bay hơi, lưu lượng khí và thành phần khí. Trên hình 4.12 và 4.13 đưa ra ví dụ phản ứng của các biến này đến sự đứt đoạn mô phỏng của quá trình, gây nên bởi quá tải thủy lực hay quá tải chất hữu cơ. Những mô phỏng đã tiến hành cũng cho thấy có thể loại trừ sự đứt đoạn của quá trình bằng cách:

- 1 – Dừng hay giảm dòng vào thiết bị
- 2 – Thêm vào thiết bị chất kiềm
- 3 – Thực hiện tuần hoàn bùn

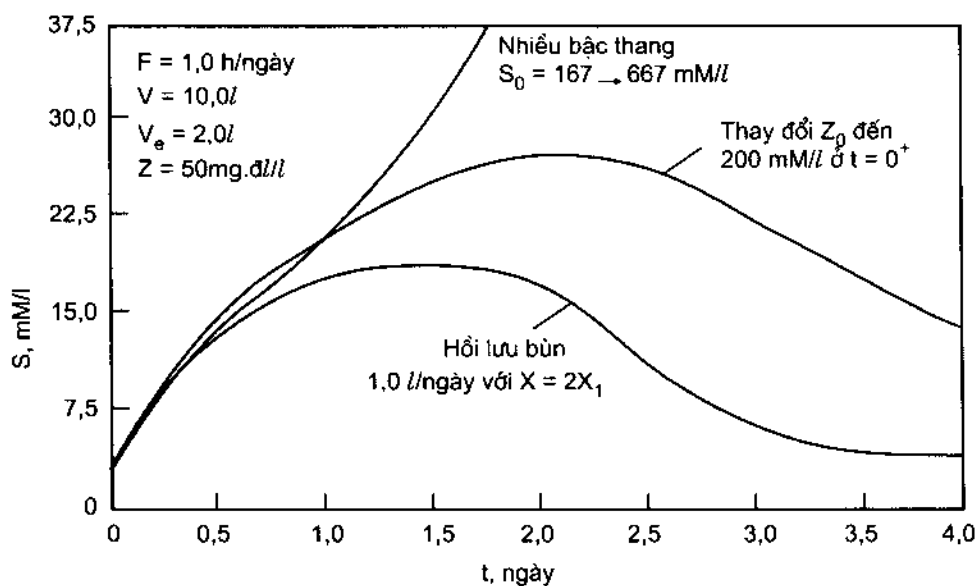
Cả ba loại điều khiển trên đều thực hiện trên thực tế. Kết quả mô phỏng hai tác động điều khiển cuối cùng được thể hiện trên hình 4.14.



Hình 4.12. Sự đứt đoạn của quá trình bởi sự thay đổi bậc thang nồng độ cơ chất ở đầu vào



Hình 4.13. Sự đứt đoạn của quá trình bởi sự thay đổi bậc thang của lưu lượng



Hình 4.14. Các phương pháp ngăn ngừa sự đứt đoạn của quá trình

Chương V

XÂY DỰNG MÔ HÌNH TOÁN CỦA CÁC SƠ ĐỒ CÔNG NGHỆ TỐI ƯU LÀM SẠCH NƯỚC THẢI

Tuỳ thuộc vào các đặc tính của nước thải (thành phần, nồng độ...) mà ta gọi nó là loại nước thải này hay nước thải khác theo hệ thống phân loại nước thải. Ở đây có tính đến cả nhóm các chỉ tiêu, khoảng thay đổi các chỉ tiêu, tỉ lệ tương quan của chúng. Tiếp đến là các phương án lựa chọn sơ đồ công nghệ làm sạch nước thải.

5.1. HỆ THỐNG PHÂN LOẠI NƯỚC THẢI

Khi xây dựng hệ thống phân loại nước thải cần quán triệt quan điểm là hệ thống này dùng cho người thiết kế và là cơ sở để chọn các phương pháp làm sạch, tổ hợp của chúng và các loại thiết bị, chế độ làm việc của thiết bị.

Cơ sở của hệ thống phân loại là ý tưởng của viện sĩ Viện Hàn lâm khoa học Nga X. Iakolev và trường phái của ông. Trong công trình của E. Esenov, hệ thống phân loại này đã được hiện đại hoá ở dạng chương trình, trên cơ sở đó có thể sử dụng trong thiết kế tự động các hệ thống làm sạch nước. Trong khi xây dựng hệ thống phân loại nước thải như trên đã tính đến thông tin về thành phần, nồng độ tạp chất và khoảng dao động của chúng. Ngoài ra, trong công nghệ xử lý nước thải thì phương pháp sử dụng phải đáp ứng được một số điều kiện nào đó. Ví dụ, trong quá trình lắng, nhiệt độ cần thiết phải là $15 \div 40^{\circ}\text{C}$, hàm lượng chất hoạt động bề mặt không lớn hơn 50 mg/l ... Để làm sạch nước thải bằng phương pháp sinh học bùn hoạt tính cần phải có điều kiện sau: hàm lượng chất hữu cơ $300 \div 1200 \text{ mg/l}$, nhiệt độ nước $15 \div 35^{\circ}\text{C}$, $\text{COD/BOD} < 1,5$, nồng độ chất lơ lửng không lớn hơn 100 mg/l . Như vậy, trong hệ thống phân loại nước thải cần phải có thông tin các phương pháp làm sạch thực hiện trong điều kiện nào. Và cuối cùng, trong hệ thống phân loại cần tính đến khả năng sử dụng tổ hợp nào đó của các phương pháp làm sạch, ví dụ nếu trong nước thải chứa chất hoạt động bề mặt và nồng độ lớn hơn 50 mg/l thì trước quá trình lắng phải giảm nồng độ này hoặc thay lắng bằng một phương pháp khác thích hợp có thể làm giảm hàm lượng chất hoạt động bề mặt lơ lửng đến giá trị cần thiết.

Như vậy, để phân loại nước thải cần có những thông tin nhất định. Toàn bộ khối lượng thông tin đặc trưng cho đối tượng nghiên cứu gọi là cơ sở dữ liệu. Khối lượng thông tin càng lớn, càng hợp lí, ta càng đánh giá chính xác trạng thái nước thải cần xử lí.

Các chỉ tiêu đặc trưng trạng thái nước thải (thành phần, nồng độ, nhiệt độ, tỉ trọng...) cần phân nhóm để lập nên mối quan hệ giữa chúng (bảng 5.1, 5.2)

BẢNG 5.1. PHÂN NHÓM CÁC CHỈ TIÊU NƯỚC THẢI

TÊN CHỈ TIÊU	KÍ HIỆU	PHÂN NHÓM CHỈ TIÊU			
		1	2	3	4
Cặn nén chặt	$C_{nén}$	+	(+)		
Cặn khô	$C_{khô}$		(+)	+	
Cặn đốt	$C_{đốt}$			(+)	+
Nồng độ chất lơ lửng	C_{sa}	+	(+)		
Nồng độ chất hoạt động bề mặt	$C_{HĐBM}$		+	(+)	
Nồng độ các sản phẩm dầu mỡ	$C_{dầu}$		+		
Nồng độ photpho	C_P			+	
Tổng nitơ	C_N			+	
Môi trường	pH				+
Nhu cầu ôxi hoá học	COD			+	
Nhu cầu ôxi sinh hoá	BOD			+	
Nhiệt độ	T	+	(+)	(+)	(+)
Khối lượng riêng	ρ	+	(+)	(+)	(+)

(Dấu + : có mặt hiển nhiên chỉ ở trong nhóm đó,

dấu (+) : có sự giao thoa giữa các nhóm)

Cách phân nhóm nước thải trong bảng 5.1 dựa trên đặc tính phân tán pha. Như vậy, các chỉ tiêu ở nhóm đầu tiên đặc trưng cho cặn nén và nồng độ chất lơ lửng.

Bảng 5.2 trình bày mối tương quan giữa một số chỉ tiêu và các dấu hiệu của chúng.

Các dữ kiện cần thiết để xác lập hệ thống phân loại có thể nhận được từ các nguồn thông tin khác nhau phải được hệ thống hoá và giới thiệu như trong các tài liệu giáo khoa.

BẢNG 5.2. MỐI TƯƠNG QUAN GIỮA MỘT SỐ CHỈ TIÊU NƯỚC THẢI

LOẠI TƯƠNG QUAN	QUY TẮC TƯƠNG QUAN
BOD/ COD < 0,5	Có tạp chất khó và không phân huỷ sinh học
BOD/ COD > 0,5	Tất cả tạp chất bị ôxi hoá sinh học

Hình thành cơ sở kiến thức của hệ thống phân loại nước thải theo nồng độ các tạp chất bằng cách:

1. Xác định các chỉ tiêu tham gia vào quá trình phân loại;
2. Chia chỉ tiêu thành những khoảng nhất định;
3. Chọn phương án làm sạch tương ứng sao cho loại bỏ được tạp chất đặc trưng bởi các chỉ tiêu đó;
4. Xác định độ làm sạch yêu cầu

Tiếp theo hình thành cơ sở kiến thức, phát biểu bài toán phân loại nước thải.

Cho:

$P = \{P_1, P_2, \dots, P_n\}$ – tập hợp các tính chất độc lập của đối tượng (phương pháp làm sạch: trung hoà, keo tụ, sinh học,...);

M – dấu hiệu đặc trưng của đối tượng (nồng độ, thành phần, pH, ...);

$Q_m = \{q_{m1}, q_{m2}, \dots, q_{mn}\}$ – tập hợp các giá trị khả dĩ của dấu hiệu thứ m , trong đó n là số các giá trị đó;

$A = \{Q_1, Q_2, \dots, Q_M\}$ – tập hợp tất cả các trạng thái có thể của hệ nghiên cứu, trong đó trạng thái $a \in A$ đặc trưng bởi vector $a = (a_{11}, a_{12}, \dots, a_{1M})$;

với $a_m \in Q_m, m = 1, M$.

Yêu cầu:

Trên cơ sở kiến thức chuyên gia cho từng trạng thái từ tập hợp A , tìm sự có mặt của các tính chất tương ứng [phương pháp làm sạch] từ tập hợp P và xây dựng phân loại tập hợp $A = \bigcup_{l=0}^L K_l$, sao cho trạng thái $a_j \in A$ quan hệ tới nhóm K_l , nếu như đối tượng trong trạng đó có tính chất P_l .

Trong nhóm K_0 là những trạng thái mà đối tượng không có tính chất nào trong số các tính chất đã xem xét.

Từ những đặc điểm của quá trình làm sạch nước thải như là một đối tượng nghiên cứu bài toán đặt ra có thể cụ thể hoá như sau:

1. Nếu đối tượng nghiên cứu trong từng trạng thái $a \in A$ có thể có một vài tính chất từ tập hợp P_i [hoá lí và hoá sinh] thì kết quả phân loại sẽ bao trùm tập hợp A [trạng thái] bằng các tập hợp nhỏ của nhóm $K_0, K_1, \dots, K_L$.

2. Nếu trong từng trạng thái của đối tượng nghiên cứu $Q_i \in A$ chỉ có một trong những tính chất của tập hợp P thì kết quả phân loại cần phải chia tập hợp A thành $L + 1$ nhóm.

Trong việc cấu trúc hoá bài toán phân loại sử dụng giả thiết về mức độ đặc trưng khác nhau của các giá trị riêng biệt của từng tính chất. Việc đó có thể miêu tả như sau: Sắp xếp các giá trị của dấu hiệu Q_m theo đặc trưng của nó để đối với những tính chất P sẽ cho phép đưa vào Q_m quan hệ đối trung chuyển và đối phản xạ, r_m được xác định như sau: $[q_{ms}, q_{mt}] \in r_m^1$ nếu giá trị q_{ms} đặc trưng hơn đối với tính chất P_i hơn là giá trị q_{mt} .

Trên cơ sở đó có thể dựng các quan hệ đối ưu thế theo đặc trưng cho từng tính chất trong tập hợp trạng thái của hệ nghiên cứu và được xác định bởi:

$$R^1 = (a_s, a_t) \in A \times A \quad \forall m = \overline{1, M} \quad (a_{sm}, a_{tm}) \in r_m^1 \cup \exists m_0 \quad 1 \leq m_0 \leq m_m,$$

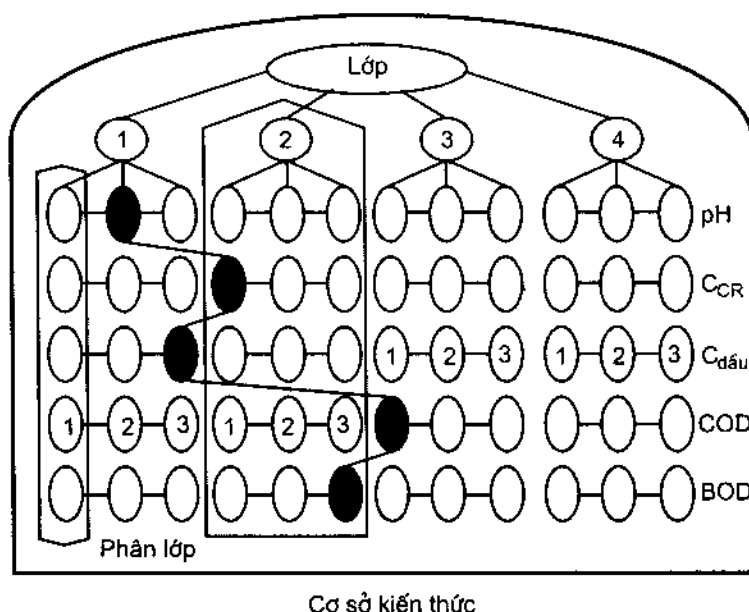
$$\text{sao cho: } (a_{sm_0}, a_{tm_0}) \in r_{m_0}^1; \quad l = \overline{1, L}$$

Tất nhiên giả thiết rằng, nếu theo một trạng thái nào đó chuyên gia xác định sự có mặt một tính chất nào đó thì trạng thái mô tả bởi một nhóm dấu hiệu không nhỏ hơn những tính chất đặc trưng đó, đồng thời cũng có tính chất đó, tức là nếu $a_s \in K_l$ và $(a_t, a_s) \in R_l$ thì $a_t \in K_l$.

Như vậy, nếu trong một trạng thái nào đó của hệ không có một tính chất nào đó thì tính chất đó sẽ không có và không đặc trưng cho trạng thái đó, nghĩa là: Nếu $a_s \in K_l$ và $(a_t, a_s) \in R_l$ thì $a_t \in K_l$.

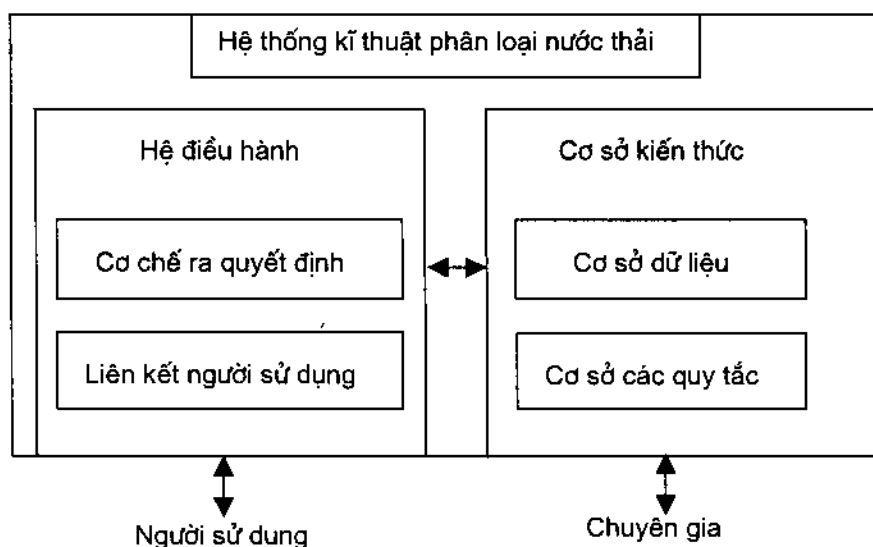
Áp dụng lí luận trên, ta chia dấu hiệu Q_m thành $Q_m = q_{m1} q_{m2} \dots q_{mi}$, sau đó từ phân tử q_m ta chia ra $q_{mi} = \xi_{mi1} \xi_{mi2} \xi_{mi3}$, trong đó ξ_{mi1} là độ tập trung yếu ξ_{mi2} là độ tập trung trung bình, ξ_{mi3} là độ tập trung cao.

Bằng cách lựa chọn như vậy với từng dấu hiệu (nồng độ, thành phần, pH, ...) tương ứng với tính chất (phương pháp xử lí) ta có tập hợp cơ sở kiến thức. Thật vậy cơ sở kiến thức có thể tập hợp theo toàn bộ dấu hiệu (theo đặc tính pha phân tán, theo thành phần hoá học,...) ví dụ xây dựng cơ sở kiến thức theo mô hình nguyên tắc (hình 5.1)



Hình 5.1. Cơ sở kiến thức theo dấu hiệu nước thải

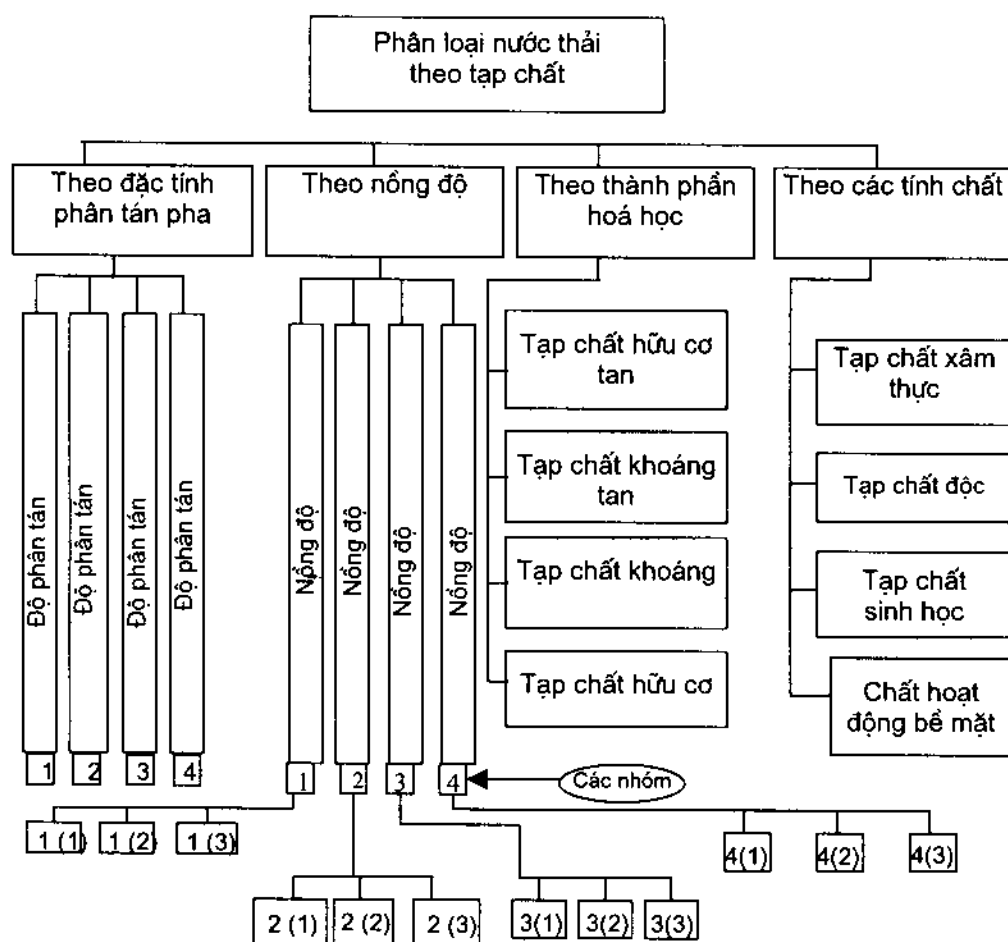
Giả sử, nước thải được xác định bởi vectơ $X_i(t) = x_{i1}(t), x_{i2}(t), \dots, x_{i5}(t)$, khi đó phân nhóm được tô đen sẽ đặc trưng cho các chỉ số sau đây COD $\rightarrow$ (3 (1)); BOD $\rightarrow$ (2 (3)). Các chỉ số đó liên quan đến nước thải có nồng độ đậm đặc, để làm sạch phải sử dụng các phương pháp lắng, đông tụ, sinh học.



Hình 5.2. Hệ thống phân loại nước thải

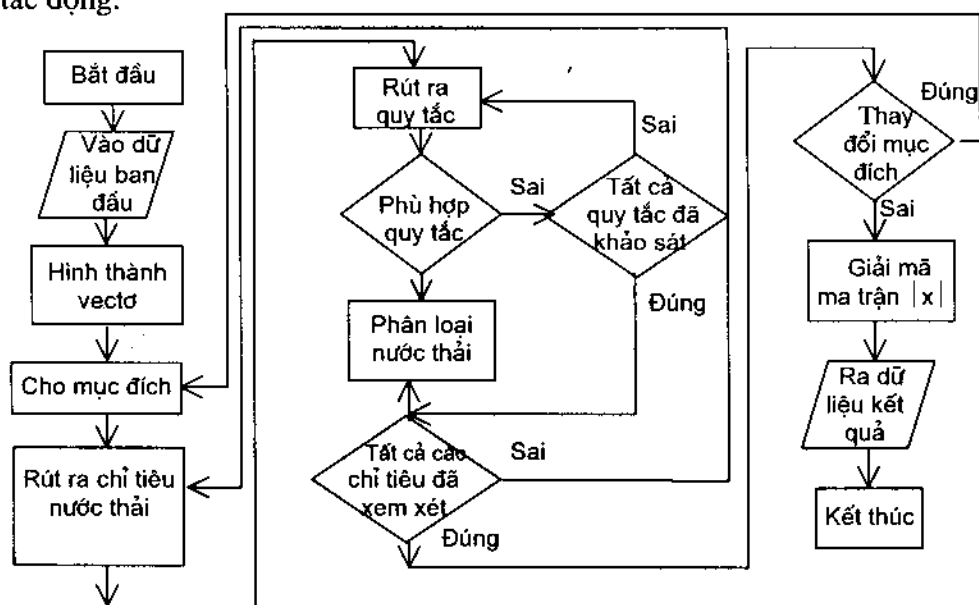
Hệ thống phân loại xây dựng ở trên tìm được có thể ứng dụng để thiết kế các sơ đồ tối ưu xử lý nước thải, đặc biệt nó có ích như một hệ thống kỹ thuật phân loại nước thải (hình 5.2). Đồng thời cũng có thể sử dụng nó để điều khiển quá trình công nghệ xử lý, trong trường hợp đó nó là một thành phần của hệ thống điều khiển.

Cấu trúc kỹ thuật của hệ thống phân loại nước thải bao gồm bốn phân hệ chương trình theo đặc trưng phân tán pha tạp chất, nồng độ, thành phần hoá học và tính chất của chúng. Từng phân hệ trong chúng được kết cấu từ các nhóm và phân nhóm.



Hình 5.3. Cấu trúc phân loại nước thải

Sau khi đưa số liệu đầu vào và thiết lập các vectơ, ta đưa ra mục đích – giả sử rằng thực hiện nhiệm vụ phân loại theo sự phân tán pha. Sau đó rút ra chỉ tiêu nước thải và quy tắc, xác định sự tương ứng quy tắc (nếu như – thì). Phân quy tắc (nếu như) gọi là cơ sở, phân quy tắc (thì) gọi là kết luận hay tác động.



Hình 5.4. Thuật toán phân loại nước thải

Ta xem xét quy tắc (nếu như – thì):

$$\text{Nếu } Y(h(X_{ij})) > X(A_i) \quad (5.1)$$

Thì trong nước thải có tạp chất X(B)

Trong đó:

Y, X – biến số;

h – cơ sở;

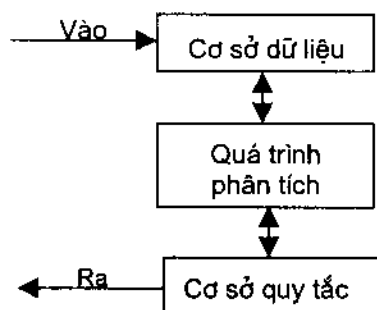
X_{ij} – giá trị yếu tố vectơ, thí dụ COD

Như vậy, khi thực hiện điều kiện (5.1) ta viết kết quả phân loại vào ma trận như sau:

$$X_j = \begin{cases} 1 & \text{nếu thực hiện điều kiện} \\ 0 & \text{trường hợp ngược lại} \end{cases}$$

Sau khi lựa chọn các chỉ tiêu theo đặc trưng phân tán pha ta thực hiện tiếp các chỉ tiêu khác và kết quả được in ra.

Trên cơ sở hệ phân loại nước thải đã xem xét trong tương lai ta có thể xây dựng các hệ chuyên gia. Trong trường hợp này, hệ được xem xét như là hệ sản xuất (hình 5.5). Như vậy, hệ phân loại nước thải đã xem xét có thể ứng dụng để thiết kế (trong đó có điều khiển tự động hệ làm sạch nước thải) và cũng như trong các hệ chuyên gia.



Hình 5.5. Hệ phân loại sản phẩm

5.2. THUẬT TOÁN LỰA CHỌN PHƯƠNG PHÁP XỬ LÝ THEO HỆ PHÂN LOẠI NƯỚC THẢI

Ta xem xét những hướng cơ bản trong việc xây dựng các thuật toán phân loại nước thải theo đặc tính phân tán pha của tạp chất (nồng độ, thành phần hoá học, tính chất). Khâu cơ bản trong hệ phân loại nước thải là mô đun *phân loại theo đặc tính phân tán pha của tạp chất*. Tại đây, ta xem xét một cách kĩ lưỡng thuật toán hệ phân loại theo đặc trưng đó.

Tất cả các tạp chất tồn tại trong nước có thể chia thành bốn nhóm:

- 1) Lơ lửng dạng huyền phù và nhũ tương phân tán nhỏ $10^{-2} - 10^{-4}$ mm
- 2) Keo và các hợp chất cao phân tử $10^{-4} - 10^{-6}$ mm
- 3) Khí và các chất hữu cơ hoà tan $10^{-6} - 10^{-7}$ mm
- 4) Muối, axit, bazơ $10^{-7} - 10^{-9}$ mm

Để xử lý nước thải có tạp chất thuộc nhóm một được thực hiện theo phương pháp trên cơ sở tương tác của lực trọng trường và lực hấp dẫn. Để xử lý nước thuộc nhóm hai cần sử dụng phương pháp keo tụ trên cơ sở đưa vào hệ làm sạch các chất điện li, thay đổi thành phần, nồng độ pha phân tán... Tạp chất nhóm ba được loại bỏ khỏi nước bằng sục khí, ôxi hoá, hấp phụ. Cuối cùng, tạp chất nhóm bốn được loại bỏ bằng cách chuyển các ion về dạng ít tan và hợp chất kém phân li bằng việc sử dụng các chế phẩm tương ứng.

Từ đó ta có thể kết luận:

1) Các dấu hiệu phân loại quyết định bởi trạng thái phân tán pha của tạp chất trong nước.

2) Tương ứng với mỗi một tạp chất là một nhóm phương pháp xử lí.

3) Có thể thay đổi các tính chất phân tán pha của tạp chất bằng cách thay đổi các yếu tố hoá lí của môi trường (pH, thành phần muối, nhiệt độ,...).

Bản chất của thuật toán phân loại nước thải theo đặc trưng phân tán pha là trước hết định hình vectơ $C(k)$ từ số chỉ tiêu (bảng 5.1), sau đó thực hiện phân tích các phần tử của vectơ theo quy tắc: **nếu như – thì**. Kết quả phân loại đưa vào dòng thứ nhất của ma trận phân loại $[X]$ theo quy tắc (5.1). Thuật toán sẽ làm việc trong chế độ đối thoại và người sử dụng, đồng thời thực hiện việc kiểm tra các dữ kiện đưa vào.

Thuật toán phân loại nước thải theo nồng độ tạp chất như sau: Trước hết định hình vectơ $Q(k)$, sau đó so sánh từng phần tử của vectơ đó với từng phần tử của vectơ chuẩn trong ma trận $[X]$. Trong quá trình phân tích kết quả phân loại được đưa vào ma trận $[X]$. Kết quả phân nhóm giá trị số của từng chỉ tiêu được đưa vào đúng vị trí của chỉ tiêu đó. Phân tích vectơ làm việc với vectơ chuẩn thực hiện theo quy tắc **nếu như – thì** (5.1).

Với thuật toán phân loại theo thành phần hoá học phải tính cả tạp chất vô cơ và tạp chất hữu cơ. Mỗi loại trong đó được chia thành hai phân nhóm: tạp chất hoà tan và không hoà tan.

Theo thuật toán, sau khi đưa số liệu ban đầu ta định hình vectơ $Q(k)$ được cấu tạo từ các chỉ số trong bảng 5.2. Sau đó thực hiện phép phân tích các nguyên tố của vectơ $Q(k)$, kết quả đưa vào ma trận $[X]$.

Phép phân tích thực hiện theo quy tắc sau:

Nếu $(C_{\text{khó}} / C_{\text{uớt}}) < 1$

Thì trong nước thải chứa các tạp chất tan chủ yếu ở dạng khoáng.

Trong việc xây dựng thuật toán phân loại nước thải theo tính chất của tạp chất cần tính đến các yếu tố khác như hàm lượng các chất hoạt động bề mặt, chất độc, chất khó ôxi hoá sinh học, hợp chất chứa photpho và nitơ.

Hoạt động của thuật toán này giống như thuật toán trước. Sơ bộ định hình vectơ $Q_x(k)$ mỗi phần tử của nó được so sánh theo quy tắc (5.1) và kết quả đưa vào ma trận $[X]$.

Ví dụ: Nếu COD/BOD > 1,5

Thì trong nước thải chứa tạp chất khó ôxi hoá và không ôxi hoá được bằng phương pháp sinh học

Như vậy, hệ phân loại đề xuất trên đã tính đến một loạt các chỉ số cơ bản của nước thải. Ưu điểm chính của hệ phân loại là có thể ứng dụng để thiết kế tự động các quá trình công nghệ xử lý nước thải.

5.3 CHỌN CÁC PHƯƠNG PHÁP XỬ LÝ VÀ SỰ SẮP XẾP TƯƠNG HỖ CỦA CHÚNG TRONG SƠ ĐỒ CÔNG NGHỆ LÀM SẠCH NƯỚC THẢI

Trong quá trình tổng hợp sơ đồ công nghệ làm sạch nước thải trước hết cần thực hiện việc chọn các phương pháp và sắp xếp tương hỗ giữa chúng. Công việc của người kỹ sư khi thiết kế hệ làm sạch nước thải là lựa chọn phương pháp hiệu quả nhất từ sự đa dạng của chúng và kết hợp giữa chúng. Quá trình này dễ dàng tự động hoá, nếu người thiết kế biểu diễn nó ở dạng một hệ tiên đề và tư duy logic.

Sử dụng nguyên tắc làm việc của các hệ chuyên gia, mà kiến thức của nó được trình bày ở dạng sản phẩm, đã đề xuất quá trình lựa chọn phương pháp theo thuật toán được giới thiệu ở hình 5.6. Ở đây, sản phẩm được trình bày ở dạng công thức:

(J); Q; P; $A \rightarrow B$; N

Trong đó:

J – tên gọi sản phẩm;

Q – đặc trưng môi trường sử dụng sản phẩm;

A, B – hạt nhân sản phẩm;

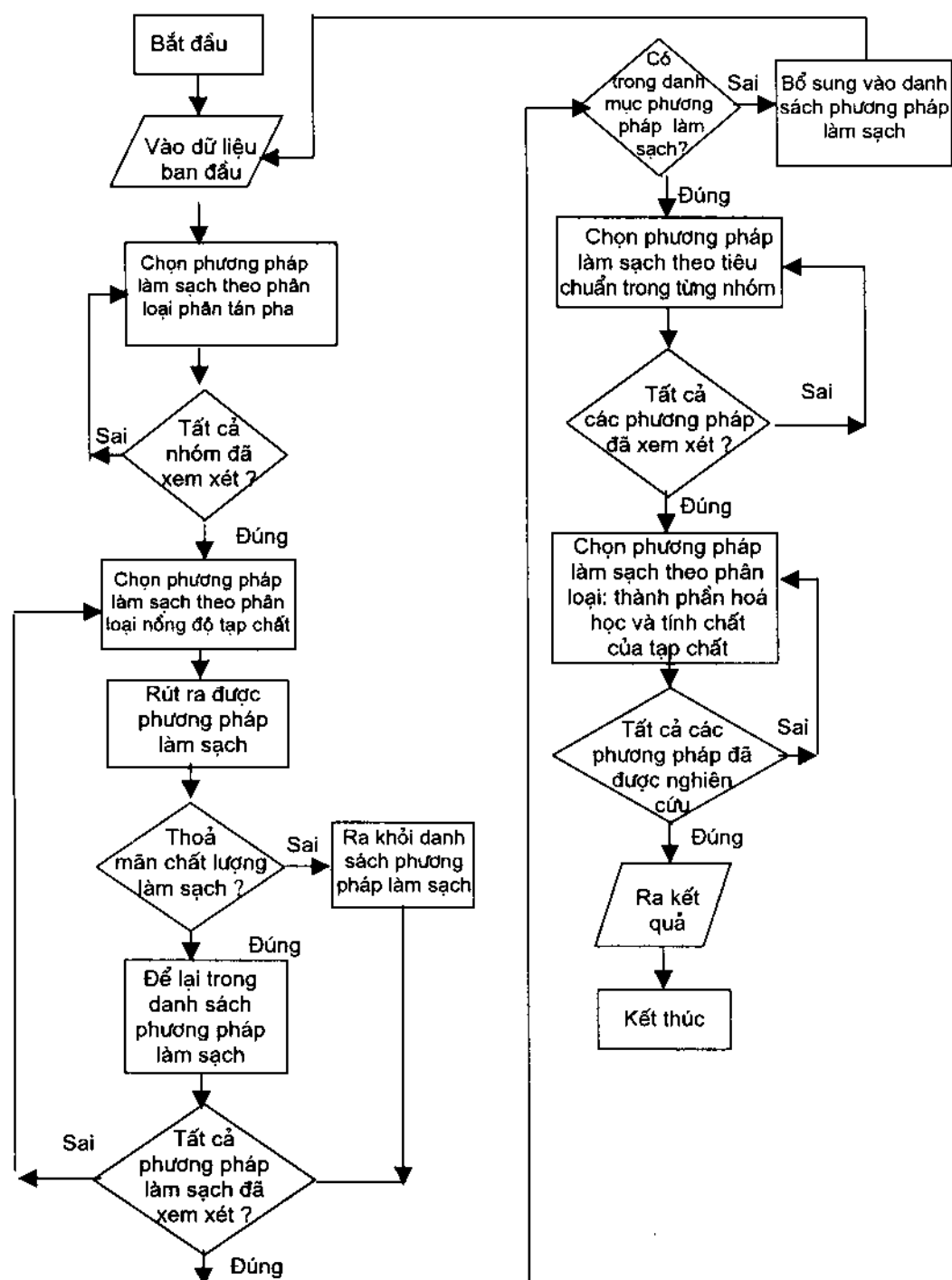
P – điều kiện sử dụng sản phẩm;

N – mô tả độ ứng dụng của sản phẩm.

Trong sự tương thích với thuật toán (hình 5.6) sau khi đưa các dữ kiện vào ta thực hiện bước một: Lựa chọn phương pháp xử lý theo phân loại phân tán pha và nguyên tắc:

Nếu trong nước thải tồn tại tạp chất nhóm i

Thì trong ma trận phương pháp xử lý tất cả các phương pháp đều nằm trong cột i, sẽ tham gia vào quá trình lựa chọn.



Hình 5.6. Thuật toán lựa chọn phương pháp xử lý

**BẢNG 5.4. NHÓM CÁC PHƯƠNG PHÁP LÀM SẠCH NƯỚC THẢI THEO
PHÂN LOẠI PHÂN TÁN PHA**

PHƯƠNG PHÁP LÀM SẠCH	KÍ HIỆU PHƯƠNG PHÁP LÀM SẠCH	NHÓM			
		1	2	3	4
Lắng	0	+			
Lọc nhanh	F1	+			
Lọc chậm	F2	+	(+)		
Pha loãng	P1	+	+	+	+
Trung hoà bằng vôi, lắng	H1	(+)	(+)		+
Trung hoà bằng vôi, lọc	H2	(+)	(+)		+
Trung hoà bằng soda	H3				+
Trung hoà bằng các chất phản ứng kết hợp, lắng	H4	(+)	(+)		
Trung hoà bằng các chất phản ứng kết hợp, lọc	H5	(+)	+		+
Trung hoà bằng axit	H6				+
Đồng tụ bằng vôi, lắng	K1	(+)	+		
Đồng tụ bằng vôi với lọc nhanh	K2	(+)	+		
Đồng tụ bằng sunphat nhôm, lắng	K3	(+)	+		
Đồng tụ bằng sunphat nhôm, lọc	K4	(+)	+		
Đồng tụ bằng clorua sắt, lắng	K5	(+)	+		
Đồng tụ bằng clorua sắt, lọc	K6	(+)	+		
Đồng tụ bằng các chất phản ứng kết hợp, lắng	K7	(+)	+		
Đồng tụ bằng các chất phản ứng kết hợp, lọc	K8	(+)	+		
Xử lí sinh học với bùn hoạt tính	B1	(+)	+		
Thông khí	A1			+	(+)
Ozon hoá	AA			+	(+)
Hấp phụ trên than hoạt tính	AD			+	(+)
Clo hoá	X			+	

Nếu trong nước thải chứa tạp chất nhóm một (hạt thô lơ lửng) từ bảng 5.4, ta thấy tạp chất có thể được loại bỏ bằng phương pháp lắng, lọc nhanh, lọc chậm. Từ ba phương pháp trên, ta cần chọn phương pháp bảo đảm chất lượng nước cần xử lí với nồng độ $C = K(k)$ trong đó nhóm K, phân nhóm k. Các phương án có thể K(k) có thể nằm trong tình huống: (1) một vài phương pháp, (2) chỉ cần một phương pháp, (3) không có phương pháp nào đạt yêu cầu.

Nếu kết quả lựa chọn ở trong tình huống thứ nhất hoặc thứ hai tiếp tục kiểm tra phương pháp đã chọn theo phân loại nồng độ tạp chất, thành phần hoá học và tính chất của tạp chất. Việc kiểm tra cũng phải thực hiện với phân loại pha phân tán. Những phương pháp đã chọn phù hợp với quá trình làm sạch theo nhóm $K(k)$ được so sánh theo các tiêu chuẩn và kết quả được in ra.

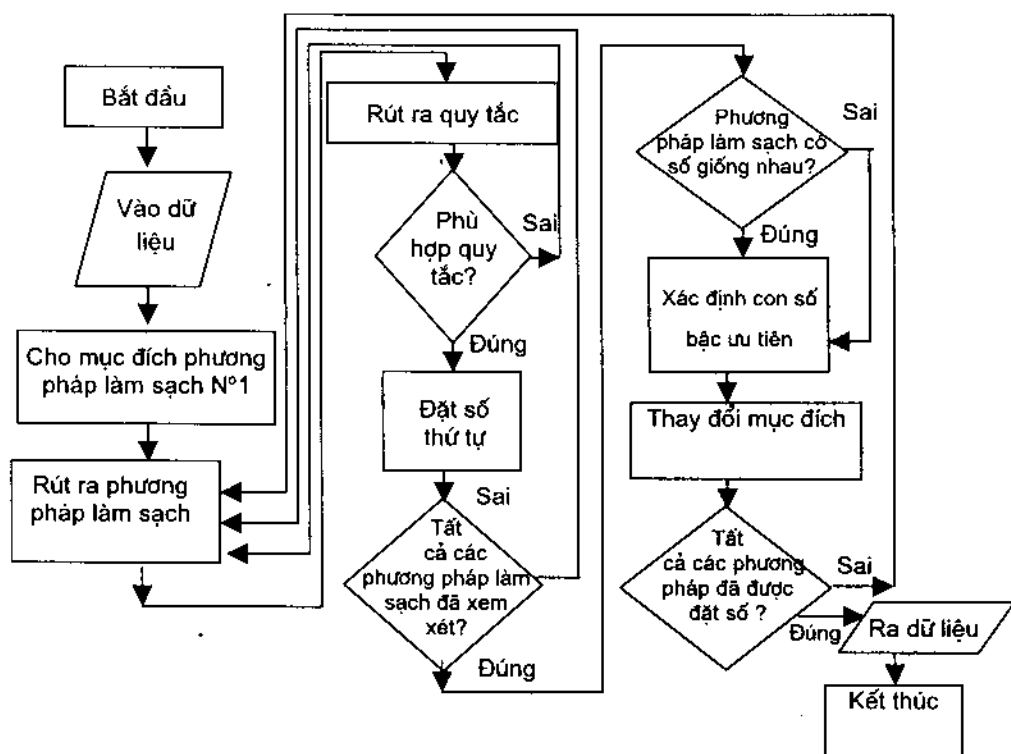
Nếu kết quả chọn là tình huống thứ ba thì cần phải trở lại từ đầu (hình 5.6) hoặc áp dụng thêm các biện pháp khác. Để làm điều đó cần phân tích nhận định tại nguyên nhân nào không thực hiện được và xác định đúng nguyên nhân đó. Ví dụ, sau khi kiểm tra điều kiện lắng ta thấy không đạt yêu cầu do trong nước thải có chất hoạt động bề mặt. Trong trường hợp này, trước khi thực hiện lắng cần ozon hoá hoặc hấp phụ trên than hoạt tính để loại bỏ chất hoạt động bề mặt, làm giảm nồng độ của chúng, tạo điều kiện cho quá trình kết tủa.

Giả sử, sau khi chọn phương pháp xử lý ta nhận thấy rằng, để loại bỏ tạp chất từ nước thải nhóm $K(k)$ yêu cầu thực hiện làm sạch theo phương pháp áp dụng cho bốn nhóm : nhóm một – lắng, nhóm hai – keo tụ bằng sunfat nhôm kết hợp với lắng, keo tụ bằng sunfat nhôm kết hợp với lọc, nhóm ba – phương pháp sinh học với bùn hoạt tính, từ nhóm bốn – trung hoà bằng vôi và sau đó, lắng, trung hoà bằng vôi và lọc. Như vậy, (bảng 5.3) vectơ lựa chọn phương pháp sẽ có dạng:

$$X_{14}(k) = (1, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 0, 1, 1, 0, 0, 1, 1, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1, 0, 1)$$

Vectơ $X_{14}(k)$ cho thấy rằng, để làm sạch nước thải nhóm $K(k)$ cần thiết phải chọn một phương pháp nhất định, mặc dù vậy vẫn chưa đủ bởi cần phải biết sự tương quan giữa chúng.

Trong công nghệ xử lý nước thải ta thấy tính tuần tự nhất định khi sử dụng các phương pháp làm sạch khác nhau. Theo nguyên tắc trước hết là xử lý cơ lý sau đó đến các phương pháp hoá lý và cuối cùng là phương pháp sinh học. Đôi khi trình tự đó bị thay đổi. Khi đó, cần có các biện pháp bổ sung, như chúng ta đã xem xét ở trên. Tổng thể mỗi phương pháp có vị trí và ý nghĩa trong cấu trúc công nghệ và ứng dụng phụ thuộc vào các điều kiện cụ thể. Ta xem xét thuật toán xác định vị trí của phương pháp xử lý trong toàn bộ dây chuyền công nghệ (hình 5.7).



Hình 5.7. Thuật toán xác định vị trí phương pháp làm sạch trong sơ đồ công nghệ xử lý nước thải

Sau khi nhập các dữ kiện đầu vào, có vector phương pháp xử lý X_{14} từ đó chọn trình tự phương pháp xử lý và so sánh với mục đích, trong đó mục đích là "số thứ tự N tương hợp với phương pháp xử lý đã chọn". Khi phương pháp đã chọn trùng hợp với mục đích, ta ghi vào đúng thứ tự. Trong trường hợp ngược lại, từ vector ta chọn ra phương pháp khác và như vậy cho đến khi đạt được mục đích. Khi đã tìm được sự trùng hợp, phương pháp xử lý được đánh dấu đúng số thứ tự và quay lại vị trí không trùng hợp ban đầu. Sau đó xác định xem tất cả các phương pháp đã được xác định chưa, kiểm tra có phương pháp nào trùng nhau không. Nếu phát hiện có sai sót cần phải làm lại chính xác hơn. Sau đó thay đổi mục đích. Kết thúc thuật toán là kiểm tra "toàn bộ phương pháp xử lý đã có số thứ tự" và đưa ra kết quả.

Cần phải nhấn mạnh cơ sở kiến thức vị trí của các phương pháp xử lý được hình thành sao cho số mục đích tương ứng với của số phương pháp.

Ta xem xét các quy tắc riêng thực hiện quá trình xác định thứ tự các phương pháp xử lý.

1. Quá trình lắng thực hiện sau quá trình lọc:

Quy tắc $N_0 < N_p$

Thì thực hiện quy tắc $N_0 = N_i$

Trong đó: N_0 – số thứ tự quá trình kết tủa;

N_p – số thứ tự quá trình lọc N_i số thứ tự đang cần tìm.

2. Quá trình kết tủa thực hiện trước quá trình cơ lí và sinh học

Quy tắc $N_0 < (N_{cl}, N_{hl}, N_{sh}, N_i)$

3. Quá trình trung hoà thực hiện ngay sau quá trình cơ học, khi nước thải có độ axit hoặc kiềm

Quy tắc $C_{pH} > 7,5$ hoặc $C_{pH} < 6$

Thì $N_{cl}, N_i, N_{kt} < N_{th} < (N_{hl} - N_{sh})$

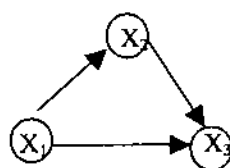
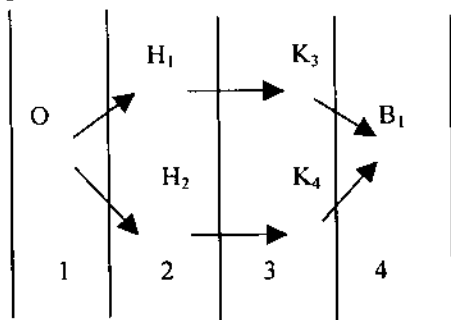
Kết quả làm việc của thuật toán trong ví dụ trên cho vectơ xử lí có dạng $X_{14}(k) = (1,0,0,0,2,2,0,2,2,2,0,2,3,3,0,0,3,3,0,0,4,4,0,0)$ đồ thị chỉ ra trên hình 5.8

Bây giờ chúng ta xác định tổ hợp khả dĩ số phương pháp xử lí nước thải ở dạng đồ thị: $G = (X, A)$ (hình 5.9).

Trong đó:

X – tổng hợp đỉnh $X_1, X_2, X_3, \dots, X_n$;

A – tập hợp cạnh (giữa các phương pháp làm sạch) $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n$ (các phương pháp xử lí).



$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Hình 5.8. Sự sắp xếp phương pháp làm sạch Hình 5.9. Đồ thị định hướng và ma trận liên đới

Biểu đồ quan hệ ở dạng ma trận hỗn hợp $A(G) = (a_{ij})$ (hình 5.10) được xác định như sau:

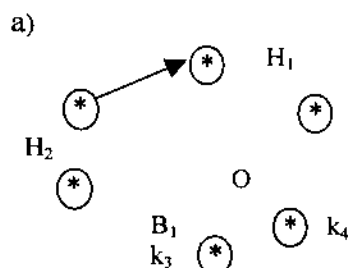
$$a_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{Nếu trong } G \text{ có cung } (x_i, x_j) \\ 0 & \text{Trường hợp ngược lại} \end{cases}$$

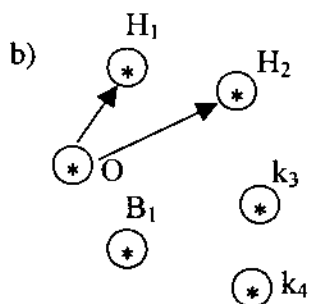
Ma trận liên đới trong trường hợp này sẽ có thứ nguyên bởi vì số đỉnh tương ứng với số phương pháp.

Bây giờ ta sẽ xác định ma trận liên đới. Lấy ra từ phương pháp xử lí đầu tiên X_{14} , đó là quá trình lắng. Sau đó xác định thứ tự các phương pháp xử lí và nối các đỉnh của biểu đồ (hình 5.10a, b).

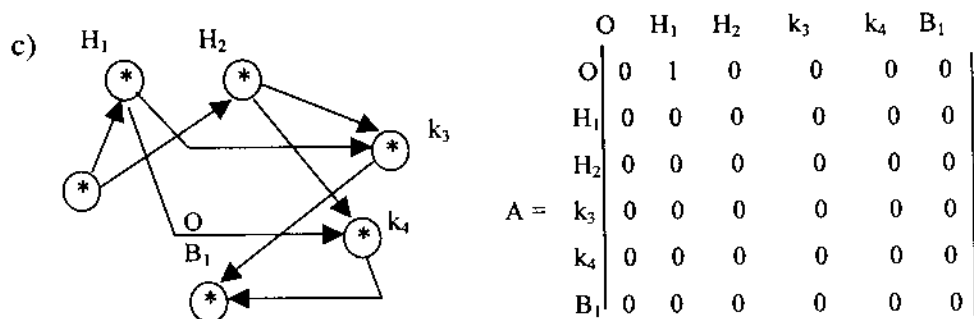
Phương pháp thứ tư – phương pháp K_3 . Xác định điều kiện thực hiện phương pháp đó theo bảng 5.5, trong đó có liệt kê các chỉ tiêu của nước thải và giá trị của chúng.

Rõ ràng, keo tụ có thể thực hiện ở $pH = 6 \div 7,5$ trong trường hợp này sau quá trình kết tủa pH nước thải bằng 9. Có nghĩa là chúng ta không thể kết hợp các quá trình "O" và " K_3 ". Cũng như vậy không thể kết hợp hai quá trình "O" và " K_4 ".



$$A = \begin{array}{c|cccccc} & O & H_1 & H_2 & k_3 & k_4 & B_1 \\ \hline O & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ H_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ H_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ k_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ k_4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ B_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}$$


$$A = \begin{array}{c|cccccc} & O & H_1 & H_2 & k_3 & k_4 & B_1 \\ \hline O & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ H_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ H_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ k_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ k_4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ B_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}$$



Hinh 5.10. Xây dựng đồ thị quan hệ

Sau khi đã xác định như vậy các tổ hợp khả dĩ của quá trình "O" với các phương pháp khác (hình 5.10b) ta chuyển sang tìm kiếm các tổ hợp có thể của các phương pháp còn lại.

Giá trị của các chỉ tiêu nước thải sau mỗi một quá trình xử lý xác định theo công thức:

$$C_j^s = C_j^t - \frac{E_j}{100}$$

trong đó C_j^s nồng độ j chỉ số nước thải sau xử lý C_j^t nồng độ j chỉ số trước xử lý E_j hiệu quả quá trình i theo chỉ số j.

Kết quả tổ hợp có thể của các phương pháp xử lý nước thải nhóm K ở dạng đồ thị quan hệ và ma trận liên đới A(G) được biểu thị ở hình 5.10b.

Sau đây, chúng ta thực hiện định hình sơ đồ công nghệ xử lý.

5.4. ĐỊNH HÌNH SƠ ĐỒ CÔNG NGHỆ XỬ LÝ

Định hình sơ đồ công nghệ xử lý nước thải nhóm K bắt đầu từ đồ thị quan hệ (hình 5.10b) được thực hiện như sau:

Xác định các con đường có thể trên đồ thị từ các đỉnh đầu vào đến đỉnh cuối – trong trường hợp này – từ đỉnh tương ứng quá trình "O" đến đỉnh tương ứng quá trình "B₁" ở đây kết thúc quá trình xử lý. Ta đã có ma trận liên đới và đồ thị quan hệ. Ta xây dựng ma trận tổng thể bằng cách tìm ma trận $|a_{ij}|$ trong đó a_{ij} – số đường từ đỉnh i đến đỉnh j được xác định trên định thức con

$$a_{id} = |a_{ij} \rightarrow ik|_{k}; i = 1, 2, \dots, n; j = 1, 2, \dots, m$$

Biểu thức $|a_{ij} \rightarrow lk|_{lk}$ gọi là định thức con của phần tử a_{lk} trong ma trận $|a_{ij}|$. Tính toán trên định thức đầu vào cần phải phân tích thành các định thức có bậc nhỏ hơn:

$$|a_{ij} \rightarrow lk|_{lk} = \sum a_{nm} A_{nm}^{(l)}$$

Nếu ma trận các đường không xác định có dạng (5.2) của biểu đồ hình 5.11.

$$|a_{ij}| = \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline & a_{12} & a_{13} & a_{14} & \\ \hline & & & a_{24} & a_{25} \\ \hline & & & & a_{35} \\ \hline & & a_{43} & & a_{45} \\ \hline a_{51} & & & & \\ \hline \end{array} \quad (5.2)$$

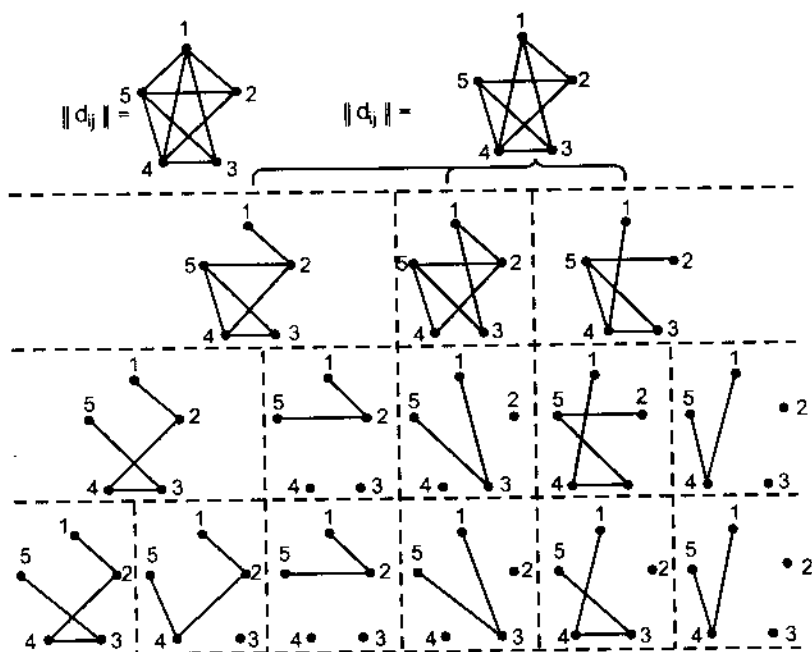
Yêu cầu xác định những con đường có thể từ các đỉnh 1 tới các đỉnh 5 và tính số con đường đó. Để làm việc này trong ma trận (5.2) đánh dấu cột với số 1 (tương ứng với số đỉnh bắt đầu) và hàng với số thứ tự 5 (tương ứng với số đỉnh kết thúc). Nhận được tựa định thức dạng (5.3) và xác định các con đường có thể từ đỉnh 1 tới đỉnh 5 và số lượng khoảng cách.

$$|a_{ij \rightarrow 51}|_{15} = \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline & a_{12} & a_{13} & a_{14} & \\ \hline & & & a_{24} & a_{25} \\ \hline & & & & a_{35} \\ \hline & & a_{43} & & a_{45} \\ \hline \end{array} \quad (5.3)$$

Tiếp tục phân tích (5.3) cho đến khi trong đó còn lại định thức con bậc một, cuối cùng ta nhận được:

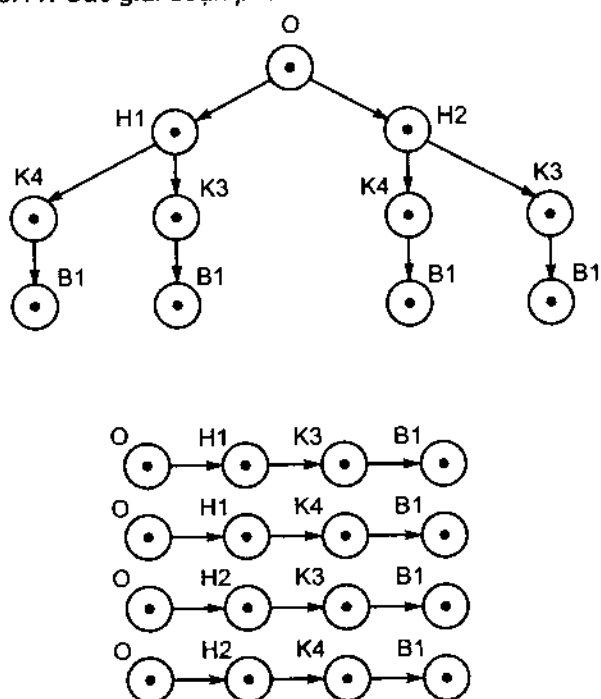
$$|a_{ij \rightarrow 51}|_{15} = a_{12}a_{43}a_{35} + a_{23}a_{34}a_{45} + a_{12}a_{25} + a_{33}a_{35} + a_{34}a_{43}a_{35} + a_{14}a_{45}$$

Quá trình đó gọi là quá trình phân tích đồ thị và được chỉ ra trên hình 5.11.



Hình 5.11. Các giai đoạn phân tích biểu đồ

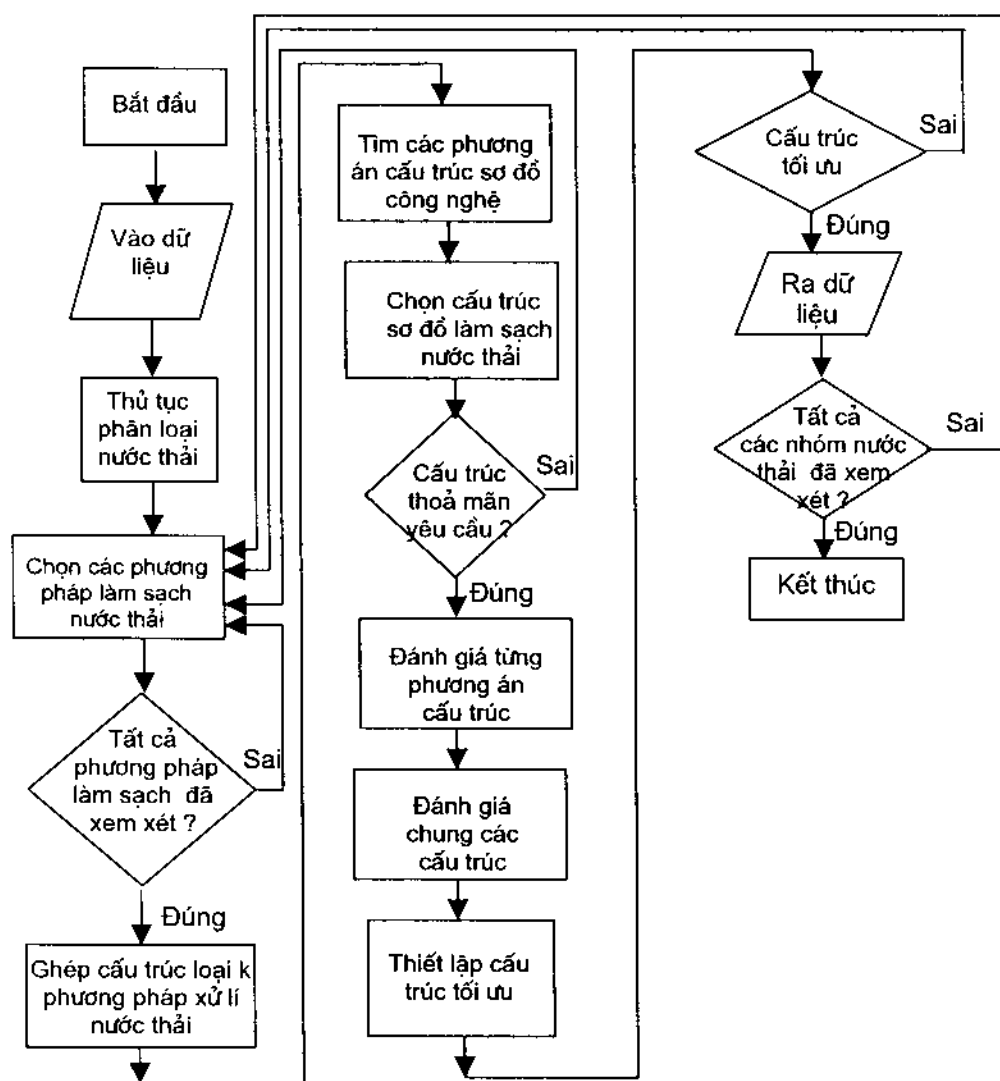
Ứng dụng phương pháp trên cho đồ thị quan hệ (hình 5.10b) có thể nhận được các con đường từ đỉnh "O" đến đỉnh "B". Số các con đường đó là bốn, còn bản thân các con đường là các phương án cấu trúc công nghệ xử lý nước thải nhóm K (hình 5.12).



Hình 5.12. Sơ đồ công nghệ xử lý nước thải nhóm K

Phương pháp tổng hợp các phương án của sơ đồ công nghệ xử lý nước thải đã mô tả trên đây hoàn toàn phù hợp với thuật toán (hình 5.13)

Thuật toán đó còn có thể chọn ra phương án tối ưu của công nghệ xử lý nước thải. Để ứng dụng toàn bộ thuật toán cần xây dựng tiêu chuẩn đánh giá hiệu quả của sơ đồ công nghệ xử lý nước thải.



Hình 5.13. Thuật toán định hình cấu trúc sơ đồ làm sạch nước

5.5. TIÊU CHUẨN ĐÁNH GIÁ SỰ LỰA CHỌN SƠ ĐỒ XỬ LÝ TỐI ƯU

Để lựa chọn được sơ đồ tối ưu từ một loạt các phương án khả dĩ, cần xác định rõ tiêu chuẩn đánh giá hiệu quả của nó. Để thực hiện điều đó người ta đưa ra tiêu chuẩn tối ưu π – cực tiểu hoá chi phí cho xử lý:

$$\pi = \min \pi = \min (C_i + E_h K_j); \quad i=1.. N \quad (5.4)$$

Trong đó:

C_j – giá thành xử lý nước thải theo sơ đồ i ;

K – tổng vốn đầu tư;

$E_h = 0,15$ – hệ số định mức hiệu quả vốn đầu tư;

Mỗi một sơ đồ i được cấu tạo từ j phương pháp xử lý, trong j phương pháp có m cụm thiết bị, như vậy:

$$C_j = \sum_{j=1}^n C_{ij} \quad ; \quad K_j = \sum_{j=1}^n K_{ij} \quad (5.5)$$

$$C_{ij} = \sum_{j=1}^n \sum_{m=1}^M C_{ijm} \quad ; \quad K_{ij} = \sum_{j=1}^n \sum_{m=1}^M K_{ijm} \quad (5.6)$$

Theo từng sơ đồ i ta có ràng buộc:

$$P_{iz} \leq P_{z,d} \quad i = 1, \dots, N \quad z = 1 \dots Z \quad (5.7)$$

Trong đó: z – số chỉ số định mức trong dòng làm sạch BOD, COD, chất hoạt động bề mặt, photphat,...

Ứng dụng tiêu chuẩn số (5.4) với ràng buộc (5.7) ta có thể chọn được phương án tối ưu của sơ đồ công nghệ xử lý nước thải. Đặc điểm của tiêu chuẩn này là giá thành xử lý được tính theo từng sơ đồ kể cả chi phí cho phương pháp xử lý, chi phí phục vụ cho từng cụm, từng thiết bị. Ràng buộc là mức độ làm sạch theo một số chỉ tiêu BOD, COD, photphat ...

Nhược điểm của tiêu chuẩn này là không tính đến sự dao động về thành phần, nồng độ, độ an toàn, không đánh giá ảnh hưởng của môi trường xung quanh.

Do đó ta cần thực hiện sự đánh giá cho từng phương án công nghệ theo tiêu chuẩn số có : chi phí $h(x_1)$, độ bền $h(x_2)$, độ an toàn $h(x_3)$:

$$\left. \begin{aligned} h(x_1) &= \min(h(x_{11}), h(x_{12})) \\ h(x_2) &= \min(h(x_{21}), h(x_{22}), h(x_{23}), h(x_{24}), h(x_{25})) \\ h(x_3) &= \min(h(x_{31}), h(x_{32})) \end{aligned} \right\} \quad (5.8)$$

Chi phí $h(x_1)$ có chi phí vốn đầu tư cố định $h(x_{11})$ và chi phí vận hành $h(x_{12})$. Chúng được xác định theo công thức (5.4 – 5.7).

Độ ổn định $h(x_2)$ bao gồm:

$h(x_{21})$ – độ ổn định của hệ với lưu lượng nước;

$h(x_{22})$ – độ ổn định của hệ khi thay đổi chất lượng nước vào;

$h(x_{23})$ – độ ổn định do sự nhiễm bẩn của dòng vào;

$h(x_{24})$ – độ tin cậy của hệ, $h(x_{25})$ – tính công nghệ của sơ đồ.

Độ an toàn $h(x_3)$ bao gồm : đánh giá độ nguy hiểm tạo bùn của hệ $h(x_{31})$ và sự ảnh hưởng đến môi trường xung quanh $h(x_{32})$.

Giả thiết rằng, cực đại độ bền vững của hệ với mọi dao động có thể của chất bẩn và cực đại độ an toàn của hệ với môi trường xung quanh sẽ là cực tiểu của $h(x_2)$ và $h(x_3)$ hoặc là 100% độ bền có nghĩa là tương ứng với "không".

Đánh giá tổng thể có nghĩa là sắp xếp các trọng số giữa chi phí, độ bền vững và độ an toàn trong từng trường hợp nhất định. Ở đây, sử dụng phương pháp tổ hợp cân do Phanôn đưa ra thể hiện ở phân bố các trọng số trong số những tập hợp con với quy tắc sau:

Nếu chấp nhận chi phí $h(x_1)$, hệ xử lý đủ bền $h(x_2)$, đủ độ an toàn $h(x_3)$, thì phương án đã cho được coi là tối ưu và có thể tiếp tục xem xét chi tiết hơn.

Bây giờ ta đánh giá ý nghĩa của $h(x_1)$, $h(x_2)$, $h(x_3)$, trong đó với mỗi tập hợp con Q biến $x = \{x_1, x_2, x_3\}$, trọng số $q(Q)$ phân bố theo quy luật sau:

$$1. q(0) = 0, q(x) = 1$$

$$2. \text{ Nếu } \forall Q_1, Q_2, Q_1 \subseteq Q_2 \text{ thì } q(Q_1) \leq q(Q_2).$$

Trong đó đánh giá chung ý nghĩa $E(x)$ được cho ở dạng:

$$E(x) = \max (\min (h(x_i)) \wedge q(F))$$

$$F \in P(x) \quad x_i \in P.$$

$P(x)$ – tập hợp của các tập hợp con được tạo ra bởi các phần tử của nó x_i .

Để đánh giá quy tắc thường là phải tìm giá trị cực tiểu của từng ước lượng có nghĩa. Phương pháp này cũng có những nhược điểm vì nó phụ thuộc quá nhiều vào sự đánh giá chung, trong trường hợp thiếu chỉ một thành phần, sự đánh giá chung sẽ không còn ý nghĩa. Mặt khác, nhờ có sự phân bố của các trọng số tương đối giữa các tập hợp con, thông tin đó có thể sử dụng một cách có hiệu quả.

Như vậy, tiêu chuẩn (5.4) với ràng buộc (5.7) cho phép lựa chọn được phương án tối ưu của sơ đồ công nghệ trên quan điểm chi phí, còn tiêu chuẩn (5.8) – có cả chi phí, độ bền vững, độ an toàn. Để sử dụng các tiêu chuẩn đó có hiệu quả cần có mô tả toán học của các quá trình xử lý nước thải xảy ra trong các thiết bị, không những cả định tính mà còn cả định lượng các đặc tính của hệ xử lý cần thiết cho việc thiết kế.

5.6. PHƯƠNG PHÁP ĐA MỨC TỔNG HỢP CÁC SƠ ĐỒ TỐI ƯU XỬ LÝ NƯỚC THẢI BẰNG BIỆN PHÁP SINH HỌC

Giai đoạn quan trọng của phương pháp nâng cao hiệu quả xử lý nước thải bằng biện pháp sinh học nêu ra ở đây là giải bài toán tối ưu hoá cấu trúc và chế độ làm việc của sơ đồ công nghệ. Thời hạn thiết kế thiết bị và cả sự kịp thời ra quyết định kỹ thuật phụ thuộc vào hiệu quả của các thuật toán, phương pháp giải bài toán. Hiệu quả đó thể hiện ở độ hội tụ, tính nhanh và độ tin cậy của lời giải.

Dưới đây mô tả công cụ toán học để giải quyết nhiệm vụ mô hình hoá và tối ưu hoá cấu trúc – thông số của các hệ công nghệ sinh học.

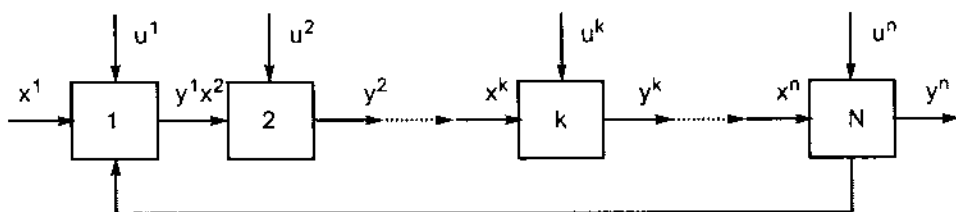
5.6.1. Hình thức hoá bài toán tổng hợp

Bài toán tổng hợp các hệ thống công nghệ hoá học và công nghệ sinh học như sau:

Giả sử, đã biết các chất ban đầu X và Y cần nhận được cũng như đã có một nhóm các thiết bị cơ bản (gọi là bloc). Yêu cầu lựa chọn và kết hợp $N(N \leq N^*)$ bloc và xác định chế độ làm việc sao cho có thể nhận được lượng sản phẩm đã định Y, trong đó có một tiêu chuẩn nào đó phải có giá trị tối ưu (cực tiểu hay cực đại).

Để hình thức hoá bài toán tổng hợp cần định hình mô hình toán của sơ đồ công nghệ tổng thể, tiêu chuẩn tối ưu và ràng buộc của các biến số.

Mô hình toán của sơ đồ công nghệ tổng thể cấu tạo từ tập hợp các mô hình toán của các bloc riêng biệt và mô hình toán cấu trúc của hệ công nghệ hoá học tổng thể. Giả sử, siêu cấu trúc cấu tạo từ N bloc ($N \leq N^*$), trong đó N là số bloc trong sơ đồ tối ưu; bloc k ($k = \overline{1, N}$) có M_k dòng vào, L_k dòng ra và r_k biến điều khiển. Cho rằng, mọi dòng vào x_i^k ($i = \overline{1, M_k}$) dòng ra y_j^k ($j = \overline{1, L_k}$) có cùng đơn vị và có cùng các biến số. Nếu trong một dòng nào đó có không hết các biến số thì các biến số thiếu hụt đó được coi bằng không. Đặt $x^k = (x_1^k \dots x_{M_k}^k)$, $y^k = (y_1^k \dots y_{L_k}^k)$ là vectơ các biến dòng vào bloc k , kích thước $l_k = nL_k$, $u^k = (u_1^k \dots u_{r_k}^k)$ – vectơ biến điều khiển. Biến của các vectơ x^k , y^k đặc trưng trạng thái dòng vào và ra của bloc k có cả nồng độ, nhiệt độ, áp suất, lưu lượng gọi là biến trạng thái hoặc biến pha. Biến u^k bao gồm các thông số cấu trúc và công nghệ mà sự thay đổi ảnh hưởng trực tiếp đến chế độ làm việc của bloc k (hình 5.14).



Hình 5.14. Sơ đồ khối hệ thống công nghệ tối ưu

Mô hình toán của bloc k có thể viết dưới dạng:

$$y^k = \varphi^k(x^k, u^k), \quad k = \overline{1, N} \quad (5.9)$$

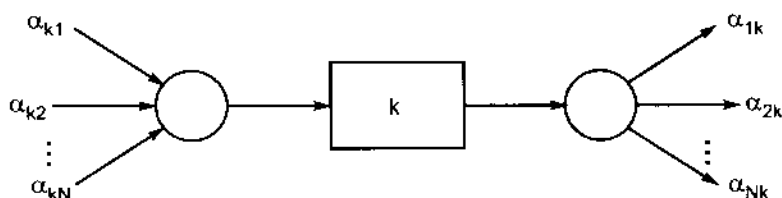
Cho trước sự phụ thuộc hàm giải tích của các biến đầu ra vào biến đầu vào và biến điều khiển không nhất thiết ở dạng tường minh. Giả sử, có một thuật toán cho phép theo các biến đầu vào và các biến điều khiển tính được giá trị các biến đầu ra của bloc k .

Dạng mô hình toán cấu trúc hệ công nghệ tổng thể phụ thuộc vào loại thông số cấu trúc sử dụng. Phân biệt hai loại thông số cấu trúc. Một loại tương ứng với dòng, một loại khác tương ứng với bloc. Thông số cấu trúc α_{jk} ($0 \leq \alpha_{jk} \leq 1$) loại một tương ứng với dòng có thể liên kết bloc k và j . Các thông số α_{jk} là biến liên tục. Thông số cấu trúc loại hai δ_k tương ứng bloc k và là biến nhị phân:

$$\delta_k \begin{cases} 0 & \text{Nếu bloc } k \text{ có mặt trong hệ công nghệ;} \\ 1 & \text{Trường hợp ngược lại.} \end{cases}$$

Số thông số cấu trúc loại hai bằng N.

Thủ thuật chung để xây dựng sơ đồ công nghệ tổng thể với việc sử dụng các thông số cấu trúc loại một như sau : Tại đầu vào và đầu ra của từng bloc k xác định thiết bị trộn và thiết bị chia dòng tương ứng (hình 5.15), còn dòng ra từ từng thiết bị phân chia đưa đến đầu vào của bloc nào đó. Để đơn giản ta giả thiết các dòng ra từ mỗi bloc đưa đến tất cả các bloc còn lại. Như vậy, số dòng và cả số thông số cấu trúc bằng N^2 .



Hình 5.15. Đầu vào và đầu ra của bloc k

Mô hình toán của hệ công nghệ hoá học tổng thể với việc sử dụng các thông số cấu trúc loại một có thể viết dưới dạng các hệ thức:

$$x^k = \sum_{j=1}^N y^j \alpha_{kj}, \quad k = \overline{1, N} \quad (5.10)$$

$$\sum_{j=1}^N \alpha_{jk} = 1, \quad k = \overline{1, N} \quad (5.11)$$

Trong đó: α_{jk} – thông số cấu trúc tương ứng với dòng có thể liên kết bloc k và j ($\alpha_{jk} = \{1, 0\}$).

Phương trình (5.10) và (5.11) là phương trình cân bằng vật liệu của thiết bị trộn và thiết bị chia dòng.

Cần nhấn mạnh rằng, các dòng trong hệ công nghệ hoá học có thể chia thành ba nhóm: nhóm vào, nhóm ra và nhóm trung gian. Dòng vào được đưa từ ngoài vào một trong những bloc của hệ, dòng ra được đưa ra từ một trong những bloc và đi ra khỏi hệ, dòng trung gian đi từ bloc này đến bloc khác. Các biến đặc trưng cho dòng vào, dòng ra, dòng trung gian được gọi là biến vào, biến ra, biến trung gian tương ứng. Biến vào của hệ về hình thức không có gì khác biến điều khiển và sau đây ta coi biến đầu vào bloc là biến đầu vào của hệ, là biến điều khiển của bloc đó.

Để hệ làm việc một cách bình thường các biến ra, biến trung gian và biến điều khiển cần phải đáp ứng một số yêu cầu công nghệ và thiết kế, được viết dưới dạng phương trình cân bằng vật liệu và nhiệt:

$$\begin{aligned}\psi_i(x^k, u^k) &= 0; \quad i = \overline{1, m_1} \\ h_j(x^k, u^k) &\leq 0 \quad j = \overline{1, m_2}\end{aligned}\quad (5.12)$$

Trong đó: x^k, u^k – vectơ của biến vào và biến điều khiển bloc k.

hoặc dưới dạng vectơ:

$$\left. \begin{aligned}\psi(x, u) &= 0 \\ h(x, u) &\leq 0\end{aligned}\right\} \quad (5.13)$$

Trong đó: ψ, h hàm số vectơ có thứ nguyên m_1, m_2 .

Tiêu chuẩn tối ưu của hệ thường là một hàm số mô tả sự phụ thuộc các biến trạng thái và biến điều khiển. Trong trường hợp chung phương trình có dạng:

$$F(x, u) = \sum F^k(x^k, u^k) \quad (5.14)$$

Trong đó: F^k – phần tiêu chuẩn của bloc k.

Nhiệm vụ tổng hợp là cực tiểu hoá hàm số F:

$$\left. \begin{aligned}\psi(x, u) &= 0 \\ h(x, u) &\leq 0\end{aligned}\right\} \quad (5.15)$$

với quan hệ từ (5.9) đến (5.12).

5.6.2. Phân tích các cách tiếp cận giải bài toán tổng hợp

Các cách tiếp cận giải bài toán tổng hợp: Phân tích bài toán tìm sơ đồ công nghệ tối ưu (5.9) đến (5.12) với việc sử dụng nguyên tắc giả thiết tích phân, chỉ ra rằng, đó là một bài toán tối ưu hoá liên tục – gián đoạn hỗn hợp.

Tồn tại hai cách tiếp cận giải bài toán mà thực chất nó là biến tính của phương pháp xếp chồng. Thực chất của phương pháp là bài toán ban đầu được thay thế bằng bài toán tổng quát hơn. Khi đó, lời giải của bài toán tổng quát cũng là lời giải của bài toán ban đầu. Trên cơ sở của nguyên tắc đó xây dựng phương pháp quy hoạch động. Trong một loạt công trình người ta đã đề cập vấn đề giải bài toán tổng hợp tối ưu hệ xử lý nước thải bằng biện pháp sinh học với việc sử dụng phương pháp quy hoạch động.

Theo cách tiếp cận thứ nhất, từ siêu cấu trúc tuần tự cho sinh ra (chia nhỏ) những sơ đồ hữu hạn nào đó, tối ưu hoá chúng theo các tham số liên tục u . Trong trường hợp này, bài toán tổng hợp được viết dưới dạng:

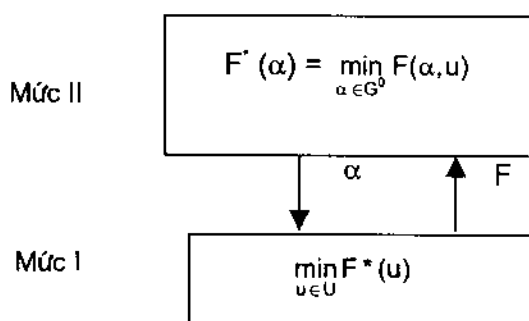
$$\min_{\alpha \in G^0, \epsilon \in U} \min F(\alpha, u)$$

Bài toán này có thể được coi như bài toán hai mức (hình 5.16), mức trên là tối ưu hoá gián đoạn cấu trúc của sơ đồ, mức dưới – tối ưu hoá thông số thiết bị theo cấu trúc. Do phải lần lượt chọn các phương án nên phải tính toán nhiều và việc giải bài toán chỉ có thể thực hiện được với số lượng phương án không lớn của sơ đồ.

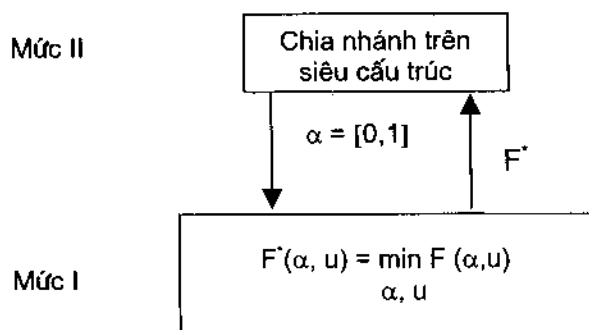
Theo cách tiếp cận thứ hai giải bài toán được thực hiện trong sự thay đổi đồng thời cả các thông số gián đoạn và liên tục. Bài toán trong trường hợp này có thể viết dưới dạng:

$$\min_{\alpha \in G^0, \epsilon \in U} F(\alpha, u)$$

Phương pháp này được gọi là "phương pháp thông số cấu trúc", đề xuất sự thay thế bài toán tổng hợp gián đoạn thành bài toán liên tục bằng cách bỏ ràng buộc của các thông số cấu trúc gián đoạn cần tìm. Lời giải nhận được bằng quy hoạch tuyến tính, các thông số cấu trúc làm tròn bằng 0 hoặc 1. Để làm tròn các thông số không nằm gần các giá trị đó, sử dụng các lập luận công nghệ hoặc kỹ thuật. Nhưng các chỉ định như vậy không phải là thường xuyên. Cần phải chú ý rằng, các thông số đã tìm được bằng làm tròn đơn giản không đủ đảm bảo cho tính tối ưu của lời giải.



Hình 5.16. Quá trình tổng hợp hai mức theo cách tiếp cận thứ nhất



Hình 5.17. Quá trình tổng hợp hai mức theo cách tiếp cận thứ hai

Một biến dạng của phương pháp thông số cấu trúc đã được G. Ôxt rôpxki đưa ra. Cơ sở của phương pháp là ứng dụng đồng thời phương pháp thông số cấu trúc với phương pháp nhánh và biên. Chia nhánh trong siêu cấu trúc, đồng thời tối ưu hoá theo biến cấu trúc và các biến điều khiển cho phép đánh giá biên trên, biên dưới và bỏ đi hướng của các nhánh không hiệu quả.

Để giải bài toán (hình 5.17) có thể sử dụng phương pháp hai mức. Ở mức trên thực hiện chia nhánh trên siêu cấu trúc theo một số thông số cấu trúc nào đó, nó sẽ có các giá trị gián đoạn, ở mức dưới – tối ưu hoá theo biến cấu trúc điều khiển liên tục, nó cho phép đánh giá tính hữu hiệu của nhánh nhận được theo biên trên và biên dưới.

5.6.2.1. Cách tiếp cận giải bài toán tối ưu

Để đánh giá tính tối ưu của hệ thống được tổng hợp ta tiến hành tối ưu hoá thông số với việc ứng dụng các phương pháp quy hoạch phi tuyến.

Bài toán tối ưu hoá các quá trình công nghệ hoá học tương đương với bài toán tối ưu hoá một hàm mục tiêu nào đó (tiêu chuẩn tối ưu).

$$\min_u F(u)$$

với các ràng buộc:

$$\Psi_i(x^k, u^k) = 0; \quad i = \overline{1, m_1}$$

$$h_j(x^k, u^k) \leq 0; \quad j = \overline{1, m_2}$$

Trong đó, u là vectơ các biến cần tìm có kích thước r .

Trong công trình của Ôxt rôpxki có một số đặc điểm của việc tính tiêu chuẩn tối ưu hệ công nghệ hoá học như sau:

1. Việc tính hàm số dẫn đến tính chế độ ổn định của hệ công nghệ hoá học ở những giá trị cố định của các thông số biến thiên.

2. Sự có mặt trong sơ đồ thiết bị với các tham số phân bố (các lò phản ứng xúc tác với lớp xúc tác cố định hoặc tầng sôi) dẫn đến việc tích phân hoá hệ phương trình vi phân thường khi tính toán các thiết bị như vậy.

3. Trong hệ công nghệ hoá học thường có những thiết bị (thiết bị với cánh khuấy, tháp tinh luyện, tháp trích li...) mà tính toán chúng phải thực hiện quá trình lặp công kênh.

4. Sự có mặt trong sơ đồ các dòng tuần hoàn, các liên hệ ngược về nhiệt dẫn đến việc khi lập các phương trình cân bằng vật liệu và cân bằng nhiệt phải thực hiện quá trình lặp trên mức tính hệ công nghệ hoá học.

5. Hệ có thể được đặc trưng bởi hàng trăm biến pha và hàng chục biến điều khiển.

Như vậy, bài toán tối ưu hoá hệ công nghệ rất phức tạp, kích thước lớn, đòi hỏi số lượng tính toán rất lớn, ngay cả khi tính toán giá trị tiêu chuẩn tối ưu. Để giải những bài toán tối ưu thực tế trong một thời hạn nhất định, cần phải sử dụng những phương pháp tính toán hiệu quả nhất.

Một trong những hướng giải bài toán có ràng buộc (cực tiểu hoá có điều kiện) là đưa nó về một chuỗi bài toán không ràng buộc (cực tiểu hoá không điều kiện) nhờ sự trợ giúp của các phương pháp khác nhau, lập nên hàm mục tiêu trợ giúp – tiêu chuẩn cải tiến. Việc đưa bài toán cực tiểu hoá tổng thể thành những bài toán cực tiểu hoá nối tiếp không điều kiện là hợp lý vì để giải bài toán cực trị không điều kiện đã có các phương pháp khá hiệu quả và nhanh chóng.

Đại đa số các phương pháp cực tiểu hoá không điều kiện bắt buộc phải xây dựng chuỗi (p^j) $j = 0, 1, \dots$ hướng chuyển động đến cực tiểu của hàm $F(u)$. Sự khác nhau cơ bản giữa phương pháp này với phương pháp khác là khả năng định hướng. Trong trường hợp chung nhất vector hướng p^j là hàm số của điểm u^j , các điểm trước đó ($N \leq N$), các vector gradient $g^j, g^{j-1}, \dots$ hàm cực tiểu F , ma trận $F(x, u)$, vi phân bậc hai của nó, được tính toán tại điểm $u^j, u^j \rightarrow 1, \dots$ Như vậy:

$$p^j = p^j(u^j, u^{j-1}, \dots, g^j, g^{j-1}, \dots, G^j, G^{j-1})$$

Tuỳ thuộc vào bậc cao nhất của đạo hàm có trong biểu thức tính vector hướng mà có các thuật toán cực tiểu hoá tương ứng phương pháp bậc không, bậc một, bậc hai...

Kinh nghiệm ở Nga và quốc tế chỉ ra rằng, thuận tiện nhất là ứng dụng phương pháp bậc một và bậc hai trong tất cả các trường hợp khi điều đó có thể.

Phương pháp cổ điển Niuton tương ứng với việc chọn ma trận đảo Jacobian $H^i = (G^i)^{-1}$. Nhược điểm cơ bản của phương pháp Niuton – sử dụng đạo hàm bậc hai của hàm cực tiểu mà trong thực tế lập được nó là vô cùng khó khăn.

Nhược điểm đó có thể loại bỏ, không cần tính ma trận Hesse, trong khi lợi dụng tính chất của hàm cực tiểu. Sử dụng việc tìm kiếm hướng liên hợp cho phép đưa bài toán cực tiểu hoá hàm bậc hai sau r bước, sau bước thứ r tìm ma trận, nghịch đảo ma trận Hesse.

Người ta đã tìm ra một loạt các hệ thức làm chính xác được ma trận Hesse trên từng bước cực tiểu hoá. Các giá trị thực nghiệm được thực hiện trên mô hình và các bài toán đã chỉ rằng, hiệu quả nhất (số tính toán nhỏ nhất của hàm cực tiểu) là thuật toán Broyden–Phletcher–Goldfarb–Shanno (BFGS):

$$G^{i+1} = G^i + \left(1 + \frac{y^{iT} G^i y^i}{s^{iT} y^i} \right) \frac{s^i s^{iT}}{s^{iT} y^i} - \frac{s^i y^{iT} G^i + G^i y^i s^{iT}}{s^{iT} y^i}$$

Trong đó: G^i – ước lượng của ma trận nghịch đảo của ma trận Hesse nhận được ở bước i ;

$$s^i = u^{i+1} - u^i = \alpha^i p^i; y^i = g^{i+1} - g^i.$$

Nhóm phương pháp số hiệu quả cực tiểu hoá không điều kiện liên tiếp đảm bảo tốc độ hội tụ bậc hai và cấp số nhân đã được tạo nên trên cơ sở sử dụng hàm Lagrange cải tiến. Nó cho phép giải nhiều bài toán thực tế đủ nhanh và đủ độ chính xác.

Tiêu chuẩn cải tiến được thiết lập bởi việc đưa thêm vào hàm số Lagrange các số hạng phạt, thường có dạng:

$$F(u, l, r) = F(u) + \sum_{i=1}^{m_1} \mu_i \psi_i(u) + \sum_{j=1}^{m_2} \nu_j h_j(u) + \sum_{i=1}^{m_1} \gamma_i \psi_i^2(u) + \sum_{j=1}^{m_2} \beta_j \theta_j(h_j(u))$$

Trong đó:

$\lambda = \{\mu_i, \nu_i\}$ – tập hợp các thừa số Lagrange;

$\tau = \{\gamma_i, \beta_i\}$ – tập hợp các hệ số phạt; $\theta_j = 0$ nếu $h_j(u) \leq 0$ và $\theta_j = h^2$ nếu $h_j(u) > 0$.

Những nghiên cứu lí thuyết đã chỉ ra rằng, sự hội tụ của phương pháp với tốc độ cấp số nhân, mà mẫu số có thể nhận là vô cùng bé bởi vì hệ số phạt là rất lớn.

5.6.2.2. Các cách tiếp cận giải bài toán tính chế độ ổn định

Trên từng bước tối ưu hoá để đánh giá tiêu chuẩn tối ưu và các ràng buộc cần thực hiện nhiều lần tính cân bằng nhiệt, cân bằng vật liệu của hệ công nghệ. Bài toán đó thường được gọi là tính chế độ ổn định của hệ công nghệ hoá học, bao gồm xác định toàn bộ các biến x^k ($k = \overline{1, N}$), từ phương trình (5.9) đến (5.11). Viết lại phương trình (5.10) có áp dụng (5.9):

$$x^k = \sum \varphi^j (x^j u^j) \alpha_{kj} = 0; \quad k = \overline{1, N} \quad (5.16)$$

Do mô hình bloc (5.9) trong trường hợp chung được mô tả bằng các phương trình phi tuyến nên bài toán tính hệ công nghệ hoá học là giải hệ phương trình phi tuyến (5.9) – (5.11) mà tương đương là hệ (5.16).

Hệ phương trình (5.16) có thể viết dưới dạng:

$$f(x, u) \equiv x - \varphi(x, u) = 0 \quad (5.17)$$

Trong đó: x – vectơ các biến đầu vào tất cả các bloc;

u – vectơ các biến điều khiển của tất cả các bloc;

φ – vectơ hàm tối ưu.

Tính phức tạp của mô tả toán học các thiết bị của hệ công nghệ hoá học, trong đó có các mô hình với các tham số phân bố, tập trung, các dòng tuần hoàn nhiệt và vật liệu, đòi hỏi cao về độ hội tụ, cũng như tính bền vững của phương pháp tính toán.

Các phương pháp tính toán hệ được chia thành hai nhóm lớn: phương pháp mô đun và phương pháp định hướng theo các phương trình. Phương pháp mô đun là phương pháp phổ cập hơn cả. Hiện tại phương pháp mô đun định hướng liên tiếp là phương pháp phổ biến nhất.

Trước tiên nó đòi hỏi xác định thứ tự tính toán các thiết bị trong dây chuyền. Trong sơ đồ có các tổ hợp thiết bị với các mối liên hệ ngược. Sự tối ưu được xác định bên trong từng tổ hợp theo một tiêu chuẩn nào đó, tổ hợp các biến, có nghĩa là mô hình toán (5.17) phân thành các hệ nhỏ độc lập có kích thước nhỏ hơn, mỗi một trong đó có thể coi như không phụ thuộc nhau nếu như giải tuần tự. Bài toán có thể giải bằng thuật toán phân tích cấu trúc, cho phép xác định tập hợp các dòng đầu vào mà cắt nó ra thì hệ thành hệ mở. Tổng kích thước vector các biến của các dòng này thoả mãn điều kiện: $\overline{m} \leq m \leq M$, trong đó $\overline{m}$ tổng kích thước nhỏ nhất có thể của dòng gián đoạn khi hệ trở thành hệ mở. Tính toán hệ như vậy là giải hệ m phương trình phi tuyến theo m ẩn số là các phần tử của vector:

$$f(x) \equiv x - \varphi(x) = 0 \quad (5.18)$$

Trong đó:

x – vector dòng ngắt đoạn có kích thước m ;

f, φ – vector hàm có kích thước m .

Tiêu chuẩn để chọn các biến thường được áp dụng:

- 1) Số dòng ngắt đoạn (không liên tục) nhỏ nhất.
- 2) Tính tham số tổng của dòng ngắt đoạn là nhỏ nhất.
- 3) Bán kính nhỏ nhất của phổ các giá trị riêng của ma trận đạo hàm riêng hệ phương trình.

Trong thực tế thường gặp tiêu chuẩn loại một và loại hai trong số ba tiêu chuẩn trên. Tiêu chuẩn loại hai đáp ứng kích thước nhỏ nhất của hệ phương trình. Theo nguyên tắc trong các chương trình mô hình hoá tính tham số của tất cả các dòng trong hệ công nghệ đều giống nhau, như vậy tiêu chuẩn để chọn biến là tiêu chuẩn thứ nhất – số dòng ngắt đoạn nhỏ nhất.

Thông thường quá trình lập giải hệ (5.18) sẽ theo công thức:

$$\begin{aligned} y^i &\cong \varphi(x^i) \\ x^{i+1} &= x^i + G(y^i - x^i) \end{aligned}$$

Trong đó:

i – số thứ tự phép lặp;

y – vector kích thước m ;

G – ma trận gia tốc kích thước $m \times m$.

Phương pháp lặp đơn giản là phương pháp đơn giản nhất trên thực tế. Tồn tại một số phương pháp tăng tốc độ hội tụ của phương pháp lặp đơn giản. Tất cả chúng được xây dựng trên cơ sở giả thiết vùng gần nghiệm của hệ có thể được tuyến tính hoá. Trong phương pháp Niuton và phương pháp tựa Niuton, sự gần đúng nối tiếp tính theo công thức:

$$x^{i+1} = x^i + t^i p^i \quad (5.19)$$

Trong đó:

p^i – vectơ thứ nguyên m xác định hướng chuyển động từ điểm x^i

t^i – đại lượng vô hướng xác định độ dài bước theo hướng p^i

Vectơ p^i xác định theo công thức:

$$p^i = - (J^i)^{-1} f(x^i) \quad (5.20)$$

Trong đó: J^i – ma trận Jacobian của hàm vectơ $f(x^i)$ hệ (5.18), kích thước $m \times m$.

Trong phương pháp Niuton trên, mỗi phép lặp cần so sánh sai số và nghịch đảo ma trận Jacobian, như vậy cần tính toán nhiều lần hệ mở và vì thế nó ít được sử dụng trong thực tế.

Ý tưởng các phương pháp tựa Niuton (phương pháp Niuton cải tiến) lần đầu tiên được giới thiệu trong công trình Broyden, trong đó ma trận Jacobian hay ma trận nghịch đảo của nó H^i được tính theo phương pháp sai phân trên hướng đầu tiên, còn sau đó chỉ cần chính xác nó theo thông tin đã nhận được ở các bước trước đó của phép lặp:

$$H^{i+1} = H^i + \frac{(S^i - H^i y^i) S^{iT} H^i}{S^{iT} H^i y^i} \quad (5.21)$$

$$y^i = f(x^{i+1}) - f(x^i), S^i = x^{i+1} - x^i$$

Trong số tập hợp các phương pháp Niuton cải tiến có sử dụng các biểu thức để xác định ma trận Jacobian hoặc đảo ngược của nó có phương pháp Niuton cải tiến đề xuất bởi Ôxtropxky có tính chất $(m+1)$ kết thúc tuyến tính.

Trong phương pháp tựa Niuton (Niuton cải tiến) để chính xác hoá ma trận H^{i+1} các hệ thức sau được sử dụng:

$$H^{i+1} = H^i + \frac{(s^i - H^i y^i) c^{iT} E^i}{c^{iT} E^i y^i}, H^0 = R_m \quad (5.22)$$

$$E^{i+1} = E^i + \frac{E^i y^i c^{iT} E^i}{c^{iT} E^i y^i}, \quad E^0 = I_m \quad (5.23)$$

Trong đó:

R_m – ma trận bất kì kích thước $m \times m$;

c^i – vectơ các hằng số bất kì kích thước m .

Các phương pháp tựa Newton là phương tiện hiệu quả để giải bài toán tính chế độ ổn định và được sử dụng rộng rãi trong thực tế. Một trong những nhược điểm cơ bản của chúng là cần phải có những thông tin ban đầu chính xác, bởi trong trường hợp này tốc độ hội tụ là cực nhanh.

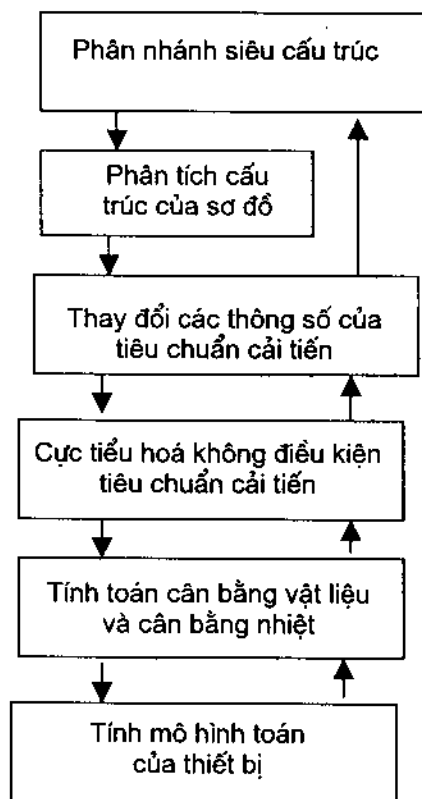
Cần chú ý rằng, hiệu quả và sự hội tụ của mỗi phương pháp phụ thuộc vào tính chất của bài toán. Với mục đích tiết kiệm thời gian trong mô hình hoá toán học các sơ đồ công nghệ phải có sự lựa chọn sơ bộ phương pháp hiệu quả nhất.

5.6.3. Quá trình đa mức giải bài toán tổng hợp

Việc phân tích các phương pháp tổng hợp, tối ưu hoá và tính toán các hệ công nghệ sinh học đã chỉ ra rằng, khi sử dụng siêu cấu trúc để đánh giá tính tối ưu của các hệ ta sử dụng các phương pháp quy hoạch phi tuyến, trong trường hợp riêng đó là cực tiểu hoá không điều kiện liên tiếp. Trên từng bước tối ưu hoá để đánh giá tiêu chuẩn tối ưu ta tiến hành tính chế độ ổn định của hệ công nghệ, trong trường hợp chung nhất đó là hệ phương trình phi tuyến. Sử dụng phương pháp môđun liên tiếp để tính toán chế độ ổn định cần phải tiến hành phân tích cấu trúc có nghĩa là chọn các dòng đặc biệt mà khi ngắt dòng thì đưa hệ kín thành hệ mở và xác định thứ tự tính toán thiết bị. Trong tính toán chế độ ổn định thực hiện tính toán nhiều lần mô hình toán từng thiết bị của hệ.

Rõ ràng là những phương pháp tổng hợp tối ưu dựa trên quan điểm tích phân giả thiết là một *quá trình tính toán đa mức*, như vậy quá trình tính toán có các đặc điểm sau đây:

- Có lớn hơn một mức (số mức được đánh từ dưới lên);
- Từng mức một có quá trình lặp của nó;
- Trên từng bước lặp i của mức l thực hiện phép lặp đầy đủ của mức $(l - 1)$.



Hình 5.18. Quá trình đa mức giải bài toán tổng hợp

Như vậy, phương pháp tổng hợp bao gồm các mức sau (hình 5.18): Mức không là tính toán từng thiết bị riêng rẽ của hệ; mức một là tính toán chế độ ổn định; mức hai là tối ưu hoá không điều kiện tiêu chuẩn cải tiến; mức ba là thay đổi các thông số của tiêu chuẩn cải tiến; mức bốn là phân tích cấu trúc sơ đồ; mức năm là phân nhánh siêu cấu trúc.

Các mức để giải bài toán trên – đó là thủ tục kiểu "vòng trong vòng" trong đó vòng ngoài là bậc năm, vòng trong bậc không.

Trên mỗi mức có thể sử dụng các phương pháp hiệu quả mà chúng ta đã xem xét ở trên.

Mặc dù phương pháp đa mức được xem là hiện đại nhất nhưng nhìn chung vẫn chưa hoàn toàn hiệu quả. Thuật toán của tất cả các mức cần phải tuyệt đối phù hợp với nhau và được xem như là một thuật toán duy nhất. Đánh giá hiệu quả của thuật toán từng mức cần thực hiện từ thuật toán chung đồng bộ.

5.6.4. Xây dựng phương pháp tổng hợp

Trước hết ta so sánh hai cách tiếp cận tổng hợp hệ công nghệ sinh học tùy thuộc vào các thông số cấu trúc, sau đó đề xuất phương pháp sử dụng cả hai loại thông số cấu trúc.

5.6.4.1. Tổng hợp với việc sử dụng các thông số cấu trúc loại một

Viết lại bài toán tổng hợp (5.9) – (5.12), (5.14), (5.15), trong đó có sử dụng các thông số cấu trúc loại một ở dạng sau:

$$\min_{u^k, \alpha_k} \sum_{k=1}^N F^k(x^k, u^k, y^k) \quad (5.24)$$

$$M = \sum_{k=1}^N m_k \quad (5.25)$$

$$\sum_{k=1}^N \alpha_{jk} = 1 \quad (5.26)$$

$$y^k = \varphi^k(x^k u^k) \quad (5.27)$$

$$h^k(x^k u^k) \leq 0 \quad (5.28)$$

$$0 \leq \alpha_{jk} \leq 1; \quad j = \overline{1, N}; \quad k = \overline{1, N} \quad (5.29)$$

Phương trình (5.24) và (5.25) tương ứng là các phương trình cân bằng vật liệu của cơ cấu trộn và cơ cấu phân chia dòng, các điều kiện (5.28) – ràng buộc thiết kế.

Các biến cần tìm là các thông số cấu trúc α_{jk} , $j = \overline{1, N}$, $k = \overline{1, N}$ và biến điều khiển u^k . Số lượng của chúng bằng $N^2 + R$, $R = \sum_{k=1}^N r^k$. Trong đó, các biến x^k , y^k , $k = \overline{1, N}$, $j = \overline{1, N}$ là các biến phụ thuộc, được xác định bằng cách giải hệ phương trình phi tuyến (5.25) – (5.27) trong khi cố định các biến u^k , α_{jk} .

Về hình thức phương pháp này đưa bài toán tổng hợp hệ công nghệ hoá học trở thành bài toán quy hoạch phi tuyến. Như vậy, sẽ có một loạt khó khăn, nó sẽ ảnh hưởng đến việc sử dụng phương pháp.

1. Trong một số trường hợp một vài thông số cấu trúc trở thành các biến nhị phân. Ví dụ, thông số cấu trúc α_{jk} trở thành biến nhị phân nếu với dòng

liên kết bloc k và bloc j, cần phải giải quyết vấn đề nó có cần trong sơ đồ hay không. Trong trường hợp đó bài toán sẽ là tối ưu hoá liên tục – gián đoạn phi tuyến. Nhưng nếu số lượng thông số như thế quá lớn sẽ dẫn đến chi phí quá nhiều cho tính toán.

2. Phương pháp đã chọn không loại bỏ các biến cần tìm α_{jk} ($j = \overline{1, N}$) trong trường hợp kích thước đặc trưng bloc k là $u^k = 0$.

3. Khi sử dụng các thông số cấu trúc loại một khó đưa vào bài toán các quy tắc oristic được định hình hợp lí.

4. Trong một số trường hợp bài toán quy hoạch phi tuyến là bài toán nhiều cực trị. Sử dụng các phương pháp tối ưu hoá toàn bộ ít hiệu quả bởi vì kích thước lớn và xác suất có nhiều cực tiểu cục bộ. Hiệu quả hơn là tìm nguyên nhân đa cực trị và xây dựng phương pháp trên cơ sở đó. Một trong những nguyên nhân của tính đa cực trị là có những thành phần song tuyến tính trong khi dựng bài toán (5.25). Nguyên nhân thứ hai – đó là khả năng có nhiều cực trị của tiêu chuẩn (5.24). Thường thì tắc tiêu chuẩn là tổng chi phí và $F^k = G^k - H^k$ – phần tiêu chuẩn liên quan tới bloc k; G^k, H^k – chi phí cơ bản và công nghệ của bloc k, phần G^k có dạng:

$$G^k = c (u_j^k)^b, \quad b \leq 1 \quad (5.30)$$

Trong đó, u_j^k là kích thước đặc trưng bloc k, b là số mũ.

Nói chung các thông số c, b và chỉ số l phải phụ thuộc vào bloc nhưng để đơn giản chúng ta bỏ qua sự phụ thuộc vào k. Khi $b < 1$ – hàm số lõm và tiêu chuẩn (5.24) có nhiều cực trị. Nguyên nhân thứ ba – giá trị vô cùng của đạo hàm số đầu tư cố định ở điểm ban đầu.

Ta sẽ chứng minh sự tồn tại nhiều cực trị của bài toán tổng hợp:

Giả sử, ta có bài toán:

$$\begin{aligned} \min_{x_1, x_2, \dots, x_n} f(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ F(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq 0 \\ x_i \geq 0 \end{aligned} \quad (5.31)$$

Khi $x_1 = 0$ và với giá trị bất kì của biến $x_2, \dots, x_i$ ta có bất đẳng thức:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x_1} \right|_{x_1=0} \geq 0 \quad (5.32)$$

Ta xét bài toán:

$$\begin{aligned} \min_{x_2, x_3, \dots, x_n} f(0, x_2, \dots, x_n) \\ F(0, x_2, \dots, x_n) \leq 0 \end{aligned} \quad (5.33)$$

Giả sử, bài toán (5.33) có nghiệm và điểm $\bar{x}^* (0, x_2^*, \dots, x_n^*)$ là điểm cực tiểu. Ta cần chứng minh đó là điểm cực tiểu của bài toán (5.31).

Rõ ràng điều kiện cần để tại một điểm có cực tiểu cục bộ bài toán (5.31) là:

$$\frac{\partial f}{\partial l} \Big|_{x=x^0} \geq 0; \quad \forall l \in L(x^0) \quad (5.34)$$

Trong đó: l – vector đơn vị;

$L(x_0)$ – tập hợp các vector giả định tại điểm x_1 .

Nếu x_0 nằm trong các mặt $F_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0; i = i_1, \dots, i_p$ thì $L(x_0)$ có dạng:

$$L(x_0) = \{ l \mid l \text{ grad} \varphi_i \} \leq 0; \varphi(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0; i = i_1, \dots, i_p \quad (5.35)$$

Nếu x^0 là điểm trong vùng cho phép (5.31) thì $L(x^0)$ sẽ là tập hợp tất cả vector đơn vị với điểm bất đầu x^0 .

Ta viết biểu thức đạo hàm theo hướng trong không gian $x_1, x_2, \dots, x_n$ tại điểm $(0, x_2^*, \dots, x_n^*)$, $\partial f / \partial l = l_1 \partial f / \partial x_1 + \sum l_i \partial f / \partial x_i$ rõ ràng là

$\sum l_i \partial f / \partial x_i = \partial f / \partial l$, từ đây thay vào (5.34) ta nhận được:

$$\sum_{i=2}^n \frac{\partial f}{\partial x_i} \geq 0 \quad (5.36)$$

Như vậy cần phải thực hiện điều kiện $x_1 \geq 0$, tương ứng với (5.35) ta nhận được:

$$L_1 = (l, e_1) \geq 0 \quad (5.37)$$

Tính toán (5.32), (5.36), (5.37), tại điểm $(0, x_2^*, \dots, x_n^*)$ thực hiện điều kiện (5.34), đó là điểm cực tiểu của bài toán (5.31).

Cũng tương tự như vậy có thể chỉ ra rằng, nếu bài toán (5.24) – (5.29) có nghiệm tại:

$$u_j^k = 0, k = k_1, \dots, k_p \quad (5.38)$$

Trong đó, $k_1, \dots, k_p$ số thứ tự một số bloc nào đó thì sẽ tồn tại một điểm cực tiểu cục bộ, mà tại đó thực hiện điều kiện (6.38). Tương ứng điểm cực tiểu cục bộ là sơ đồ không có các bloc với số thứ tự $k_1, \dots, k_p$.

Bằng cách đó, khi $b < 1$ bài toán xác định cấu trúc tối ưu là bài toán tìm điểm cực tiểu giữa một tập hợp nào đó các cực tiểu cục bộ, mà mỗi một trong đó tương ứng với một sơ đồ nào đó.

5.6.4.2. Tổng hợp với việc sử dụng các thông số cấu trúc loại hai

Bây giờ ta xem xét tổng hợp hệ công nghệ hoá học sử dụng các thông số cấu trúc nhóm hai. Kí hiệu y_j^k là phân cấu tử i dòng ra bloc k và vào bloc j . Rõ ràng biểu thức $y_{ji}^k = \alpha_{ji}^k y_j^k$, trong đó y_j^k là lượng cấu tử tại dòng ra bloc k . Các biến số cần tìm trong trường hợp này là y_j^k, x_j^k , các thông số cấu trúc δ_{ik} và các biến điều khiển u^k . Bài toán tổng hợp hệ công nghệ hoá học sẽ là bài toán tối ưu hoá liên tục – gián đoạn phi tuyến:

$$\min \sum_{k=1}^N F^k(x^k, y^k, u^k) \quad (5.39)$$

$$i^k = \sum_{l=1}^N y_{li}^k \quad (5.40)$$

$$y_i^k = \sum_{l=1}^N y_{li}^k \quad (5.41)$$

$$(y_{j1}^k + \dots + y_{jn}^k) y_i^k = (y_{i1}^k + \dots + y_{in}^k) y_{ji}^k \quad (5.42)$$

$$y_j^k = \varphi^k(x^k, u^k), h^k(x^k, u^k) \leq 0 \quad (5.43)$$

$$u^k \leq \delta_k \overline{u^k}, x_i^k \leq \delta_k \overline{x_i^k} \quad (5.44)$$

$$\delta_k = 0 \text{ hoặc } 1; k = \overline{1, N}, j = \overline{1, N}, i = \overline{1, N} \quad (5.45)$$

Phương trình (5.40), (5.41) là phương trình cân bằng vật liệu cơ cấu trộn và cơ cấu chia dòng bloc k . Phương trình (5.42) chỉ sự tương quan của cấu tử dòng trước và sau phân dòng trong dòng bất kì là như nhau. Phương trình 5.44 được đưa thêm vào nó cho phép thực hiện điều kiện $u^k = 0, x^k = 0$ khi $\delta_k = 0$. Trong trường hợp $y^k = 0$ và đưa vào bloc k $F_i^*(0, 0, 0)$ cũng bằng không. Đại lượng $\overline{x_i^k}, \overline{u^k}$ giới hạn trên đã biết của biến x_i^k, u^k .

Để tránh một trong những nguyên nhân đa cực trị của hàm G^k , ta biến đổi:

$$\overline{G}^k = y^k \delta^k + \beta^k u_l^k$$

$$u_l^k \leq u_l^k \delta_k; j = 1, r_k$$

Trong đó, các thông số γ^k, β^k lựa chọn từ điều kiện xấp xỉ tốt nhất của hàm G^k với $\overline{G}^k$.

Sử dụng các thông số cấu trúc δ_k cho phép một cách đơn giản hơn phương pháp một tính tới những điều kiện hợp lí khác nhau.

Thế thì trong các bài toán tổng hợp thường đòi hỏi chọn chỉ một bloc từ một vài bloc có thể. Giả sử, số thứ tự của các bloc đó là $j_1, j_2, \dots, j_k$ thì điều kiện này có thể viết dưới dạng:

$$\delta_{j_1} + \delta_{j_2} + \dots + \delta_{j_k} = 1$$

và bài toán tổng hợp (5.39) đến (5.45) cần thiết phải có thêm hệ thức đó.

Xét ví dụ chúng ta muốn sử dụng trong tổng hợp quy tắc: Nếu bể hiếu khí được sử dụng (số thứ tự là s) thì chọn bể lắng thứ cấp (số thứ tự q). Quy tắc đó có thể được mô hình hoá bởi bất đẳng thức:

$$\delta_s - \delta_q \leq 0$$

và phải được đưa vào trong bài toán tổng hợp.

Bây giờ ta dừng lại ở số lượng các biến cần tìm. Trước đây đã chỉ ra rằng, số lượng thông số cấu trúc δ_k bằng N. Như vậy, số biến gián đoạn trong trường hợp này bằng N. Ta tính số biến liên tục. Xét bloc k, dòng chuyển từ bloc k sang bloc j tương ứng với n biến y_{jk}^k . Tất cả số dòng đó là N. Ngoài ra, còn có n biến x_i^k liên quan với dòng vào. Từ đây, một bloc sẽ có tương ứng $(N + 1)n_i + r_k$ biến số, còn N bloc có $(N+1)N_n + R$ biến số. Như vậy, trong bài toán sẽ có N biến gián đoạn và $(N+1)N_n + R$ biến liên tục. Rõ ràng rằng, số biến liên tục trong trường hợp này tăng đáng kể. Một nhược điểm khác là tăng đáng kể số ràng buộc phi tuyến dạng đẳng thức. Trong khi đó ta đã biết thuận tiện nhất là chuyển sự phi tuyến vào tiêu chuẩn tối ưu hơn là vào các điều kiện ràng buộc.

Các phương pháp giải đã xem xét cho ta giả thiết về tính hiệu quả của việc sử dụng cả hai loại thông số cấu trúc.

5.6.4.3. Phương pháp thông số cấu trúc cải tiến

H. Zijatdinov đề nghị sử dụng cả hai loại thông số cấu trúc. Trước hết đưa vào một sự thay đổi trong phương pháp xây dựng sơ đồ tổng thể. Trong trường hợp này, giữa đầu ra của bloc k và cơ cấu chia dòng của nó đặt thêm một cơ cấu chia dòng phụ (hình 5.19), mà một phần dòng δ_k đưa trở lại thiết bị phân dòng đầu tiên, phần còn lại $(1-\delta_k)$ đi ra khỏi hệ.

Bài toán tổng hợp hệ công nghệ hoá học trong trường hợp này được phát biểu như sau:

$$F_0^0 = \min_{u^k, \alpha_k, \delta_k} \sum_{k=1}^N \delta_k F^k(x^k, u^k, y^{kk}) \quad (5.46)$$

$$x^k = \sum_{j=1}^N \alpha_{jk} \delta_k y^j \quad (5.47)$$

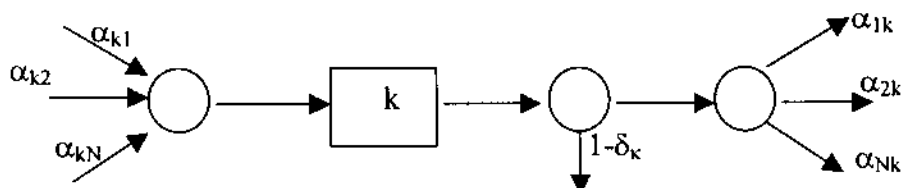
$$\sum_{j=1}^N \delta_k \alpha_{jk} = \delta_k \quad (5.48)$$

$$y^k = \varphi^k(x^k, u^k) \quad (5.49)$$

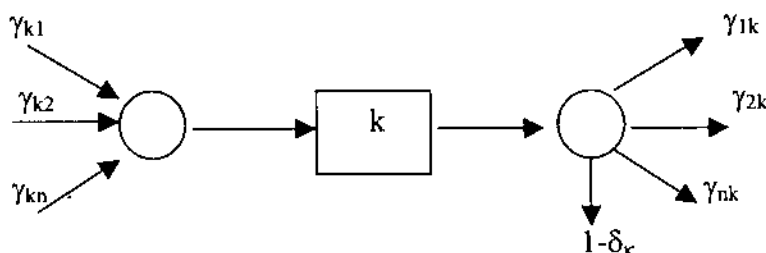
$$h^k(x^k, u^k) \leq 0 \quad (5.50)$$

$$0 \leq \alpha_{jk} \leq 1 \quad (5.51)$$

$$\delta_k = 0 \text{ hoặc } 1; k = 1, N \quad (5.52)$$



Hình 5.19. Sử dụng các thông số cấu trúc loại một và hai



Hình 5.20. Kết hợp thiết bị chia dòng khi sử dụng đồng thời thông số cấu trúc loại một và hai

Ở đây, phương trình (5.48) là phương trình cân bằng vật liệu thiết bị trộn của bloc k; (5.49) là phương trình cân bằng vật liệu hai thiết bị chia dòng liên kế bloc k. Chia cả hai vế (5.49) cho δ_k ta nhận được (5.27). Mặc dầu vậy chia cho δ_k là không được vì nó có thể bằng không. Sử dụng phép thay thế biến số $\gamma_{kj} = \alpha_{kj} \delta_k$ và kết hợp hai thiết bị phân dòng nối tiếp thành một (hình 5.20), khi đó bài toán có thể viết dưới dạng:

$$F_0^0 = \min_{u_k, \gamma_{kj}, \delta_k} \sum_{k=1}^N \delta_k F^k(x^k, u^k, y^k) \quad (5.53)$$

$$x^k = \sum_{j=1}^N \gamma_{kj} y^j \quad (5.54)$$

$$\sum_{j=1}^N \gamma_{jk} = \delta_k \quad (5.55)$$

$$y^k = \phi^k(x^k, u^k) \quad (5.56)$$

$$h^k(x^k, u^k) \leq 0 \quad (5.57)$$

$$0 \leq \gamma_{jk} \leq 1 \quad (5.58)$$

$$\delta_k = 0 \text{ hoặc } 1 \quad k = 1, N \quad (5.59)$$

Các thông số cấu trúc γ_{kj} khác các thông số cấu α_{ik} ở chỗ theo (5.55) có các hệ thống $\gamma_{kj} = 0, j = \overline{1, N}$ nếu $\delta_k = 0$. Từ đó nếu $\delta_k = 0$ thì tất cả các dòng ra của bloc k bằng không và thành phần của nó trong tiêu chuẩn cũng bằng không. Tiếp theo, cần lưu ý rằng có thể thêm ràng buộc sau:

$$\sum \gamma_{kj} \leq N \delta_k$$

Trong trường hợp này, nếu $\delta_k = 0$, thì $\gamma_{jk} = 0, j = \overline{1, N}$ và tất cả các dòng vào bloc k sẽ bằng không. Khi đó, các biến số liên tục cần tìm sẽ là $u_k, \gamma_{kj} (k = \overline{1, N}, j = \overline{1, N})$, các biến gián đoạn $\delta_k (k = \overline{1, N})$.

Những ưu điểm và nhược điểm của phương pháp này : So với phương pháp thứ hai số biến liên tục nhỏ hơn một cách đáng kể ($N^2 + R$) so với $[(N + 1) Nn + R]$. Đơn giản trong tính tới điều kiện hợp lí nhờ các thông

số cấu trúc δ_k cho nhiều ưu thế của phương pháp này so với phương pháp đầu tiên. Ngoài ra, việc đưa bloc k vào hệ được giải trên cơ sở giá trị 0 hoặc 1 của δ_k . Cùng lúc, trong phương pháp thứ nhất để bloc k không ở trong hệ cần phải chứng minh rằng, N biến số $\alpha_{jk} = 0, j = \overline{1, N}$.

Nhược điểm của phương pháp này cũng giống nhược điểm của hai phương pháp trên. Ở đây, có khả năng xuất hiện đa cực trị khi $b < 1$ giống như ở phương pháp một và do sự có mặt thành phần song tuyến giống như phương pháp hai.

Để giải bài toán (5.53) đến (5.59), ta sử dụng phương pháp phân nhánh và biên.

5.6.4.4. Thuật toán phân nhánh của phương pháp nhánh và biên

Ta sẽ mô tả ngắn gọn thủ tục của phương pháp phân nhánh và biên ứng dụng cho bài toán. Đó là một quá trình nhiều bước tương ứng mỗi bước là một đồ thị. Đồ thị tương ứng với bước k ta gọi đồ thị k . Quy tắc tính đồ thị $k + 1$ từ đồ thị k như sau:

Giữa tất cả các đỉnh treo của đồ thị k theo một quy tắc nào đó chọn ở một đỉnh, từ đó dựng $(N-k)$ đỉnh con. Khi đó, đồ thị $k+1$ được cấu tạo từ các đỉnh đồ thị k và $N-k$ đỉnh con. Các đỉnh của đồ thị được đánh dấu là A_i^j – chỉ số phía trên là bước, chỉ số dưới là đỉnh treo. Trên hình 5.21 biểu diễn đồ thị thứ tư ($N = 4$). Ở đây, đồ thị một cấu tạo từ một đỉnh A_1^1 , đồ thị hai cấu tạo từ đỉnh A_1^1 và các đỉnh con của nó $A_2^2, A_3^2, A_4^2, \dots$

Trong đó đỉnh A_i^1 tương ứng với sơ đồ tổng thể, mỗi một đỉnh A_i^2 ($i = \overline{1, 4}$) tương ứng với sơ đồ nhận được sau khi bỏ đi một trong những bloc, mỗi một đỉnh A_i^j ($i = 1, k_j$) tương ứng với hệ nhận được từ sơ đồ tổng thể bỏ đi một bloc nào đó. Việc thiếu bloc k nào đó trong sơ đồ tương ứng với thông số cấu trúc $\delta_k = 0$, thì mỗi một đỉnh A_i^j tương ứng với một tập của mình $S_i^j = (q_1^j \dots q_i^j)$ bằng không, các thông số cấu trúc $\delta_k = 0, k = q_1^j \dots q_i^j$.

Gọi K_i^j là tập hợp số thông số cấu trúc khác không tại đỉnh A_i^j :

$$K_i^j = \{k: k \in K, k \notin S_i^j\} \text{ trong đó } K = (1, N)$$

Phần sơ đồ tổng thể tương ứng với đỉnh A_i^j được gọi là sơ đồ tổng thể ij . Bài toán tối ưu hoá hệ ij có thể viết dưới dạng:

$$F_i^j \rightarrow F_i^j = \min_{u^k, \gamma_{kj}, \delta_k} \sum_{k \in K_i^j} \delta_k F^k(x^k, u^k, y^k) \quad (5.60)$$

$$x^k = \sum_{s \in K_i^j} \gamma_{ks} y^s \quad (5.61)$$

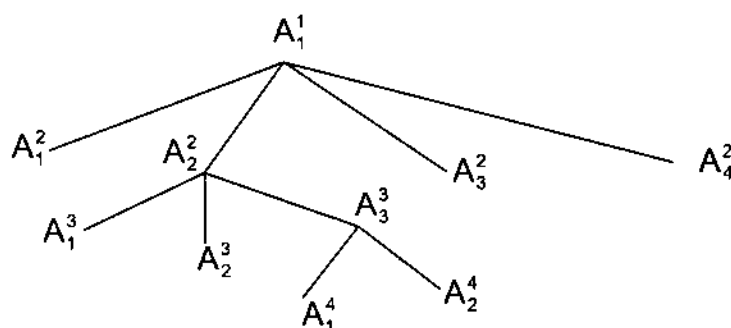
$$\sum_{s \in K_i^j} \gamma_{sk} = \delta_k \quad (5.62)$$

$$y^k = \varphi^k(x^k, u^k) \quad (5.63)$$

$$h^k(x^k, u^k) \leq 0 \quad (5.64)$$

$$0 \leq \gamma_{jk} \leq 1 \quad (5.65)$$

$$\delta_k = 0 \text{ hoặc } 1; k \in K_i^j \quad (5.66)$$



Hình 5.21. Đồ thị tương ứng với bước thứ ba (đồ thị thứ tư)

Bên cạnh bài toán (5.60) đến (5.66), ta xem xét thêm bài toán trong đó ràng buộc (5.66) thay thế bằng ràng buộc $0 \leq \delta_k \leq 1, k \in K_i^j$ (5.67)

Giá trị tối ưu của tiêu chuẩn trong bài toán (5.60) đến (5.65), (5.67) ta đặt là $\bar{F}_i^j$. Rõ ràng tồn tại mối quan hệ $\bar{F}_{ij} = F_i^j$.

Từ đây, bất cứ một đại lượng nào nhỏ hơn A_i^j sẽ được gọi là ước lượng dưới của đỉnh A_i^j . Tương ứng với (5.68) đại lượng p_i^j có thể lấy đại lượng đỉnh A_i^j . Đặt R là tập hợp tất cả các đỉnh tại bước j (cột j). Tại đồ thị mô tả trên hình 5.21 trong tập hợp tất cả các đỉnh treo R có các đỉnh $A_1^2, A_2^2, A_3^2, A_4^2, A_1^3, A_2^3, A_4^3, A_2^4$.

Giả sử, đã biết các ước lượng dưới tất cả các đỉnh treo tập R^j khi đó tại bước j , quá trình phân nhánh và biên được thực hiện như sau:

1. Trong số tập hợp các đỉnh nhận được tại bước j ta tìm đỉnh treo có giá trị nhỏ nhất. Ta gọi đỉnh đó là đỉnh của phần tựa tối ưu.

2. Trong đỉnh tựa tối ưu ta dựng $(N-j)$ đỉnh con. Phép tính này được gọi là phép phân nhánh.

3. Xác định giới hạn dưới của tất cả các đỉnh con của đỉnh tựa tối ưu.

Vì tồn tại tương quan (5.68) nên ước lượng dưới của đỉnh A_i^j có thể lấy đại lượng $\bar{F}_i^j$ nhận được từ lời giải bài toán (5.60) đến (5.65), (5.67).

4. Đối với tất cả các đỉnh con xác định giới hạn trên như sau: Giả sử, tại đỉnh A_i^j , đại lượng $u^*, \alpha_{kj}^*, \delta_k^*$ là lời giải bài toán (5.60) đến (5.65) (5.67). Giá trị mới của biến như sau:

$$r^j = \min_{A_i^j \in T^j} \bar{F}_i^j \quad (5.68)$$

Đặt đại lượng $\bar{\delta}_k$ vào bài toán (5.60) – (5.65), ta nhận được bài toán quy hoạch phi tuyến.

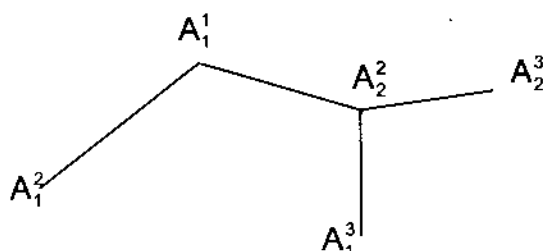
Kí hiệu $\bar{F}_k$ là giá trị tối ưu của tiêu chuẩn số trong bài toán này. Ta có quan hệ $\bar{F}_i^j \geq F_i^j$, như vậy giới hạn trên của đỉnh A_i^j có thể có đại lượng $\bar{F}_i^j$. Gọi T^j là tập hợp tất cả những đỉnh tựa tối ưu nhận được ở bước j và tất cả các bước trước đó. Trên đồ thị ở hình 5.22 tập hợp đó được cấu tạo từ các đỉnh A_1^1, A_2^2, A_3^3 . Khi đó, ước lượng trên r^j trong bước j xác định như sau:

$$r^j = \min_{A_i^j \in T^j} \bar{F}_i^j$$

5. Xác định các đỉnh không triển vọng. Giả thiết rằng, tồn tại bất đẳng thức $p_i^j > r^j$. Khi đó, rất dễ nhận thấy sơ đồ ij không chứa sơ đồ tối ưu. Như vậy, đỉnh này sẽ là đỉnh không triển vọng và nó sẽ được loại bỏ.

Khả năng có thể có một biến tính nào đó của quá trình tổng hợp mà trong đó đỉnh tựa tối ưu A_i^j cấu tạo chỉ từ hai đỉnh con. Trong đó, một đỉnh tương ứng với hệ ij không có bloc k . Trong đỉnh con thứ nhất một $\delta_k = 1$, còn trong đỉnh con thứ hai $\delta_k = 0$. Trong trường hợp này, bloc k được gọi là bloc nhánh tại đỉnh A_i^j . Còn lại các mô tả trên không thay đổi, chỉ cần đưa thêm quy tắc lựa chọn bloc nhánh ở đỉnh tựa tối ưu. Có thể có những quy tắc lựa

chọn khác nhau. Ví dụ, bloc nhánh cho các đỉnh con của đỉnh tựa tối ưu A_1^j có thể nhận theo thứ tự là các bloc ij trong hệ. Có thể có các phương pháp khác để lựa chọn bloc nhánh.



Hình 5.22. Đồ thị nhị phân

Cần chú ý rằng có thể sử dụng một cách tổng hợp các phương pháp phân nhánh – có một số đỉnh tựa tối ưu nào đó A_1^j có thể có hai đỉnh con, một số khác có $N-j$ đỉnh con.

5.6.5. Xây dựng cách tiếp cận, các phương pháp tối ưu hoá và tính hệ công nghệ sinh học

Vấn đề quan trọng trong tối ưu hoá hệ công nghệ là chọn được không gian biến số trong đó thực hiện việc tìm kiếm chế độ tối ưu. Thông thường, các biến số cần tìm là các biến số điều khiển trong thiết bị và biến số đầu vào của hệ. Nhưng trong một vài trường hợp, hình như việc sử dụng các biến trung gian thuận tiện hơn hoặc là tổ hợp biến điều khiển và biến trung gian. Người ta đã chỉ ra rằng, việc lựa chọn như vậy dẫn đến sơ đồ tính toán chứa ít các mối liên hệ ngược hơn. Chọn bên cạnh biến điều khiển các biến trung gian đưa sơ đồ về dạng mở, việc tính toán tiêu chuẩn tối ưu trở nên đơn giản vì chỉ cần tính toán một lần hệ mở. Nhưng các phương trình liên kết theo dòng bị ngắt được đưa ra ở dạng ràng buộc – đẳng thức, nên việc tìm điểm tối ưu sẽ phức tạp hơn.

Trong công trình của Zijatdinov xem xét sự ảnh hưởng của việc lựa chọn không gian các biến độc lập đến bài toán tối ưu hoá hệ công nghệ có chứa dòng tuần hoàn nhiệt. Kết quả đề xuất phương án cho phép tính toán tiêu chuẩn tối ưu và các ràng buộc mà không cần sử dụng phép lặp.

Bài toán tối ưu hoá hệ công nghệ có ba loại biến số: vào, ra và điều khiển x, y, u .

Khi hình thành bất kì một bài toán tối ưu hoá nào, một phần các biến phải được coi là biến độc lập (cần tìm). Các biến độc lập là các biến mà trong không gian của chúng thực hiện việc tìm kiếm giá trị nhỏ nhất tiêu chuẩn (5.14). Các biến phụ thuộc là các biến mà trong từng bước quá trình tối ưu hoá được xác định bởi hệ (5.9) đến (5.11) hoặc một phần của nó đối với giá trị các biến độc lập cho trước. Trong đó, phần hệ sử dụng để xác định biến phụ thuộc sẽ thoả mãn trên từng bước tối ưu hoá những phương trình của phần còn lại được coi là các ràng buộc đẳng thức và được tính bằng phương pháp cực tiểu hoá có điều kiện. Di chuyển từ hệ (5.9) đến (5.11) đến hệ (5.17) các biến y có thể bỏ và chỉ xác định chúng sau khi đã tìm được các biến x . Phương pháp giải bài toán tối ưu hoá phụ thuộc nhiều vào việc xác định biến nào là biến cần tìm, phương trình nào là phương trình thoả mãn trên từng bước tối ưu hoá và những ràng buộc đẳng thức nào tương ứng với bài toán cực trị có điều kiện. Ta sẽ xem xét một vài cách tiếp cận tiêu biểu để lựa chọn các biến số cần tìm.

Để đơn giản giả thiết rằng, trong bài toán tối ưu chỉ có một loại ràng buộc đẳng thức (5.13) và những ràng buộc của biến điều khiển có thể viết dưới dạng:

$$u \in D_1, D_1 = \{u: c \leq u \leq b\} \quad (5.69)$$

Trong đó : c, b là những vectơ đã cho nào đó kích thước r .

5.6.5.1. Lựa chọn các biến cần tìm

a) Tìm trong không gian các biến điều khiển

Ta chọn các biến u là những biến cần tìm, còn các biến x là biến phụ thuộc. Hệ thức (5.13) có thể xét tới theo hai cách:

Trong cách thứ nhất hệ thức 5.13 được coi như là các ràng buộc đẳng thức đối với u và được tính theo phương pháp cực tiểu hoá có điều kiện. Tối ưu hoá có thể được trình bày ở dạng bài toán 1:

$$\min_u F(x, u) \quad (5.70)$$

$$f(x, u) = 0$$

$$u \in D_2$$

$$D_2 = \{u: u \in D_1; \psi(x, u) = 0\} \quad (5.71)$$

Việc tìm kiếm được thực hiện trong không gian các biến u : Tại từng giá trị u cố định, các biến x được tìm từ hệ phương trình (5.70). Tại từng bước quá trình tối ưu hoá phương trình (5.70) là thoả mãn, còn với phương pháp cực tiểu hoá có điều kiện cần thiết phải tính đến các ràng buộc (5.71).

Trong cách thứ hai, việc xét các ràng buộc (5.13) được đưa vào số phương trình, sẽ được thực hiện trên từng bước tối ưu hoá. Số phương trình được thoả mãn bởi các biến u, x tăng lên đại lượng m , so với trường hợp thứ nhất. Số biến độc lập cũng tăng đúng đại lượng đó. Kí hiệu vector các biến ấy là $\bar{u}$, phần còn lại của các biến điều khiển lập vector biến độc lập $\bar{u}$. Tối ưu hoá có thể trình bày ở dạng bài toán 2:

$$\min_{\bar{u}} F(x, \bar{u}, \bar{u}) \quad (5.72)$$

$$\bar{f}(x, \bar{u}, \bar{u}) = 0 \quad (5.73)$$

$$\bar{\psi}(x, \bar{u}, \bar{u}) = 0 \quad (5.74)$$

$$u \in D_1$$

Các hàm vector $\bar{f}, \bar{\psi}$ khác (5.9), (5.13) ở chỗ vector u được chia thành hai vector $\bar{u}, \bar{u}$. Việc tìm kiếm được thực hiện trong không gian biến $\bar{u}$. Ở mỗi giá trị $\bar{u}$ cố định, các biến phụ thuộc $x, \bar{u}$ được tìm từ hệ phương trình (5.72), (5.73). Như vậy, chúng thoả mãn trên từng bước của quá trình tối ưu hoá, còn với phương pháp cực tiểu hoá có điều kiện chỉ xét tới những ràng buộc (5.74).

Đôi khi, lời giải hệ (5.70) gọi là tính toán sơ đồ theo mô hình còn lời giải hệ (5.72) và (5.73) là tính toán thiết kế sơ đồ.

b) Tìm trong không gian các biến điều khiển và một phần biến trạng thái

Biến cần tìm là các biến điều khiển u và một phần biến trạng thái x . Phần còn lại của biến x sẽ là biến phụ thuộc. Kí hiệu vector $\bar{x}$, mà các phần tử của nó là các biến trạng thái phụ thuộc; $\bar{x}$ - vector với các phần tử là các biến trạng thái độc lập. Ta viết lại hệ (5.17) ở dạng:

$$\bar{x} - \bar{\varphi}(\bar{x}, \bar{x}, u) = 0 \quad (5.75)$$

$$\bar{x} - \bar{\varphi}(\bar{x}, \bar{x}, u) = 0 \quad (5.76)$$

Trong đó:

$\bar{\varphi}$ – một phần của hàm – vectơ φ tương ứng các biến $\bar{x}$;

$\bar{\bar{\varphi}}$ – một phần của φ tương ứng các biến $\bar{\bar{x}}$.

Hệ phương trình (5.75) sẽ thoả mãn trên từng bước quá trình tối ưu hoá, còn các phương trình của hệ (5.76) được coi là các ràng buộc loại đẳng thức và được xét tới nó bằng phương pháp cực tiểu hoá có điều kiện. Quá trình tối ưu hoá được trình bày ở dạng *bài toán 3*:

$$\min_{u, \bar{x}} F(\bar{x}, \bar{\bar{x}}, u) \quad (5.77)$$

$$\bar{x} - \bar{\varphi}(\bar{x}, \bar{\bar{x}}, u) = 0$$

$$u, \bar{\bar{x}} \in D_3$$

$$D_3 = \{u, \bar{\bar{x}}; u \in D_1, \bar{\bar{\psi}}(\bar{x}, \bar{\bar{x}}, u) = 0; \bar{x} - \bar{\varphi}(\bar{x}, \bar{\bar{x}}, u) = 0\} \quad (5.78)$$

Cách ghi $\bar{\bar{\psi}}$ có nghĩa là chia vectơ x thành hai phần.

Việc tìm kiếm được thực hiện trong không gian biến $\bar{\bar{x}}, u$, ở mỗi một giá trị cố định u , $\bar{\bar{x}}$ các biến $\bar{x}$ được tìm trong hệ (5.77), còn ràng buộc (5.78) được thoả mãn bằng phương pháp cực tiểu hoá có điều kiện.

c) *Tìm trong không gian con của các biến điều khiển và các biến trạng thái*

Các biến cần tìm là một phần biến điều khiển và biến trạng thái. Các biến phụ thuộc là các phần còn lại của các biến điều khiển và biến trạng thái. Bài toán lựa chọn các biến độc lập có thể đưa thành bài toán thay thế các biến điều khiển và biến trạng thái. Thế thì biến độc lập của thiết bị k có thể là biến đầu ra của thiết bị đó, còn biến điều khiển trở thành biến phụ thuộc. Giải thích điều đó bằng ví dụ: Giả sử, trong hệ cần tối ưu hoá có thiết bị trao đổi nhiệt – máy làm lạnh, biến điều khiển sẽ là lưu lượng chất làm lạnh, còn nhiệt độ đầu ra là biến trạng thái. Trong cách tiếp cận đã mô tả đề xuất biến cần tìm là nhiệt độ đầu ra, còn lưu lượng chất làm lạnh là các biến phụ thuộc. Hơn nữa, theo mô hình thiết bị trao đổi nhiệt bao giờ cũng có thể tính được lưu lượng chất làm lạnh đảm bảo đạt được nhiệt độ mong muốn.

Trong cách tiếp cận này bài toán tối ưu có thể đưa về một trong ba bài toán trên.

5.6.5.2. Giới thiệu cách chọn biến cần tìm

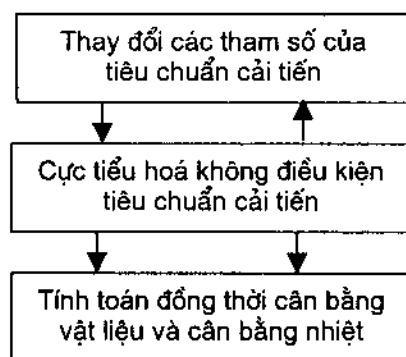
Việc chọn các biến cần tìm theo một trong ba cách tiếp cận trên đều có những ưu điểm và nhược điểm của nó.

Trong cách tiếp cận thứ nhất để tính tiêu chuẩn tối ưu cần phải giải hệ phương trình phi tuyến, việc này cho hệ kín là rất khó khăn. Thường là để thực hiện cần phải có giai đoạn phân tích cấu trúc nhằm nâng cao hiệu quả quá trình.

Trong bài toán một, số biến cần tìm bằng kích thước vector biến điều khiển. Hệ thức (5.13) được tính tới bằng các phương pháp cực tiểu hoá có điều kiện và quá trình tối ưu hoá là quá trình ba mức. Mức một là giải các phương trình cân bằng vật liệu và cân bằng nhiệt ở các giá trị cố định của biến cần tìm u ; trên mức thứ hai biến u thay đổi theo một phương pháp cực tiểu hoá nào đó; mức ba là sự thay đổi của các thông số của tiêu chuẩn cải tiến trong phương pháp cực tiểu hoá có điều kiện để thực hiện ràng buộc (5.13).

Khi không có ràng buộc (5.13) có thể sử dụng các phương pháp cực tiểu hoá có điều kiện cải tiến để tính các ràng buộc đơn giản nhất (5.70). Quá trình tối ưu hoá trong trường hợp này chỉ có hai mức: mức một và mức hai.

Trong bài toán hai, số biến cần tìm hơi nhỏ hơn so với trường hợp trước. Bởi vì, biểu thức (5.13) thực hiện trên từng bước cho nên có thể sử dụng các phương pháp cực tiểu hoá không điều kiện cải tiến để tính các ràng buộc đơn giản nhất (5.68). Quá trình tối ưu hoá trong trường hợp này là hai mức (hình 5.24). Tính toán tiêu chuẩn phức tạp hơn so với bài toán một, bởi vì cần phải giải hệ phương trình cân bằng vật liệu và nhiệt cùng với các phương trình ràng buộc dạng đẳng thức. Đồng thời nếu đưa thêm (5.13) và (5.17) làm giảm tốc độ hội tụ trên mức một, thì bài toán hai có lẽ hiệu quả hơn.



Hình 5.23. Quá trình tối ưu hoá ba mức



Hình 5.24. Quá trình tối ưu hoá hai mức

Cách thứ hai về cơ bản được sử dụng để tính tiêu chuẩn tối ưu không cần quá trình lặp, bằng việc lựa chọn các biến độc lập $\bar{x}^k$, $k = (p_1, \dots, p_q)$, kết quả là hệ mở, có nghĩa là hệ phương trình (5.77) cho phép tính toán không lặp. Số biến cần tìm sẽ tăng lên so với bài toán một. Xét tới ràng buộc (5.13) thực hiện bằng cực tiểu hoá có điều kiện.

Lựa chọn biến độc lập trong cách thứ ba tạo ra một số thuận lợi. Việc chọn biến của dòng trong tính toán cân bằng vật liệu và cân bằng nhiệt có thể làm giảm kích thước của hệ phương trình phi tuyến, đồng thời làm tăng tính ổn định trong quá trình lặp của hệ. Trong khi giải bài toán tối ưu hoá một và hai có thể xuất hiện trường hợp khi trên bước lặp nào đó không có lời giải cho một thiết bị lẻ. Khó khăn đó có thể loại bỏ nếu như biến cần tìm là các biến trạng thái nào đó với ràng buộc hai chiều tạo điều kiện thực tế vật lý cho quá trình. Xuất hiện khả năng tính toán một mức lặp dòng ra và dòng trung gian thoả mãn điều kiện biên. Một phần biến điều khiển trở thành phụ thuộc và đi vào tiêu chuẩn tối ưu hoá, có thể được tính toán sau khi hoàn chỉnh cân bằng vật liệu và cân bằng nhiệt, sẽ giảm đáng kể thời gian tính toán tiêu chuẩn tối ưu.

Xuất hiện một vấn đề trong các trường hợp nào sử dụng các cách trên là tốt nhất. Với kinh nghiệm thực tế cho phép đưa ra một số chỉ dẫn cho các trường hợp riêng biệt như sau:

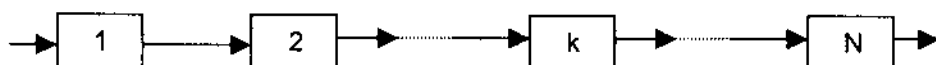
1) Nếu hệ mở và không có ràng buộc (5.13), tốt nhất là sử dụng cách tiếp cận một (bài toán một).

2) Nếu hệ mở và có tồn tại ràng buộc (5.13), cũng nên sử dụng phương pháp một.

3) Nếu hệ kín, đa số thiết bị có liên hệ ngược nên sử dụng phương pháp hai.

4) Trong mọi trường hợp nên tính đến khả năng thay thế các biến số.

Đương nhiên sử dụng một cách nào đó liên quan đến việc lựa chọn biến cần tìm thì lại xuất hiện bài toán lựa chọn tổ hợp tốt nhất các biến cần tìm. Bài toán này rất phức tạp, nó liên quan đến hình thành tiêu chuẩn cho phép đánh giá tổ hợp biến cần tìm trước khi giải bài toán tối ưu hoá. Do đó, cần phải có đánh giá gián tiếp, có quy tắc phát hiện và số liệu thực nghiệm. Ví dụ, ta xét tối ưu hoá các thiết bị nối tiếp như trên hình 5.25.



Hình 5.25. Các thiết bị mắc nối tiếp đơn giản

Giả sử, trong trường hợp này, $n_k = l_k = n$, ($k = 1, N$). Hệ thức liên kết (5.10) có dạng đơn giản:

$$x_i^k - y_i^{k-1} = 0; i = \overline{1, n}, k = \overline{2, N}$$

Các ràng buộc đẳng thức áp dụng cho các biến đầu ra của thiết bị N:

$$y_j^N - \alpha_j^N = 0; j = \overline{1, n}$$

Các ràng buộc bất đẳng thức không tồn tại.

Trong trường hợp đưa bài toán tối ưu hoá về bài toán một, khi mà các biến cần tìm sẽ là biến điều khiển của tất cả các thiết bị trong sơ đồ, ở mức hai ta phải giải bài toán sau:

$$\min_{u^k} \left[F + \sum_{j=1}^n \gamma_j \left(\gamma_j^N - \alpha_j^N \right)^2 \right], k = \overline{1, N}$$

Trong đó, γ_j^N được xác định bằng cách tính toán nối tiếp cho mọi thiết bị khi giá trị u^k , ($k = \overline{1, N}$).

Ta xem xét bài toán ba: Các biến cần tìm bên cạnh biến điều khiển u^k , ($k = \overline{1, N}$) còn có biến:

$$x_i^k; i = \overline{1, n}, k = (p_1, \dots, p_q) \quad (5.79)$$

Trên mức thứ hai bài toán sau được giải:

$$\min_{u^k, x^k} \left\{ F + \sum \gamma_j (\gamma_j^N - \alpha_j^N)^2 + \sum \sum \beta_i^k (x_i^k - y_i^k - 1) \right\}, s = p_1 \dots p_q, u^k, x^k$$

$$k = \overline{1, N} \quad (5.80)$$

Số các biến cần tìm bằng $m = rN + nq$. Giả sử, đạo hàm riêng được tính theo phương pháp sai phân. Ta đặt nhiệm vụ xác định tập hợp tốt nhất các biến (5.79). Đặt τ , T_1 , T_2 là thời gian tính toán của thiết bị k , sơ đồ và gradient của tiêu chuẩn, khi đó $T_1 = N\tau$. Thực hiện ba giả thiết:

- 1) Giả sử, số biến cần tìm tỉ lệ thuận với kích thước bài toán, có nghĩa là bằng $\gamma.m$, trong đó γ là hệ số tỉ lệ.
- 2) Số lượng tính toán tiêu chuẩn ở mỗi một hướng tìm kiếm là cố định.
- 3) Thực hiện tính chất của hàm phạt – thêm thành phần phạt mới vào hàm mục tiêu, làm xấu đi không nhiều tốc độ hội tụ của phương pháp.
- 4) Ứng dụng hai giả thiết đầu tiên ta sẽ đánh giá được thời gian T giải bài toán tối ưu:

$$T = \delta \cdot \gamma \cdot m \cdot T_1 + \gamma \cdot m \cdot T_2 = \gamma \cdot m (\delta T_1 + T_2)$$

Đại lượng T sử dụng như một tiêu chuẩn lựa chọn biến (5.79). Để tính đạo hàm riêng sử dụng "vùng ảnh hưởng", cho phép giảm đáng kể số lượng tính toán. Tổ hợp thiết bị với kí hiệu từ p_k đến $p_{k+1} - 1$ được gọi là đoạn k . Ta xét một trường hợp riêng khi sự nối tiếp của các thiết bị (hình 5.26) được chia thành các đoạn với số lượng thiết bị bằng nhau, có nghĩa là $p_{k+1} - p_k = N/(q + 1)$. Biến đầu ra mới của hệ sẽ là y^i , ($i = p_1 - 1, \dots, p_q, N$).

Thời gian tính toán đạo hàm riêng của tiêu chuẩn theo các biến điều khiển và biến đầu ra x^{pk} của đoạn $(k + 1)$ bằng:

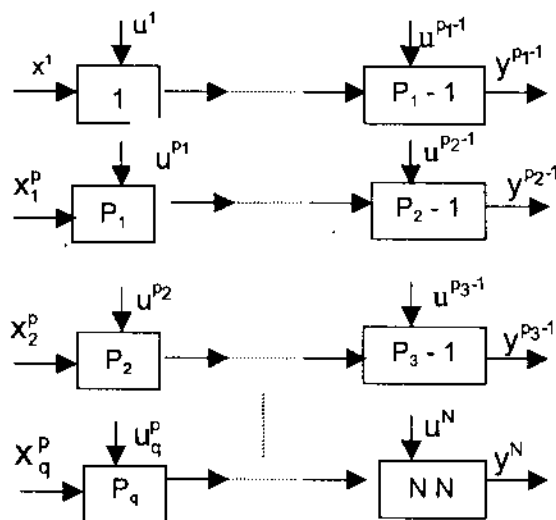
$$\tau \{ nN/q + 1 + m/2(q + 1) (N/q + 1 + 1) \}$$

Từ đó tổng thời gian là:

$$T = \tau \cdot \gamma (r \cdot N + n \cdot q) \left\{ \delta N + n \cdot N + 0,5 r \cdot m [N/(q + 1) + 1] \right\} \quad (5.81)$$

Như vậy, bài toán tìm tổ hợp tối ưu các biến bổ sung (5.79) là cực tiểu hoá hàm T theo biến nguyên q . Phân tích (5.81) chỉ ra hiệu quả việc đưa vào

biến độc lập mới. Thật vậy, nếu $r.N \gg n.q$ thì với sự tăng trưởng của q phần trong ngoặc đầu tiên tăng không đáng kể, ở trong ngoặc thứ hai thành phần thứ ba giảm theo tỉ lệ với q . Từ đó, khi tăng N đủ lớn, sự tăng q có thể làm giảm tổng đại lượng T .



Hình 5.26. Mắc nối tiếp các thiết bị có số lượng bằng nhau

Ví dụ, chúng ta xét bài toán tối ưu hoá các thiết bị trộn lí tưởng nối tiếp, trong đó thực hiện phản ứng $A \rightarrow B \rightarrow C$. Cực đại hoá hiệu suất sản phẩm B trong mức độ chuyển hoá chất A cho trước và tổng thời gian tiếp xúc của thiết bị cũng cho trước. Biến điều khiển cho mỗi thiết bị là thời gian tiếp xúc và nhiệt độ. Trong trường hợp này, $n = 2$, ngoài ra chấp nhận $n = 16$, $\delta = 4$. Từ công thức (5.81) giá trị nhỏ nhất T nhận được khi $q = 5$, trong đó thời gian giải bài toán giảm xuống 1,8 lần. Thực nghiệm số tối ưu hoá hệ với số đứt đoạn khác nhau đã cho thấy cứ đưa vào một sự đứt đoạn thời gian giải giảm 1,8 lần, nếu cứ tiếp tục tăng số đứt đoạn thì đến một lúc nào đó thời gian giải sẽ tăng lên. Khi $q > 1$ điều kiện thứ ba không thực hiện từ đó dẫn đến công thức (5.81). Như vậy, trong khi tính đạo hàm sẽ có thuận lợi nếu đưa thêm sự đứt đoạn của các dòng ngay cả trong các hệ mở.

5.6.5.3. Phương pháp bán giải tích tính gradient tiêu chuẩn theo các biến cần tìm

Các phương pháp metric biến đổi đòi hỏi phải biết đạo hàm bậc một của tiêu chuẩn trên từng hướng tìm kiếm. Phương pháp hiệu quả nhất để tính toán

nó được gọi là phương pháp quá trình liên hợp. Song việc dẫn dắt và chương trình hoá các phương trình của quá trình liên hợp là một thủ tục công kênh, đó là nguyên nhân của việc sử dụng rộng rãi phương pháp sai phân tính đạo hàm. Trong trường hợp này, các đạo hàm hàm số F tính theo công thức:

$$g_i = \frac{\partial F}{\partial u_j} = \frac{\Delta F}{\Delta u_j} = \frac{F(u_1, \dots, u_j + \Delta u_j, \dots, u_r) - F(u_1, \dots, u_j, \dots, u_r)}{\Delta u_j}$$

Trong đó: Δu_j – một đại lượng được chọn rất nhỏ.

Chọn giá trị Δu_j lớn, dẫn đến đạo hàm thiếu chính xác. Khi Δu_j nhỏ quá có thể làm lệch giá trị đạo hàm, cho nên việc tính toán hệ sẽ chỉ với độ chính xác nào đó. Với hệ kín tính toán đạo hàm chuẩn số theo phương pháp sai phân là một quá trình tính lặp vất vả, bởi đối với từng số gia của các biến cần tìm phải tính hoàn chỉnh chế độ ổn định của hệ.

Trong trường hợp các sơ đồ mở sự khó khăn trong tính toán đạo hàm có thể giảm bớt nếu sử dụng "vùng ảnh hưởng". Cần nhớ rằng, bloc i nằm trong vùng ảnh hưởng của bloc k chỉ có trong trường hợp nếu tồn tại một đường liên kết bloc k và i . Như vậy, bloc k của dây đơn giản không có hồi lưu có một "vùng ảnh hưởng" được cấu tạo từ bloc $k, k + 1, \dots, N$. Xét bloc k , giả sử trong chế độ bình thường, ta có giá trị tất cả các biến đầu vào trung gian. Khi đó, để tính các đạo hàm riêng của tiêu chuẩn theo biến u_j^k ($j = 1, \dots, r_k$) dẫn đến sự tính toán không toàn bộ sơ đồ, mà chỉ các bloc có trong "vùng ảnh hưởng".

Dưới đây đề xuất thuật toán bán giải tích tính gradient tiêu chuẩn cho hệ kín, trong đó bằng phương pháp sai phân tính đạo hàm của tiêu chuẩn cho hệ mở, còn đạo hàm cho hệ kín được xác định bởi các công thức chính xác, liên kết cả hệ kín và hệ mở. Điều đó cho phép loại bỏ phép lặp công kênh trong tính đạo hàm.

Giả sử, cần cực tiểu hoá tiêu chuẩn (5.14) trong các ràng buộc, được xác định bởi các phương trình chế độ ổn định (5.17). Các biến cần tìm được chọn là u , còn các biến x sẽ là biến phụ thuộc.

Biểu thức (5.17) xác định các biến x như là hàm số của các biến u . Tiêu chuẩn tối ưu hoá ở dạng hàm của các biến u :

$$F^* = F(x(u), u)$$

Yêu cầu tìm:

$$g_j = \frac{\partial F^*}{\partial u_j}, \quad j = \overline{1, r}$$

Lấy đạo hàm của số F^* như là hàm phức tạp của biến u_j :

$$\frac{\partial F^*}{\partial u_j} = \sum_{i=1}^m \frac{\partial F}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial x_i}{\partial u_j} + \frac{\partial F}{\partial u_j}, \quad j = \overline{1, r} \quad (5.82)$$

Biến đổi các ma trận có kích thước $r \times 1, m \times 1, m \times r$, khi đó biểu thức (5.82) có thể viết lại ở dạng ma trận:

$$\frac{\partial F^*}{\partial u_j} = \left(\frac{\partial x}{\partial u} \right)^T \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial u} \quad (5.83)$$

Để xác định ma trận $\frac{\partial x}{\partial u}$, lấy đạo hàm phương trình i nào đó của hệ (5.17) theo biến u_j :

$$\frac{\partial x_i}{\partial u_j} - \sum \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_k} \frac{\partial x_k}{\partial u_j} - \frac{\partial \varphi_i}{\partial u_j} = 0, \quad i = \overline{1, m} \quad (5.84)$$

Biểu thức (5.84) là hệ m phương trình tuyến tính với m biến độc lập $\frac{\partial x_k}{\partial u_j}$ ($k = \overline{1, m}$) viết lại dưới dạng ma trận:

$$\left(1 - \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \frac{\partial x}{\partial u_j} = \frac{\partial \varphi}{\partial u_j} \quad (5.85)$$

Trong đó: $\partial x / \partial u_j$ là cột j của ma trận $\partial x / \partial u$, còn ma trận $\partial \varphi / \partial u_j$ kích thước $m \times 1$ và $\partial \varphi / \partial x$ kích thước $m \times m$.

Để xác định ma trận $\partial x / \partial u$ cần phải giải r hệ phương trình tuyến tính (5.85) với $j = \overline{1, r}$. Ma trận hệ số trong nó là như nhau, sự khác nhau chỉ ở vế bên phải. Tất cả r hệ phương trình tuyến tính (5.85) có thể viết với sự trợ giúp của phương trình ma trận sau đây:

$$\left(1 - \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \frac{\partial x}{\partial u} = \frac{\partial \varphi}{\partial u} \quad (5.86)$$

$$\text{Từ đó:} \quad \frac{\partial x}{\partial u} = \left(1 - \frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)^{-1} \frac{\partial \varphi}{\partial u} \quad (5.87)$$

Trong đó, ma trận $\frac{\partial \varphi}{\partial u}$ kích thước $m \times r$ có cột của nó là ma trận $\partial \varphi / \partial u_j$ ($j = \overline{1, r}$).

Các ma trận $\frac{\partial F}{\partial u}, \frac{\partial F}{\partial x}$ là tập hợp các đạo hàm của tiêu chuẩn theo các biến cần tìm và biến đầu vào tương ứng của sơ đồ mở, còn $\frac{\partial \varphi}{\partial u}, \frac{\partial \varphi}{\partial x}$ – tập hợp các đạo hàm biến đầu ra tương ứng sơ đồ mở theo biến cần tìm và biến đầu vào của sơ đồ.

Như vậy, để xác định đạo hàm (5.81) cần phải tính một dãy đạo hàm riêng của sơ đồ mở và tìm ma trận ngược của ma trận $(1 - \frac{\partial \varphi}{\partial x})$. Việc thực hiện cách tính toán này không cần phải tiến hành phép lặp trên từng mức của quá trình tính toán sơ đồ, vì thế phương pháp đã xem xét có hiệu quả hơn so với tính đạo hàm theo sai phân.

Thay vì tính đạo hàm của sơ đồ kín chúng ta tính toán đạo hàm của sơ đồ mở, cho nên việc sử dụng "vùng ảnh hưởng" để tính toán là có thể. Việc đó làm giảm khối lượng tính toán.

Ở đây, xuất hiện bài toán phân tích cấu trúc mới – chọn tập hợp đứt đoạn tối ưu (OPM), mà tương ứng với nó thì thời gian tính ma trận nhỏ nhất:

$$\frac{\partial F}{\partial u}, \frac{\partial \varphi}{\partial u} \quad (5.88)$$

$$\frac{\partial F}{\partial x}, \frac{\partial \varphi}{\partial x} \quad (5.89)$$

Giả sử, toàn bộ sơ đồ được cấu tạo từ một tổ hợp. Đặt $M(k)$ tập hợp các số thứ tự những bloc tồn tại trong "vùng ảnh hưởng" của bloc k để tính toán các cột của ma trận (5.88). Cho rằng, τ_j – thời gian trung bình tính bloc j . Kí hiệu T_k – thời gian tính toán các bloc nằm trong vùng ảnh hưởng bloc k , khi đó:

$$T_k = \sum_{j \in M(k)} \tau_j$$

Gọi $T'(Q)$ thời gian tính toán ma trận (5.89) để cho tập hợp đứt đoạn Q , bằng:

$$T'(Q) = \sum_{k=1}^N r_k T_k$$

Đặt $\overline{M}(i)$, ($i \in Q$) tập hợp số thứ tự các bloc có trong "vùng ảnh hưởng" của dòng i để tính ma trận (5.89), còn $\overline{T}_i$ – thời gian tính toán. Giả sử, I_k tập hợp số thứ tự dòng vào của bloc k . Rõ ràng nếu $i \in I_k$ thì ta có biểu thức:

$$\overline{M}(i) \equiv M(k), \quad \overline{T}_i \equiv T_k$$

Giả sử, $T''(Q)$ – thời gian tính toán ma trận (5.89) cho tập Q đã biết, khi đó:

$$T''(Q) = \sum_{i \in Q} n_i \overline{T}_i$$

Trong đó: n_i kích thước dòng i .

Thời gian tổng để tính toán ma trận (5.88), (5.89) bằng:

$$T(Q) = T'(Q) + T''(Q) = \sum_{k=1}^N r_k T_k + \sum_{i \in Q} n_i \overline{T}_i \quad (5.90)$$

Như vậy, bài toán phân tích cấu trúc có thể được phát biểu như sau: Cần tìm một tập hợp nào đó sao cho đại lượng $T(Q)$ có giá trị nhỏ nhất.

Trong khi xác định OPM để tính sơ đồ thường thì tiêu chuẩn tối ưu hoá là đại lượng:

$$I = \sum_{i \in Q} n_i \quad (5.91)$$

cần phải cực tiểu hoá.

Vì để xác định OPM cần biết tính ma trận (5.89), (5.90) và tính gradient. Bài toán chọn OPM là bài toán tổng hợp có hai tiêu chuẩn (5.90) và (5.91).

Lời giải tựa tối ưu của bài toán phân tích cấu trúc có thể nhận được bằng cách sau. Đầu tiên giải bài toán xác định OPM ứng dụng cho bài toán tính sơ đồ, có nghĩa là cho tiêu chuẩn (5.91). Sau đó giữa các tập hợp ta chọn một tập sao cho chuẩn số (5.92) có giá trị nhỏ nhất.

Ta đánh giá hiệu quả của việc sử dụng phương pháp bán giải tích để tính đạo hàm so với phương pháp sai phân. Giả thiết rằng, hệ phương trình (5.17)

tuyến tính và để giải nó bằng phương pháp tựa Niuton cần có $R = m + 1$ là tính toán sơ đồ mở trong đó m – kích thước của hệ (5.17). Đặt r – kích thước bài toán cần giải (vector u) và k – số hướng tìm ($k = r + l$ – trong trường hợp bậc hai). Để tính đạo hàm $\partial F^*/\partial u$ bằng phương pháp sai phân theo một hướng cần phải thực hiện $(r + l)(m + l)$ lần tính toán sơ đồ mở và tổng số lượng tính toán sơ đồ mở bằng:

$$k(r + l)(m + l) = (r + l)(r + l)(m + l).$$

Trong phương pháp bán giải tích ta có $k.r$ số tính toán sơ đồ mở để xác định đạo hàm riêng $\partial F/\partial u$, $\partial \varphi/\partial u$; $m + l$ – số tính toán hệ mở để xác định đạo hàm $\partial \varphi/\partial x$, $\partial F/\partial x$ trong lần tính đầu tiên chế độ ổn định. Tổng số tính toán của sơ đồ mở trong phương pháp bán phân tích tính toán đạo hàm bằng:

$$kr + (m + l) = (r + l)r + (m + l)$$

Gọi l là tỉ số giữa số lượng tính toán của hai phương pháp $\frac{(r + l)(r + l)(m + l)}{(r + l)r + (m + l)}$. Tỉ số này đặc trưng cho hiệu quả của phương pháp bán giải tích. Ví dụ, khi $r = 5$, $m = 11$ tỉ số $l = 8,3$.

Như vậy, hiệu quả phương pháp bán giải tích so với phương pháp sai phân là vào khoảng 8,3 lần. Đối với hệ phi tuyến, hiệu quả của phương pháp "bán giải tích" cũng tăng lên, như vậy $R > m + l$ và $k > r + l$. Khi đánh giá hiệu quả, chúng ta đã coi rằng thời gian mất vào việc giải các phương trình ma trận (5.83), (5.85), (5.86) và (5.87) nhỏ hơn đáng kể so với chi phí cần thiết để tính hệ kín. Đánh giá đã nêu không tính đến các "vùng ảnh hưởng" là yếu tố sẽ cho thêm những lợi ích khác.

Dưới đây, trình bày thuật toán trên cơ sở các phương pháp tựa Niuton, trong đó tính hội tụ của thủ tục tính sơ đồ đã được cải thiện.

5.6.5.4. Phương pháp tựa Niuton tính cân bằng chất và cân bằng nhiệt có sử dụng phép xấp xỉ theo khối

Để tính cân bằng chất và cân bằng nhiệt cho các hệ công nghệ hoá học, hiện nay người ta sử dụng rộng rãi các phương pháp tựa Niuton (giả Niuton, Niuton cải tiến). Cũng giống như bất kì phương pháp nào khác, chúng có những ưu điểm và nhược điểm.

Kinh nghiệm cho thấy số phép lặp của phương pháp tựa Niuton tăng tỉ lệ với kích thước của hệ phương trình phi tuyến cần giải. Do đó, việc tính các hệ công nghệ có nhiều dòng tuần hoàn vật chất và nhiệt có thể trở nên khá vất vả. Có thể đề xuất phương pháp giải đồng thời (song song) đối với hệ (5.9) – (5.11), trong đó các biến lặp lấy là mọi biến x^k , $k = \overline{1, N}$. Khi đó, việc tính toán được quy về giải N phương trình với N ẩn. Ta hãy chứng minh hiệu quả của phương pháp này. Khác với phương pháp Broyden, ta sẽ làm gần đúng chính ma trận Jacobian chứ không phải nghịch đảo của nó. Ngoài ra, ta sẽ làm gần đúng ma trận Jacobian không phải ngay lập tức cho tất cả mọi phương trình, mà chỉ về phải của hệ phương trình cho các khối riêng rẽ của (5.9). Ta kí hiệu x^{ki} , y^{ki} là giá trị của các vectơ x^k , y^k ở phép lặp thứ i , $s^{ki} = x^{ki+1} - x^{ki}$, $z^{ki} = \varphi^{ki+1} - \varphi^{ki}$. Ta đưa vào ma trận $Z^{ki} = (z^{k0}, \dots, z^{ki-1})$, $S^{ki} = (s^{k0}, \dots, s^{ki-1})$. Gọi B^{ki} là gần đúng của ma trận Jacobian $J^{ki} = \left(\frac{\partial \varphi^k}{\partial x} \right)$ ở

phép lặp thứ i . Đã chứng minh rằng hệ thức ma trận:

$$Z^{ki} = J^{ki} S^{ki} \quad (5.92)$$

cho hệ tuyến tính được thực hiện chính xác, còn đối với hệ phi tuyến thì đúng với độ chính xác tới một số hạng bậc nhất nhỏ vô hạn. Bây giờ ta đi tìm ma trận B^{ki} từ phương trình:

$$Z^{ki} = B^{ki} S^{ki}$$

Để xác định B^{ki} có thể dùng hai phương pháp. Theo phương pháp thứ nhất, B^{ki} chỉ tìm được sau n_k phép lặp, khi đó:

$$B^{ki} = Z^{ki} (S^{ki})^{-1}$$

ở phép lặp thứ l , ($l \geq n_k + 1$), một trong các cột của các ma trận Z^{ki} , S^{ki} được thay bằng các vectơ mới z^{ki} , s^{ki} thu được ở phép lặp đó.

Theo phương pháp thứ hai, để xác định B^{ki} ta dùng một trong các công thức của một họ sau:

$$B^{ki+1} = B^{ki} + \frac{(z^{ki} - B^{ki} s^{ki}) c^{ki^T} E^{ki}}{c^{ki^T} E^{ki} z^{ki}}$$

$$B^{ki+1} = E^{ki} + \frac{E^{ki} z^{ki} c^{ki^T} E^{ki}}{c^{ki^T} E^{ki} z^{ki}}$$

$$B^{k0} = E^{k0} = I_{n_k}$$

Trong đó: c^{ki} là vector gồm các hằng số bất kì có kích thước n_k .

Sau khi xác định được tất cả các B^{ki} , $k = 1, 2, \dots, N$, thì ma trận Jacobian trở nên đã biết đối với toàn hệ (5.9) – (5.11). Tuy nhiên, để xác định gia số của vector lặp Δx^{ki} , không nhất thiết phải tìm dạng tổng quát của ma trận Jacobian. Như vậy, nếu biết B^{ki} và dạng của hệ (5.9) – (5.11) có thể viết ngay được hệ phương trình giúp xác định Δx^{ki} . Thật vậy, với độ chính xác tới một số hạng nhỏ vô hạn bậc nhất, ta có:

$$y^{ki} + \Delta y^{ki} = \varphi^k(x^{ki}) + J^{ki} \Delta x^{ki} \quad (5.93)$$

Ngoài ra:

$$\Delta x^{ki} = \sum_{j=1}^N \Delta y^{ji} \alpha_{kj} \quad (5.94)$$

Thay các J^{ki} trong (5.93) bằng các gần đúng B^{ki} và viết dưới dạng:

$$\Delta y^{ki} = B^{ki} \Delta x^{ki} + \varphi^k(x^{ki}) - y^{ki} \quad (5.95)$$

Các phương trình (5.94) và (5.95) có thể giải thích là mô hình toán học của sơ đồ, có cấu trúc giống với cấu trúc của hệ công nghệ ban đầu, nhưng mô hình các khối thì tuyến tính. Do đó muốn giải chúng có thể áp dụng các phương pháp tính toán tuần tự.

Ta hãy so sánh hai cách tiếp cận tuần tự và song song đối với một trường hợp giả định. Giả sử, mọi mô hình (5.9) đều tuyến tính, dạng của chúng chưa biết, nhưng dựa vào x^k đã cho có thể tính được y^k . Phương pháp tính toán tuần tự đòi hỏi tiến hành $(m + l)$ bước để giải hệ (5.9) – (5.11). Trong phương pháp song song, để xây dựng ma trận Jacobian đầy đủ cần tiến hành $\bar{n} = \max \{n_k\}$ bước và nghiệm sẽ nhận được ở bước thứ $(n + l)$. Nếu $m > n$ thì nên áp dụng phương pháp song song. Ta cũng nhận thấy một tính chất lí thú – số lượng phép lặp khi giải hệ không phụ thuộc vào kích thước của nó, lại do kích thước của các khối riêng rẽ quyết định. Hơn nữa, việc phức tạp hoá cấu trúc (tăng số lượng liên hệ ngược trong sơ đồ) cũng không làm tăng số lượng phép lặp. Nhưng trong phương pháp tính toán tuần tự thì tăng số lượng liên hệ ngược trong sơ đồ có thể làm tăng giá trị m và kéo theo số lượng phép lặp tăng đáng kể. Những lập luận trên đúng cho các hệ tuyến tính, song cũng có thể vẫn đúng khi giải các hệ phi tuyến gần tuyến tính.

5.6.6. Xây dựng phương pháp nhiều mức để phân tích, tối ưu hoá và tổng hợp các hệ công nghệ sinh học

Như đã chỉ ra trong mục 5.63, các phương pháp tổng hợp tối ưu dựa trên cách tiếp cận giả thiết – tích phân-thực chất là một thủ tục nhiều mức. Muốn xây dựng phương pháp tổng hợp nhiều mức, ta cần chọn được chỉ tiêu hiệu quả cho phương pháp và đề ra những nguyên tắc ghép nối các thuật toán của các mức khác nhau.

5.6.6.1. Chọn chỉ tiêu hiệu quả cho phương pháp nhiều mức

Khi xây dựng phương pháp nhiều mức và đánh giá hiệu quả của nó, cũng như khi xây dựng bất kì phương pháp tối ưu hoá nào, cần tính đến hàng loạt yếu tố quan trọng: tính phổ biến; độ tin cậy và độ chính xác; độ nhạy đối với các tham số và dữ liệu ban đầu; chi phí cho việc xử lý và tính toán sơ bộ; tính hội tụ. Từ đó suy ra hiệu quả của phương pháp nhiều mức là một chỉ số nhiều tiêu chuẩn mà tiêu chuẩn chủ yếu là tính hội tụ toàn cục, cục bộ và tốc độ. Về phần mình, tốc độ của phương pháp tổng hợp lại được đặc trưng bởi những chỉ số như số nhánh trên siêu cấu trúc và số lần tính toán sơ đồ mở khi giải bài toán tính toán và tối ưu hoá thu được ở mỗi bước tổng hợp. Rõ ràng là tốc độ, cũng giống như tiêu chuẩn hiệu quả của thuật toán tổng hợp nhiều mức, phải được đặc trưng bởi một số chung các tính toán sơ đồ mở khi giải bài toán tổng hợp, bằng tích của số nhánh và số tính toán sơ đồ mở:

$$K_c = \sum_{j=1}^{k_v} \sum_{i=1}^{k_{ij}} l_{ij} \quad (5.96)$$

Trong đó: l_{ij} là số tính toán sơ đồ mở khi thực hiện thủ tục tối ưu hoá thứ i của bước j trong phép tổng hợp;

k_v là số bước tổng hợp (số nhánh);

k_{ij} là số lần quay về thủ tục tối ưu hoá ở bước tổng hợp thứ j .

5.6.6.2. Những nguyên tắc liên hợp các phương pháp nhiều mức

Để xây dựng một phương pháp nhiều mức có hiệu quả, cần tính đến các quy tắc sau:

– Quy tắc thứ nhất

Các thuật toán của mỗi mức phải được xem là các bộ phận có quan hệ lẫn nhau và phù hợp nhau của một thuật toán tổng hợp thống nhất.

Bằng cách phức tạp hoá hoạt động của các thuật toán của một mức lên một chút, có thể cải thiện đáng kể hoạt động của các thuật toán thuộc mức khác; xét tổng thể điều đó sẽ làm cho hoạt động của cả quá trình hiệu quả hơn. Trái lại, nếu cải thiện hoạt động của các thuật toán chỉ ở một mức, có thể dẫn đến làm phức tạp hoá hoạt động của các thuật toán ở những mức khác và kết cục là hiệu quả hoạt động của toàn bộ phương pháp kém đi.

Ta hãy xét hai ví dụ :

Bằng cách chọn các biến cần tìm (xem mục 5.6.6), có thể đơn giản hoá việc tính sơ đồ (mức 1) sau khi làm cho nó trở thành không lặp, nhưng lại làm phức tạp đáng kể các mức 2 và mức 3 (tăng số lượng số hạng phạt). Ngược lại, nếu làm phức tạp thuật toán mức 1 bằng cách tính đến các ràng buộc đẳng thức, ta sẽ đơn giản hoá đáng kể các tính toán ở mức 2 và mức 3 (thậm chí mức 3 mất đi).

Một ví dụ khác – chọn bước trong công thức tìm kiếm tuyến tính theo phương pháp cực tiểu hoá không điều kiện (mức 2). Khi áp dụng phương pháp cực tiểu hoá không điều kiện thì có một quy tắc: Bước càng lớn theo phương tìm kiếm thì càng tốt. Trong trường hợp mức thứ nhất không lặp thì quy tắc này vẫn đúng cho cả các thủ tục nhiều mức. Còn khi mức thứ nhất đòi hỏi thực hiện các phép lặp thì quy tắc này nói chung không đúng. Thật vậy, khi tăng giá trị bước theo phương tìm kiếm thì một mặt giảm được số lượng phép lặp ở mức thứ hai, mặt khác lại làm xấu đi các gần đúng ban đầu khi giải hệ của mức 1 và điều đó có thể làm tăng số lượng phép lặp hoặc làm mất hội tụ. Phải có một sự thỏa hiệp, khi đó bước dọc theo phương tìm kiếm là tối ưu theo quan điểm tổng số phép lặp ở mức 1 và mức 2. Điều đó khẳng định tính hợp lý của việc chọn tổng số lần tính toán sơ đồ kín làm chỉ tiêu đánh giá hiệu quả của thủ tục tổng hợp nhiều mức.

– Quy tắc thứ hai

Sử dụng tối đa thông tin thu được từ thủ tục trước đó.

Trong một thủ tục nhiều mức, ứng với bước thứ j của mức thứ k sẽ là một thủ tục lặp nào đó của mức $(k - 1)$. Chẳng hạn, bước thứ j của mức 2 sẽ ứng với thủ tục lặp giải hệ phương trình phi tuyến. Bước lặp của mức 3 ứng với thủ tục lặp tối ưu hoá không điều kiện của mức 2. Để đơn giản việc trình bày sau đây, ta sẽ gọi thủ tục lặp của mức $(k - 1)$ ứng với bước thứ j của mức k là thủ tục lặp thứ j của mức k .

Bây giờ ta trình bày quy tắc đang xét như sau: Khi xây dựng phép gần đúng ban đầu cho thủ tục lặp thứ j của mức k , cần sử dụng thông tin thu được khi tiến hành thủ tục lặp thứ $(j - 1)$ của mức k .

Ta xét mức thứ nhất của sơ đồ khối trên hình 5.16. Giả sử, cần giải hệ (5.17) cho dãy vectơ u^j ($j = 1, 2, \dots$). Giả thiết rằng, các vectơ u^j thay đổi không đáng kể, sao cho hệ thức sau đúng:

$$\|u^{j+1} - u^j\| \leq \varepsilon, \quad j = 1, 2, \dots \quad (5.97)$$

Trong đó, ε là đại lượng nhỏ.

Ta sẽ coi rằng, hệ (5.17) xác định biến x như hàm liên tục dạng ẩn của biến u :

$$x^* = x^*(u), \quad f(x^*(u), u) = 0.$$

Ta kí hiệu:

$$x^j = x^*(u^j), \quad J^j = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x=x^j, u=u^j}$$

nghĩa là x^{*j} là nghiệm của hệ (5.17) khi $u = u^j$.

Giả thiết là nhờ một trong các phương pháp tựa Niuton ta đã tìm được nghiệm của hệ (5.17) khi $u = u^j$, đồng thời khi đó bản thân ma trận Jacobian đã được làm gần đúng. Ta kí hiệu B^{*j} là giá trị giới hạn của ma trận đã lấy làm gần đúng ma trận Jacobian. Giả thiết là B^{*j} đủ gần tới ma trận J^{*j} . Bây giờ giả sử là cần tìm nghiệm của hệ (5.17) khi $u = u^{j+1}$:

$$f(x, u^{j+1}) = 0 \quad (5.98)$$

Trong đó: u^{j+1} thoả mãn (5.97).

Từ hệ thức (5.97) và tính liên tục của hàm $x^*(u)$ suy ra là x^{*j+1} sẽ đủ gần tới x^{*j} , tức là:

$$\|x^{*j+1} - x^{*j}\| < \delta \quad (5.99)$$

Trong đó: δ là đại lượng nhỏ.

Từ đó, khi giải hệ (5.98), một cách hợp lí ta có thể lấy giá trị ban đầu cho biến x là giá trị x^{*j} thu được ở phép lặp trước đó: $x^{0j+1} = x^{*j}$; điều đó bảo đảm một giá trị ban đầu tốt cho x và một độ hội tụ nhanh cho phương pháp tựa Niuton.

Bây giờ ta xem xét cách chọn gần đúng ban đầu cho ma trận B^{0j+1} khi giải hệ (5.98). Khi các điều kiện (5.97) và (5.99) được thoả mãn và với giả thiết là độ cong của hàm F không lớn (chỉ tiêu "hàm trơn của các biến độc lập"), có thể giả thiết là ma trận B^{*j} thu được ở bước trước là gần đúng tới cho J^{*j+1} . Cho nên ta có thể lấy một cách hợp lí ma trận B^{*j} làm gần đúng ban đầu cho ma trận B^{0j+1} khi giải hệ (5.98). So với phép gần đúng sai phân của ma trận Jacobian, thủ thuật này tránh được việc phải tính thêm vế trái

của hệ (5.98) ở điểm ban đầu. Một gần đúng ban đầu tốt sẽ giúp khỏi phải hạ thấp tiêu chuẩn đối với vế trái của hệ (5.98) trên từng phương i , tức là khỏi phải chọn t^i trong (5.19) từ điều kiện cực tiểu hoá hoặc điều kiện giảm hàm trên từng bước, một điều phát sinh do mong muốn bảo đảm tính ổn định của việc tìm kiếm ngay cả khi gần đúng ban đầu không tốt. Trong trường hợp đó, t^i được coi bằng đơn vị, giống như trong phương pháp Niuton.

Tiếp theo, ta xét *mức thứ hai* của phép cực tiểu hoá không điều kiện một hàm mục tiêu trong ví dụ về phương pháp phạt, khi cần cực tiểu hoá hàm

$$\Phi = F + \gamma^j \psi^2,$$

với giá trị hệ số γ^j cố định (để cho đơn giản ta giả sử là chỉ có một ràng buộc kiểu đẳng thức). Giá trị của hệ số γ sẽ được dùng ở mức 3. Ta kí hiệu G^{*j} là giá trị giới hạn của ma trận làm gần đúng ma trận nghịch đảo Hess thu được khi cực tiểu hoá hàm Φ^j bằng một phương pháp giả Niuton nào đó. Vì giá trị G^{*j} sẽ gần với giá trị ma trận nghịch đảo Hess của hàm Φ^j , cho nên ta chọn nó làm gần đúng ban đầu của G^{0j} khi cực tiểu hoá hàm Φ^{j+1} với $\frac{\partial x_k}{\partial u_j}$ ($k = \overline{1-m}$).

Ta cũng đưa ra những giả thiết tương tự khi sử dụng phương pháp hàm Lagrange cải tiến. Nhưng cần lưu ý rằng, lượng tăng lớn ban đầu của hệ số phạt có thể dẫn tới sai số lớn.

Bây giờ ta xét việc chọn bước (hệ số α^i) trong phép tìm kiếm tuyến tính của phương pháp cực tiểu hoá vô điều kiện trong trường hợp bài toán 3 (xem mục 5.6.5). Vì ở mức 1, thủ tục là không lặp cho nên giá trị của α^i không chịu bất kì ràng buộc nào từ bước 1 đặt sang và nó được chọn từ điều kiện cực tiểu số tính toán các hàm mục tiêu. Trên mỗi phương sẽ diễn ra việc tìm kiếm tuyến tính một điểm thoả mãn điều kiện giảm hoặc cực tiểu hoá hàm trên từng bước. Việc tìm kiếm được bắt đầu từ bước ban đầu mà giá trị của nó có ảnh hưởng lớn đến số lượng bước theo phương đã chọn và do đó lên tổng số các bước. Giả thiết rằng, trên hai phương cạnh nhau (phương thứ i và thứ $i-1$), các chuẩn $\|u^{i+1} - u^i\|$ và $\|u^i - u^{i-1}\|$ gần nhau, cho nên bước đầu trên phương thứ $(i+1)$ được chọn từ điều kiện $\alpha^{0i+1} = \gamma \alpha^{*i}$. Thừa số γ gần bằng đơn vị, được chọn nhờ kinh nghiệm; α^{*i} là giá trị tối ưu của bước theo phương thứ i .

Trên cơ sở các quy tắc đã nêu, ta đề ra nguyên tắc liên hợp các mức của phép tối ưu hoá rời rạc trong sơ đồ toàn cục với các mức đứng dưới của phép tối ưu hoá tham số và tính toán. Kết quả của bước tiếp theo trong tối ưu hoá

rời rạc đối với siêu cấu trúc là một sơ đồ công nghệ mà trong trường hợp tổng quát có thể bao gồm cả các dòng tuần hoàn, nghĩa là sơ đồ kín. Nguyên tắc liên hợp mức của việc tổng hợp với các mức đứng dưới của việc tính và tối ưu hoá là tiến hành phân tích cấu trúc sơ đồ công nghệ nhận được tại bước tiếp theo của quá trình tối ưu hoá rời rạc trong sơ đồ toàn cục, căn cứ vào tiêu chuẩn tính tham số của dòng phải nhỏ nhất, bởi vì người ta đã chứng minh rằng, trong các điều kiện đó thì số phép lặp tỉ lệ với kích thước của bài toán cần giải (nói riêng, khi sử dụng phương pháp Wolf hoặc các phương pháp giả Niuton). Vì kết quả của việc phân tích cấu trúc là một nhóm các tập hợp dòng đứt đoạn, cho nên tiếp theo cần chọn ra trong chúng một tập hợp duy nhất mà ta muốn nó trùng với tập hợp các dòng đứt đoạn và đã được dùng ở thủ tục tổng hợp trước. Điều đó cho phép sử dụng nghiệm thu được ở các thủ tục trước của quá trình tối ưu hoá và tính toán làm gần đúng ban đầu cho các biến lặp và biến tìm kiếm. Nếu một tập hợp như vậy không tồn tại thì khi chọn tập hợp gián đoạn duy nhất ta giả thiết sẽ sử dụng tiêu chuẩn (5.91), ứng với thời gian nhỏ nhất để tính các ma trận đạo hàm riêng của hệ mở có tính đến các "vùng ảnh hưởng".

5.6.6.3. Xây dựng phương pháp nhiều mức

Phương pháp được xây dựng theo những nguyên tắc đã trình bày sẽ đưa bài toán tổng hợp thành một loạt bài toán cực tiểu hoá không điều kiện và là một thủ tục nhiều mức (xem hình 5.27), trong đó các mức:

- Mức 0: là tính toán thiết bị riêng rẽ.
- Mức 1: là thuật toán tính chế độ dừng của sơ đồ công nghệ.
- Mức 2: là thuật toán cực tiểu hoá không điều kiện đối với tiêu chuẩn cải tiến.
- Mức 3: là thuật toán thay đổi các tham số của tiêu chuẩn cải tiến.
- Mức 4: là thuật toán phân tích cấu trúc.
- Mức 5: là thuật toán phân nhánh trên siêu cấu trúc.

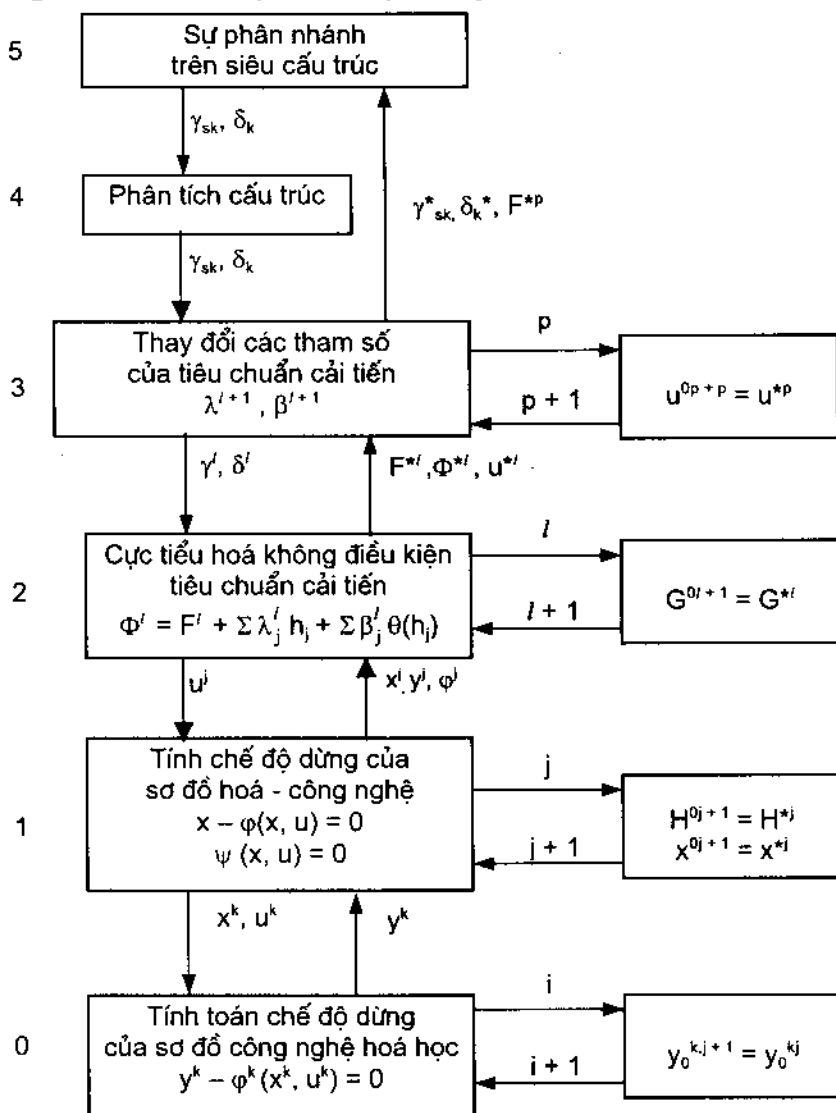
Ở mức 0, trên phép lặp thứ $(i+1)$ của việc tính sơ đồ đối với những tham số đầu ra nhất định của khối thứ k (y^k) tính được theo kiểu lặp, người ta lấy nghiệm nhận được ở phép lặp thứ i ($y_0^{k,i+1} = y^{k,i}$) làm gần đúng ban đầu.

Ở mức 1, người ta sử dụng cách tiếp cận mô đun tuần tự vào việc tính chế độ dừng. Phương pháp tính toán được chọn trong số các phương pháp tựa Niuton và cho phép tính đến các ràng buộc đẳng thức áp đặt lên các biến đầu vào và biến trung gian của sơ đồ. Việc tính đến các ràng buộc đẳng thức ở mức tính sơ đồ đã đơn giản hoá các tính chất của tiêu chuẩn cải tiến đã xây dựng. Hệ phương trình phi tuyến cần giải có dạng:

$$\begin{aligned} f_i(x_i, \bar{x}_j, u) &= x_i - \varphi_i(x_i, \bar{x}_j, u) = 0 \\ f_{m+j}(x_i, \bar{x}_j, u) &= \psi_j(x_i, \bar{x}_j, u) = 0 \end{aligned} \quad (5.100)$$

Trong đó: x_i ($i = \overline{1, m}$) – vectơ của các biến lập, nhận được trong kết quả của phân tích cấu trúc sơ đồ;

x_j ($j = \overline{1, m_1}$) – vectơ biến lập phụ, bảo đảm cho việc thoả mãn các ràng buộc đẳng thức (5.100); $m_3 = m + m_1$ là tổng kích thước của hệ cần giải.



Hình 5.27. Phương pháp tổng hợp nhiều mức

Các gần đúng liên tiếp x^i được xác định theo công thức (5.20) và (5.21). Việc chính xác hoá ma trận Jacobian nghịch đảo của H^i được thực hiện theo các hệ thức truy hồi từ (5.22) đến (5.24). Người ta lấy ước lượng của ma trận Jacobian nghịch đảo và nghiệm nhận được trong tính toán trước đối với chế độ dừng làm ước lượng ban đầu đối với ma trận nghịch đảo Jacobian và nghiệm ở thủ tục lặp thứ $(j + 1)$:

$$H^{0j+1} = H^{*j}, \quad x^{0j+1} = x^{*j} \quad (5.101)$$

Nếu ở tính toán trước mà thấy rằng, số tính toán đối với hệ mở là

$$i > m_3 + 1 \quad (5.102)$$

thì người ta lấy ma trận nghịch đảo của gần đúng sai phân đối với ma trận Jacobian làm ước lượng cho H^{0j+1} :

$$H^{0j+1} = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)^{-1} \bigg|_{x=x^j}$$

Điều đó bảo đảm cho phương pháp có độ hội tụ tin cậy hơn.

Ước lượng (5.101) giúp tránh được phải tính toán sai phân đối với ma trận Jacobian và việc phải áp dụng nó cho mọi giá trị biến tìm kiếm u , chỉ trừ điểm ban đầu của thủ tục và khi thoả mãn điều kiện (5.102). Sơ đồ khối của thuật toán mức 1 được trình bày trên hình 5.28.

Mức 2 dùng để cực tiểu hoá không điều kiện tiêu chuẩn cải tiến. Hàm chỉ bao gồm các ràng buộc bất đẳng thức và có dạng:

$$\Phi'(u, \lambda, \beta) = F(u) + \sum_{j=1}^{m_1} \lambda_j h_j(u) + \sum_{j=1}^{m_2} \beta_j \theta_j(h_j(u)) \quad (5.103)$$

Trong đó:

λ_j là các thừa số Lagrange;

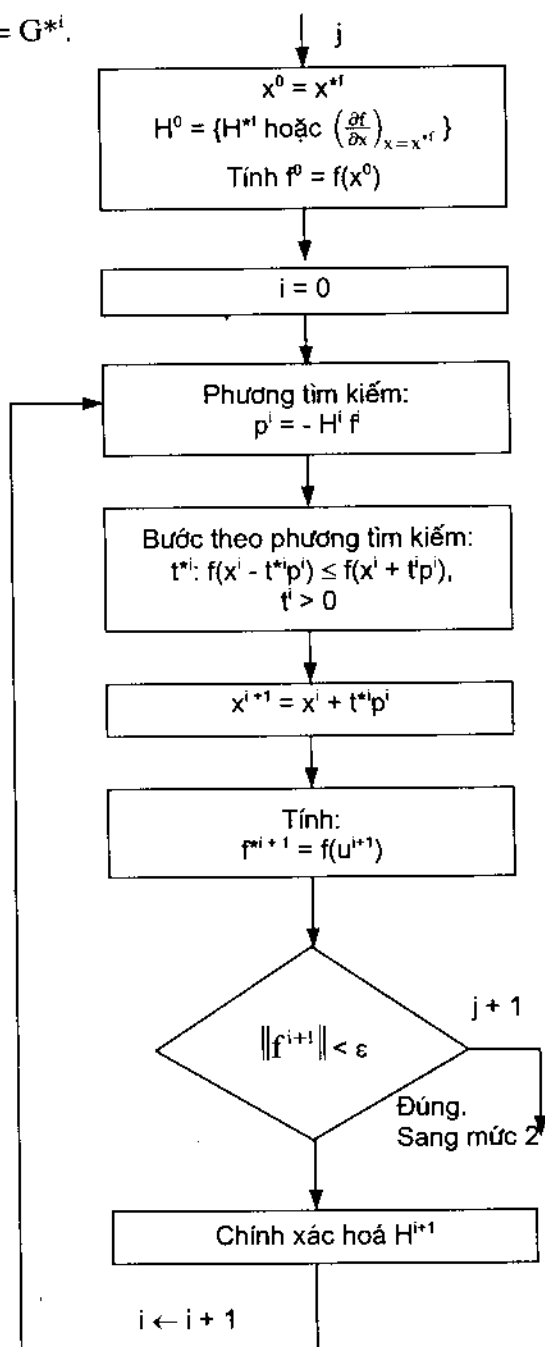
β_j là các hệ số phạt;

$\theta_j = 0$ nếu $h_j(u) \leq 0$ và $\theta_j = h_j^2(u)$ nếu $h_j(u) > 0$, $j = \overline{1, m_2}$.

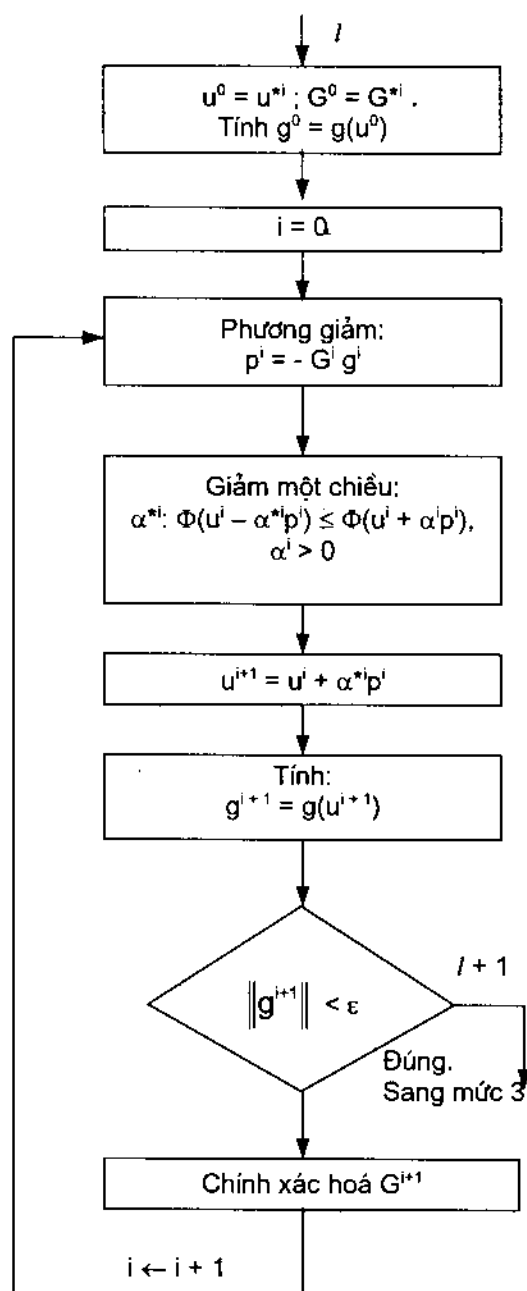
Để cực tiểu hoá hàm (5.103), người ta dùng phương pháp tựa Newton cho các phương liên hợp đối với ma trận Hess và thuật toán giảm một chiều dọc theo phương đã chọn. Để chính xác hoá ma trận G^i (nghịch đảo của ma trận Hess), người ta dùng công thức Broyden – Fletcher – Goldfarb – Shanno.

Ma trận nhận được sau bước cực tiểu hoá trước được lấy làm gần đúng ban đầu cho ma trận nghịch đảo Hess trong thủ tục lặp thứ $(l+1)$:

$$G^{0l+1} = G^{*l}.$$



Hình 5.28. Sơ đồ khối mức 1



Hình 5.29. Sơ đồ khối mức 2

Để tính các đạo hàm bậc nhất của tiêu chuẩn, người ta dùng phương pháp "bán giải tích". Giá trị bước ban đầu theo phương thứ $(i+1)$ trong thuật toán giảm một chiều được chọn từ điều kiện:

$$\alpha^{0i+1} = \gamma \alpha^{*i},$$

Trong đó:

α^{*i} là giá trị tối ưu của bước theo phương thứ i ,

γ là thừa số lấy theo kinh nghiệm, gần bằng đơn vị.

Sơ đồ khối của thuật toán mức 2 được trình bày trên hình 5.29.

Mức 3 thực hiện phương pháp hàm Lagrange cải tiến. Người ta tính ra một loạt thừa số Lagrange và hệ số phạt theo thuật toán:

$$\lambda'^{+1} = \lambda' + 2\lambda' h(u),$$

$$\beta'^{+1} = 10\beta'.$$

Mức 4 tiến hành phân tích cấu trúc sơ đồ công nghệ nhận được trên bước phân nhánh. Bài toán phân tích cấu trúc được giải dưới dạng hai tiêu chuẩn đã đề xuất ở trên với việc sử dụng thuật toán xác định tất cả các tập hợp đứt đoạn tối ưu. Nhờ phân tích cấu trúc, xác định được các dòng đứt đoạn có điều kiện và thứ tự tính toán các thiết bị của sơ đồ công nghệ.

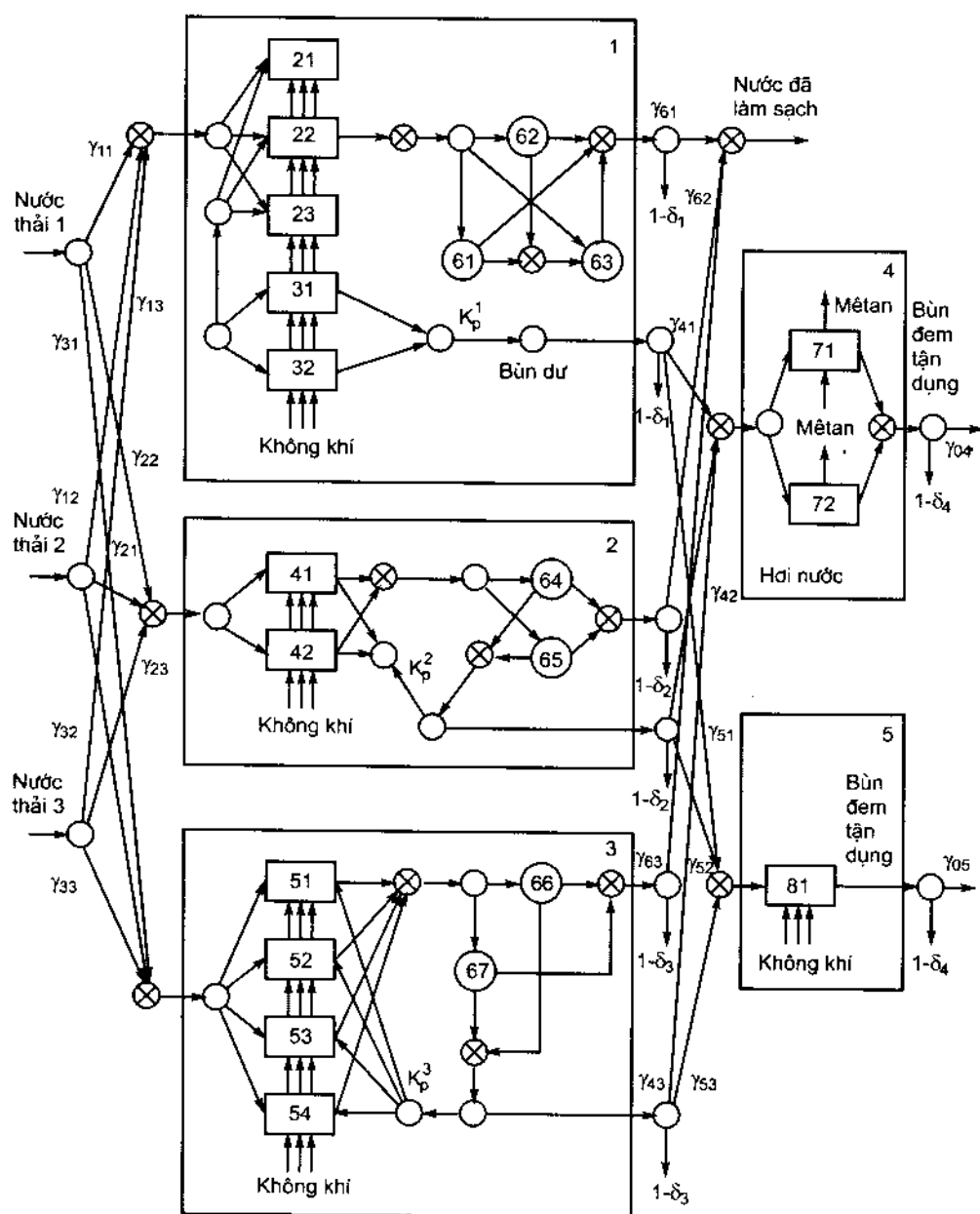
Mức 5 bao gồm thuật toán phân nhánh trên siêu cấu trúc trong trường hợp một số tham số cấu trúc là số nguyên. Muốn vậy, sử dụng thuật toán của phương pháp nhánh và biên đã đề xuất ở trên.

5.6.7. Bài toán tối ưu hoá thông số cấu trúc sơ đồ công nghệ BOSV (xử lý nước thải bằng biện pháp sinh học)

5.6.7.1. Mô tả tiêu chuẩn các biến tìm kiếm và các ràng buộc

Siêu cấu trúc dùng để giải bài toán chọn một trong các khối cơ bản của sơ đồ phân bố tải giữa các bể aeroten trong các khối đó, chọn phương pháp sử dụng bùn hoạt tính và xác định chế độ làm việc của sơ đồ BOSV nhận được với chi phí vận hành nhỏ nhất, được lấy là sơ đồ khối thông tin biểu diễn trên hình 5.30.

Để thực hiện phương pháp tổng hợp cải tiến đã đề xuất, ta gán cho mỗi thiết bị trong sơ đồ công nghệ các tham số cấu trúc loại một và loại hai, nghĩa là ở đầu vào của mỗi thiết bị có đặt một máy trộn dòng, còn ở đầu ra đặt một máy tách dòng, làm nhiệm vụ lấy ra một phần dòng $(1 - \delta_k)$ từ sơ đồ, phần còn lại để phân phối giữa các thiết bị khác với nhau.



Hình 5.30. Sơ đồ khối thông tin giải bài toán tối ưu hóa tham số cấu trúc của hệ BOSV (xử lý nước thải bằng biện pháp sinh học)

Cũng như trong bài toán 1, ta chọn chi phí vận hành làm tiêu chuẩn tối ưu. Tiêu chuẩn này được cải tiến bằng cách đưa vào mỗi số hạng một thừa số ứng với tham số cấu trúc loại hai.

Chỉ tiêu có dạng:

$$F = c_b \left(\sum_{i=1,2,3} \delta_i G_i + \delta_5 G_5 \right) + c_{hl} \sum_{i=1,2,3} \delta_i v_i^{hl} + c_n \delta_4 w_4 - c_M \delta_4 v_M - c_u (\delta_5 v_5 + \delta_4 v_4)$$

Trong đó: hl – hồi lưu.

Các biến tìm kiếm của bài toán được lấy là các tham số cấu trúc loại một γ_i , tham số cấu trúc loại hai δ_k , lưu lượng không khí trong các bể aeroten và trong các thiết bị sinh nhiệt của sơ đồ.

Danh mục đầy đủ các biến tìm kiếm được cho trong bảng 5.4.

BẢNG 5.4. DANH MỤC ĐẦY ĐỦ CÁC BIẾN TÌM KIẾM

Biến	Ý nghĩa của thông số
$\gamma_{11}, \gamma_{21}, \gamma_{31}$	Phần lưu lượng của dòng chảy công nghiệp hướng đến các khối thứ nhất, thứ hai và thứ ba
$\gamma_{12}, \gamma_{22}, \gamma_{32}$	Phần lưu lượng của dòng chảy sinh hoạt hướng đến các khối thứ nhất, thứ hai và thứ ba
$\gamma_{13}, \gamma_{23}, \gamma_{33}$	Phần lưu lượng của dòng chảy nước mưa hướng đến các khối thứ nhất, thứ hai và thứ ba
$G_1^{\text{bể lọc}}, G_2^{\text{bể lọc}}, G_3^{\text{bể lọc}}$	Lưu lượng không khí trong các bể aeroten thuộc khối thứ nhất, thứ hai và thứ ba
$G_1^{\text{bướng}}, G_2^{\text{bướng}}, G_3^{\text{bướng}}$	Lưu lượng không khí trong các thiết bị sinh nhiệt thuộc khối thứ nhất, thứ hai và thứ ba
$k_{\text{bùn1}}, k_{\text{bùn2}}, k_{\text{bùn3}}$	Phần dòng bùn lên chặt tới được các thiết bị sinh nhiệt của khối thứ nhất, thứ hai, thứ ba
$\gamma_{41}, \gamma_{42}, \gamma_{43}$	Phần dòng bùn dư đến được khối bể chứa metan thuộc khối thứ nhất, thứ hai, thứ ba
$\gamma_{51}, \gamma_{52}, \gamma_{53}$	Phần dòng bùn dư đến được khu ổn định hiếu khí thuộc khối thứ nhất, thứ hai, thứ ba
$\delta_1, \delta_2, \delta_3, \delta_4, \delta_5$	Sự có mặt trong sơ đồ của các khối 1, 2, 3, 4 và 5

Đối với giá trị các biến số cấu trúc loại một, ta áp đặt các ràng buộc thuộc dạng đẳng thức và bất đẳng thức sau:

$$\gamma_{4i} + \gamma_{5i} = \delta_i, \quad i = \overline{1, 3}, \quad 0 \leq \gamma_{ij} \leq 1, \quad j = \overline{1, 5}, \quad i = \overline{1, 3},$$

$$\sum_{k=1}^3 \gamma_{ji} = 1, \quad i = \overline{1, 3}, \quad \gamma_{i1} + \gamma_{i2} + \gamma_{i3} \leq 3\delta_i, \quad i = \overline{1, 3},$$

$$\gamma_{i1} + \gamma_{i2} + \gamma_{i3} \leq 3\delta_i, \quad i = \overline{4, 5}$$

Ngoài các ràng buộc đặt lên các thông số cấu trúc loại một γ_{ij} , ta còn bổ sung thêm vào bài toán các ràng buộc thể hiện những yêu cầu đối với chất lượng làm sạch nước thải:

– Đối với lượng xả cao nhất cho phép các chất lơ lửng vào hồ chứa nước đã làm sạch:

$$c_x \left(v_{ra} s_j^{\text{vào}} - s_j^{\text{LXC}} \right) \leq 0$$

– Đối với lượng xả cao nhất cho phép các chất bản vào hồ chứa nước để làm sạch:

$$c_j \left(v_{ra} s_j^{\text{vào}} - s_j^{\text{LXC}} \right) \leq 0$$

– Đối với lượng chất bản trong nước đã làm sạch xả vào hồ chứa:

$$\bar{c}_j \left(s_j^{\text{vào}} - \bar{s}_j^{\text{NGC}} \right) \leq 0$$

– Đối với lưu lượng không khí:

$$\sum_{i=1,2,3,5} G_i \leq G^{\max}, \quad G_i \geq G_i^{\min}, \quad i = 1, 2, 3, 5$$

Ràng buộc đối với nồng độ sinh khối trong dòng bùn đã lên chất:

$$x_{\text{đư}}^i \leq x_{\text{đư}}^{\max}, \quad i = 1, 2, 3$$

và lưu lượng dòng bùn cần hoặc vào bể metan hoá $v_{\text{cần}}$ (m^3/h):

$$v_{\text{cần}} \leq 0,6.$$

Các giá trị giới hạn được cho trong bảng 5.5.

BẢNG 5.5. LƯỢNG XẢ CAO NHẤT CHO PHÉP (LXC) VÀ NỒNG ĐỘ CHO PHÉP (NDCP) CỦA CHẤT BẮN TRONG NƯỚC ĐÃ LÀM SẠCH

$G_{\text{COD}}^{\text{LXCP}}$ (gO ₂ /h)	$G_{\text{phenol}}^{\text{LXCP}}$ (g/h)	$G_{\text{SPAV}}^{\text{LXCP}}$ (g/h)	$G_{\text{glicol}}^{\text{LXCP}}$ (g/h)	x^{LXCP} (g/h)
668250	13,4	905,8	846,4	17968,5
$S_{\text{COD}}^{\text{NDCP}}$ (mgO ₂ /l)	$S_{\text{phenol}}^{\text{NDCP}}$ (mg/l)	$S_{\text{HDBM}}^{\text{NDCP}}$ (mg/l)	$S_{\text{glicol}}^{\text{NDCP}}$ (mg/l)	$x_{\text{otc}}^{\text{max}}$ (g/l)
90	0,009	0,61	0,57	11

Ràng buộc đối với lưu lượng không khí có dạng:

$$\sum_{i=1,2,3,5} \delta_i G_i \leq G^{\max}, \quad G_i \geq G^{\min}, \quad i = 1, 2, 3, 5$$

Giá trị các giới hạn đối với những ràng buộc áp đặt lên lưu lượng không khí được cho trong bảng 5.6.

BẢNG 5.6. LƯU LƯỢNG KHÔNG KHÍ TỐI THIỂU CẦN THIẾT ĐỂ BẢO ĐẢM KHUẤY TRỘN CHẤT LỎNG

Khối	1	2	3
$G^{\min}$, m ³ /h	8945	4400	8800

Các ràng buộc dạng bất đẳng thức áp đặt lên các tham số cấu trúc loại hai δ_i đối với đỉnh (bảng) 0 thì có dạng:

$$0 \leq \delta_i \leq 1; i = \overline{1, 5}.$$

Vì bài toán thực chất là chọn lấy một khối làm sạch sinh học và một phương pháp xử lý bùn dư, cho nên sẽ hợp lý nếu ta đưa thêm vào các đẳng thức phản ánh những điều kiện logic sau đây:

– Chọn một khối làm sạch sinh học:

$$\delta_1 + \delta_2 + \delta_3 = 1.$$

– Chọn một khối xử lý cặn:

$$\delta_4 + \delta_5 = 1.$$

Giải bài toán

Các đặc trưng dòng chảy của bài toán được nêu trong bảng 5.7.

BẢNG 5.7. CÁC ĐẶC TRƯNG DÒNG THẢI CẦN LÀM SẠCH

Dòng chảy	Lưu lượng thể tích (m ³ /h)	Nồng độ chất bẩn			
		COD (mgO ₂ /l)	Phenol (mg/l)	HĐBM (mg/l)	Glycol (mg/l)
Nước mưa	10	100	0,01	1,0	0,5
Nước sinh hoạt	150	259	0,1	0,5	0,0
Nước công nghiệp	535	845	7,3	14,1	250

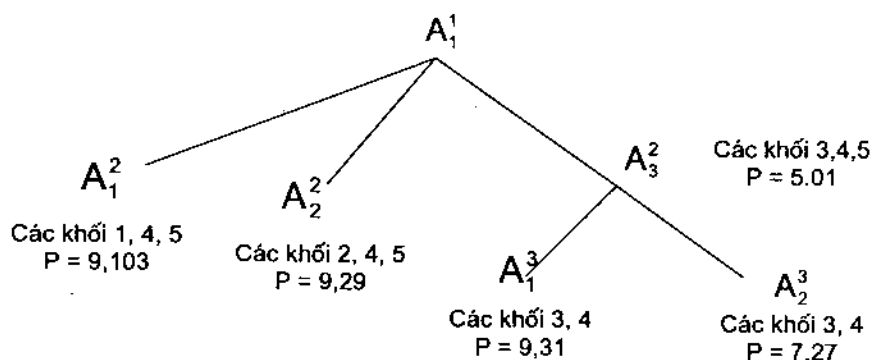
Cũng giống như bài toán tối ưu hoá tham số, ta chọn các dòng bùn hồi lưu tới đầu vào của các thiết bị sinh nhiệt làm dòng đứt đoạn quy ước.

Để tính toán sơ đồ công nghệ, áp dụng phương pháp Broiden tựa Niuton kết hợp với phương pháp lặp đơn giản.

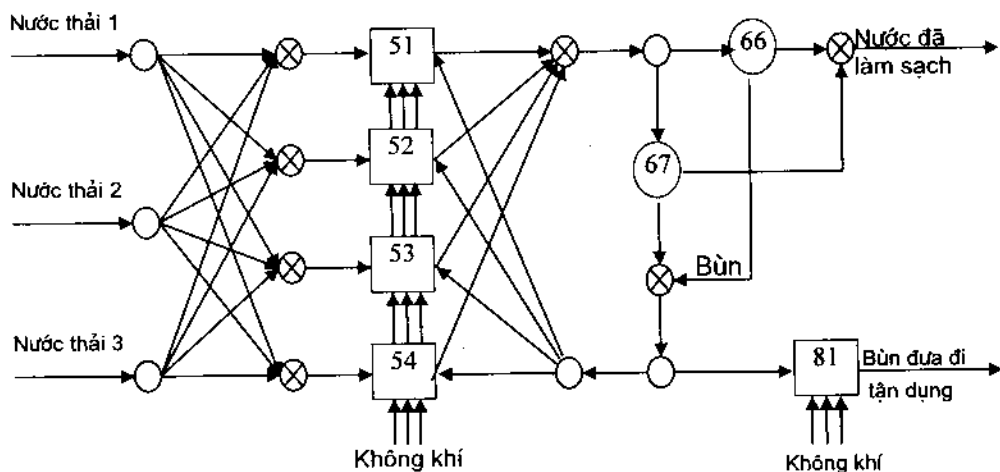
Việc giải bài toán tối ưu hoá tham số cấu trúc được tiến hành theo thuật toán của phương pháp nhánh và biên đã đề xuất ở mục 6.6.4. Việc phân nhánh được thực hiện theo sơ đồ trong hình 6.30, đã được dùng làm siêu cấu trúc.

Để ý đến cách đặt bài toán, ở đỉnh A_1^1 ta xây dựng cho nó 3 dòng xử lý mà mỗi hướng bao gồm một khối làm sạch sinh học và hai khối xử lý bùn dư. Do so sánh giới hạn dưới của các dòng nên ta chọn đỉnh A_3^2 làm ước lượng dưới nhỏ nhất. Tại đó lại xây dựng tiếp hai dòng, trong số chúng giới hạn dưới nhỏ nhất có đỉnh A_2^3 . Quá trình rẽ nhánh dừng ở đây. Đồ thị rẽ nhánh được trình bày trên hình 5.31.

Các đánh giá đối với tiêu chuẩn ở đỉnh được nêu trong bảng 5.8. Sơ đồ tối ưu hoá nhận được cho thiết bị làm sạch sinh học được vẽ trên hình 5.32.



Hình 5.31. Đồ thị phân nhánh của bài toán



Hình 5.32. Sơ đồ tối ưu của hệ thống BOSV

BẢNG 5.8. ƯỚC LƯỢNG CÁC ĐỈNH CỦA ĐỒ THỊ PHÂN NHÁNH TRONG BÀI TOÁN

Đỉnh	Giá trị các tham số cấu trúc loại hai					Ước lượng dưới
	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
A_1^2	1	0	0			9,103
A_2^2	0	1	0			9,291
A_3^2	0	0	1			5,01
A_1^3	0	0		1	0	9,31
A_2^3	0	0		0	1	7,27
Kết quả phân nhánh của đỉnh A_1^2						
	1	0	0	1	0	11,055
	1	0	0	0	1	9,23
Kết quả phân nhánh của đỉnh A_2^2						
	0	1	0	1	0	9,999
	0	1	0	0	1	9,292

Giá trị tiêu chuẩn $F = 7,27$ rúp quy ước/giờ.

Sự cấp nước thải là phân bố đều.

Lưu lượng không khí ở mỗi bể lọc sinh học cùng với thiết bị sinh nhiệt của bùn hoạt tính (tính bằng m^3/h) là:

$$G_{51} = 3300; G_{52} = 3300; G_{53} = 3300; G_{54} = 3300.$$

Phân dòng bùn đã lên chắt chảy trở lại hệ bằng 0,78.

Giá trị của các tham số cấu trúc γ_{ij} ở đỉnh tối ưu được cho trong các bảng 5.9, 5.10.

BẢNG 5.9. KẾT QUẢ GIẢI BÀI TOÁN TỐI ƯU HOÁ THAM SỐ CẤU TRÚC

PHÂN DÒNG NƯỚC THẢI TỚI CÁC THIẾT BỊ				
Dòng chảy	Số thứ tự bể lọc sinh học			
	51	52	53	54
Công nghiệp	0,25	0,25	0,25	0,25
Sinh hoạt	0,25	0,25	0,25	0,25
Nước mưa	0,25	0,25	0,25	0,25

BẢNG 5.10. CHẤT LƯỢNG LÀM SẠCH NHẬN ĐƯỢC THEO SƠ ĐỒ TỐI ƯU

LƯỢNG CHẤT BẮN TRONG NƯỚC THẢI ĐÃ LÀM SẠCH				
COD(gO_2/h)	Phenol (g/h)	Chất HDBM (g/h)	Glycol (g/h)	Các chất lơ lửng (g/h)
41680	6,05	326,65	236,30	6950
NỒNG ĐỘ CHẤT BẮN TRONG NƯỚC THẢI ĐÃ LÀM SẠCH				
COD _{lắng} (mgO_2/l)	Phenol (mg/l)	Chất HDBM (mg/l)	Glycol (mg/l)	Các chất vẩn (g/l)
60	0,0087	0,47	0,34	10

5.6.7.2. Phân tích sơ đồ tối ưu về độ ổn định cấu trúc

Sơ đồ tối ưu nhận được đã được phân tích về tính nhạy với sự thay đổi của các đặc trưng của nước thải đi tới khâu làm sạch; đồng thời người ta cũng tính được chế độ làm việc của sơ đồ nhận được khi bảo đảm chất lượng làm sạch theo yêu cầu với chi phí vận hành nhỏ nhất. Thí nghiệm tính toán bao gồm việc giải hai bài toán:

Bài toán 1: Tăng lưu lượng dòng chảy công nghiệp đi tới khâu làm sạch, khi nồng độ các chất bẩn trong nước thải không thay đổi.

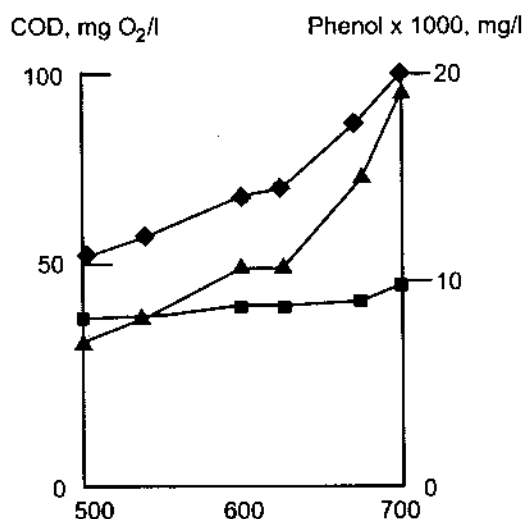
Bài toán 2: Tăng nồng độ các chất bẩn trong nước thải công nghiệp khi không thay đổi lưu lượng dòng chảy tới khâu làm sạch.

Mỗi một trong số hai bài toán này là một bài toán quy hoạch phi tuyến. Với tư cách là các biến tìm kiếm, ở mỗi giai đoạn ta lấy lưu lượng không khí tới từng bể lọc aeroten, thiết bị sinh nhiệt, thiết bị ổn định hiệu khí và phần dòng chảy trở lại hệ bùn đã lên chát.

Giải:

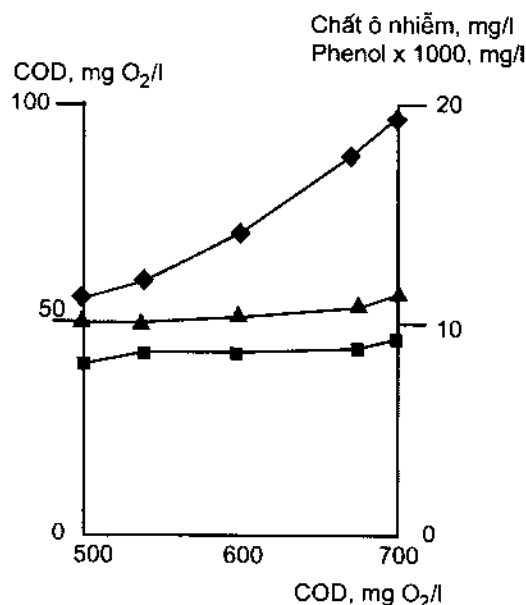
Bài toán 1. Lưu lượng nước thải công nghiệp biến thiên trong khoảng từ 500 đến 700 m³/h. Khi đó, thành phần nước thải vẫn không thay đổi (xem bảng 5.6). Trên hình 5.33 nêu đồ thị biến thiên chất lượng nước thải đã làm sạch, biểu diễn bằng COD, nồng độ phenol và chất rắn trong dòng chảy đã làm sạch. Từ các đồ thị đó suy ra

rằng, khi tăng lưu lượng nước thải thì trước tiên sẽ xảy ra sự phá vỡ nồng độ giới hạn chấp nhận được về chất rắn. Nếu tiếp tục tăng tải thì xảy ra sự phá vỡ NGC của phenol và tiếp theo là của COD. Do đó, nồng độ chất rắn đóng vai trò như một chỉ số chất lượng tới hạn. Có nghĩa là sơ đồ công nghệ BOSV tối ưu thu được là ổn định về mặt cấu trúc đối với sự tăng tải về mặt nước thải trong giới hạn 15,8% so với tải định mức (535 m³/h).



Hình 5.33. Ảnh hưởng của lưu lượng nước thải ở đầu vào khâu làm sạch

- ◆ - nồng độ nước thải tính bằng COD (mg O₂/l);
- ▲ - nồng độ chất rắn trong nước thải (mg/l);
- - nồng độ phenol trong nước thải (1000 mg/l).



Hình 5.34. Ảnh hưởng COD của nước ở đầu vào lên chất lượng làm sạch

(Các kí hiệu có ý nghĩa giống như trên hình 5.33)

Bài toán 2. Thay đổi nồng độ chỉ số nhiễm bẩn suy rộng của nước thải công nghiệp biểu diễn theo COD, trong giới hạn từ 800 tới 1000 mgO₂/l. Trong trường hợp này, các nồng độ giới hạn được phép sẽ bị phá vỡ đồng thời cả về COD lẫn về phenol (hình 5.34). Sơ đồ công nghệ sẽ ổn định về cấu trúc khi tăng mức độ nhiễm bẩn theo COD trong giới hạn 15,9% từ giá trị COD định mức là 845 mgO₂/l.

Các tính toán tương tự cũng đã được tiến hành khi thay đổi nồng độ phenol, chất HDBM, glicol. Kết quả được nêu trong bảng 5.13.

BẢNG 5.13. CÁC CHỈ SỐ GIỚI HẠN CỦA CHẤT LƯỢNG (CGC)

CHỈ SỐ KHẢ BIẾN CỦA NƯỚC THẢI	LƯU LƯỢNG	COD	PHENOL	HĐBM	GLYCOL
Tải giới hạn, % (LPK)	15,8 VV	15,9 phenol COD	14,5 phenol	16,1 HĐBM	18,0 glycol

Như vậy, thí nghiệm tính toán đã tiến hành cho thấy rằng, sơ đồ tối ưu thu được có tính ổn định cấu trúc khi thay đổi tải về lưu lượng và nồng độ chất bẩn trong nước thải trong giới hạn từ 15% đến 18% giá trị định mức.

Chương VI

GIÁM SÁT SỰ Ô NHIỄM MÔI TRƯỜNG NƯỚC DO NƯỚC THẢI

6.1. ĐÁNH GIÁ TÌNH TRẠNG CỦA MÔI TRƯỜNG ĐƯỢC GIÁM SÁT

Những yếu tố ảnh hưởng lên các quá trình hình thành chất lượng môi trường nước có liên quan đến hoạt động của con người và sự thay đổi của các điều kiện tự nhiên. Do có quá nhiều các yếu tố khách quan, các quá trình này mang tính chất ngẫu nhiên, do đó người ta đánh giá tình trạng của đối tượng bị giám sát không phải theo các kết quả đo nồng độ tạp chất riêng biệt mà theo hàm lượng trung bình của những tạp chất đó trong một thời gian xác định T , tức là đánh giá thông số được giám sát $x_p(t)$, $p = 1, \dots, m$ phải được thực hiện không phải theo những giá trị riêng rẽ rời rạc của hàm số ngẫu nhiên $x_p(t)$, mà theo giá trị tích phân của nó:

$$\bar{x}_p(t) = \frac{1}{T} \int_{t-\frac{T}{2}}^{t+\frac{T}{2}} x_p(t) dt, \quad p = 1 \dots, m \quad (6.1)$$

Trong đó: m – số lượng các tạp chất mà nồng độ của chúng được giám sát.

Biểu thức (6.1) đánh giá độ lệch của quá trình ngẫu nhiên theo hàm số ngẫu nhiên đã cho $x_p(t)$.

Có nhiều phương pháp tách độ lệch của những quá trình ngẫu nhiên không ổn định theo các giá trị rời rạc đó. Tính phức tạp của việc hoàn thiện những phương pháp này và độ chính xác của chúng mâu thuẫn với tính vụn vặt và tính giản đơn của việc thực hiện chúng. Phương pháp tách độ lệch của quá trình ô nhiễm không ổn định nhằm đánh giá tối ưu hiện trạng môi trường bằng một hệ thống giám sát tự động hoá, phải đạt được tính vụn vặt và tính đơn giản trong thực hành song vẫn bảo đảm được tính chính xác có thể chấp nhận được. Yêu cầu tính vụn vặt của phương pháp đó là yêu cầu tự nhiên đối với các sản phẩm được sản xuất hàng loạt, còn yêu cầu đơn giản trong thực hiện được thể hiện bằng hoạt động của hệ trong quy mô thời gian

thực. Xuất phát từ đó chúng ta hãy xem xét khả năng áp dụng một số phương pháp tương đối phổ biến nhằm bóc tách độ lệch của các chuỗi thời gian không ổn định và đánh giá chúng trên quan điểm tính vạn năng và đơn giản thực hiện trong khi vẫn đảm bảo tính chính xác của những kết quả thu được.

Phương pháp bình phương nhỏ nhất khi có nhiều sai lệch một cách dị thường của các giá trị tự do dẫn đến các kết quả sai. Đồng thời, một hàm số bất kì, chẳng hạn một thành phần của quá trình ô nhiễm môi trường nước, trong phạm vi hẹp có thể xấp xỉ bằng một đa thức bậc nhất. Khi đó, căn cứ vào tính chất của hàm số và độ chính xác yêu cầu của kết quả cần phải điều chỉnh độ dài của khoảng (bước). Phương pháp trung bình trượt tương đối phù hợp đối với phép xấp xỉ này. Khả năng áp dụng phương pháp trung bình trượt được trình bày dưới đây.

Những khảo sát đã tiến hành chỉ ra rằng, các quá trình ô nhiễm môi trường nước qua các thông số được giám sát có những sai số tuyến tính dù chỉ trong khoảng vài ngày; còn thành phần ngẫu nhiên hình thành "nhiều" ngẫu nhiên dải hẹp tuân theo quy luật chuẩn phân bố xác suất. Trên cơ sở đó có thể hình thức hoá bài toán.

Giả sử, $x_p(t)$ – giá trị đo được của thông số được giám sát p tại thời điểm ih_i ($p = 1, \dots, m$; $i = 1, \dots, N$); m – số thông số được giám sát. Biết rằng vectơ $x_p = (x_p(1), \dots, x_p(N))$ là vectơ phân bố ngẫu nhiên với ma trận hiệp biến (covariation) W_p và kì vọng toán $A_p^T = (a_p(1), \dots, a_p(N))$. Các phần tử của vectơ kì vọng toán học liên hệ với nhau một cách tuyến tính. Chúng ta vận dụng cấu trúc trung bình trượt:

$$a_p(i) = d_{p,0} - \left(\frac{N+1}{2} - i \right) d_{p,1}; \quad i = 1, \dots, N \quad (6.2)$$

Nhiệm vụ là tìm các ước lượng $\hat{d}_{p,0}$ và $\hat{d}_{p,1}$ trên cơ sở các số liệu đo được $x_p(1), \dots, x_p(N)$. Chúng tôi sử dụng phương pháp hợp lí tối đa bằng cách đưa vào những kí hiệu:

$$C_T = (C_1, \dots, C_N), \quad A_p^T = (d_{p,0}, \dots, d_{p,1}) = I^T d_{p,0},$$

Trong đó: $C = (N+1)/2 - i$; $i = 1, \dots, N$;

I – vectơ cột đơn vị kích thước N .

Trong số các kí hiệu được đưa vào, logarit hàm số hợp lí L được xác định với độ chính xác đến hằng số theo công thức:

$$\ln L_{\infty} = \frac{1}{2} (X_p - A_p)^T W_p^{-1} (X_p - A_p)$$

Các ước lượng hợp lí tối đa của đại lượng $\hat{d}_{p,0}$ và $\hat{d}_{p,1}$ được xác định bằng cách giải hệ phương trình:

$$\begin{cases} \frac{\partial \ln L}{\partial d_{p,0}} = X_p^T W_p^{-1} I - A_p^T W_p^{-1} = 0 \\ \frac{\partial \ln L}{\partial d_{p,1}} = -X_p^T W_p^{-1} C + A_p^T W_p^{-1} C = 0 \end{cases}$$

Hệ phương trình này được giải để tìm $\hat{d}_{p,0}$ và $\hat{d}_{p,1}$ như sau:

$$\hat{d}_{p,1} = \hat{d}_{p,0} \frac{I^T W_p^{-1} C}{C^T W_p^{-1} C} - \frac{X_p^T W_p^{-1} C}{C^T W_p^{-1} C} : \hat{d}_{p,0} = \frac{X_p^T W_p^{-1} I - \frac{X_p^T W_p^{-1} C}{C^T W_p^{-1} C} C^T W_p^{-1} I}{-\frac{I^T W_p^{-1} C}{C^T W_p^{-1} C} C^T W_p^{-1} I + I^T W_p^{-1} I} \quad (6.3)$$

Theo định lí Gauss – Markov, ước lượng nhận được bằng phương pháp bình phương nhỏ nhất (là tương ứng với ước lượng của phương pháp hợp lí tối đa ở mật độ phân bố chuẩn) là ước lượng không chệch với phương sai tối thiểu. Như vậy, hệ phương trình (6.3) có phương sai tối thiểu trong số các ước lượng không chệch.

Trên cơ sở phương trình (6.2) và hệ phương trình (6.3), ước lượng giá trị độ lệch của thông số giám sát thứ p tại thời điểm N_h , tức là ở thời điểm giám sát trạng thái môi trường nước, được tính theo hệ thức:

$$\hat{x}_p(N) = \hat{d}_{p,0} + \frac{N-1}{2} \hat{d}_{p,1} \quad (6.4)$$

Giá trị dự báo độ lệch của thông số giám sát thứ p trên các bước giám sát l rời rạc từ nay về sau được tính một cách tương ứng theo hệ thức:

$$\hat{x}_p(N+l) = \hat{d}_{p,0} + \frac{N+(2l-1)}{2} \hat{d}_{p,1}$$

Thật vậy, trong số các ước lượng $\hat{x}_p(i)$; $i = 1, \dots, N$ có phương sai nhỏ nhất là ước lượng $\hat{x}\left(\frac{N+1}{2}\right) = d_{p,0}$; ở đây N – số lẻ của các lần đo. Do đó các đại lượng ngẫu nhiên trung tâm, $x_p(j)$, $j = 1, 2, 3, \dots$ được sử dụng để tính các hàm số tự động và hàm số hiệp biến (covariation) tương hỗ của các chuỗi thời gian, được xác định theo tỉ số:

$$x_p(j) = \left[x_p\left(\frac{N+1}{2}\right) - \hat{x}_p\left(\frac{N+1}{2}\right) \right]_j, \quad j = 1, 2, \dots$$

Ở đây, j là số thứ tự xử lí các số đo thứ N từ một số chung đến thời điểm đã cho.

Sử dụng các ước lượng (6.3) trong các hệ tự động hoá kiểm soát trạng thái môi trường nước có liên quan đến những trở ngại nhất định.

Thứ nhất, cần biết ma trận covariation W_p , $p = 1, \dots, m$, việc đó đòi hỏi tiến hành những khảo sát sơ bộ các chuỗi thời gian trước khi khởi động hệ thống để tìm các ước lượng của những ma trận này.

Thứ hai, cần những chi phí đáng kể về vật chất và thời gian, điều đó không phải bao giờ cũng chấp nhận được.

Thứ ba, trở ngại thứ ba là trở ngại đáng kể nhất, trong các ước lượng (6.3) chứa thủ tục nghịch đảo của ma trận, điều đó thường dẫn đến việc các thuật toán không hoạt động khi xử lí số liệu của đối tượng nguyên bản. Để khắc phục những trở ngại nêu trên chúng tôi làm như sau: Giả sử, các số đo $x_p(i)$, $i = 1, \dots, N$ không tương quan, có nghĩa là các ma trận W_p là ma trận đường chéo. Dễ dàng nhận thấy rằng, trong trường hợp như vậy các ước lượng (6.3) có dạng:

$$\begin{aligned} \hat{d}_{p,0} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_p(i); \\ \hat{d}_{p,l} &= \frac{12}{N(N^2-1)} \sum_{i=1}^N \left(i - \frac{N+1}{2} \right) x_p(i) \end{aligned} \quad (6.5)$$

Ước lượng (6.5) là những ước lượng không chệch với phương sai nhỏ nhất của các thông số tương ứng khi không có các covariation giữa các phép

do của các thông số cùng một lúc. Với giá trị đã biết của một trong số các đại lượng ($d_{p,0}$ hoặc $d_{p,1}$) phương sai biên tối thiểu theo biểu thức (6.5) ước lượng cho một thông số.

Dùng tích mẫu các phép đo N trên cơ sở khảo sát thực nghiệm từng đối tượng bị giám sát xuất phát từ hệ thức:

$$D(x_p(N)) = \frac{D(x_p(N))}{N-2} = \frac{\sigma_p^2}{N-2}$$

Hệ thức này có được nhờ tính đúng của giả thiết về độ tuyến tính của sai số trong khoảng thời gian xem xét và từ tính xác thực chấp nhận lời giải bài toán về tình trạng môi trường nước trên cơ sở $\hat{x}_p(N)$. Ở đây, σ_p^2 là phương sai của một phép đo thông số được giám sát p . Trong bảng 6.1 đưa ra kết quả sử dụng các ước lượng (6.3) và (6.5) để tách độ lệch tuyến tính theo các số liệu thực nhận được theo sự ô nhiễm của một con sông. Các tính toán được thực hiện đối với $N = 5, 7, 9$. Chất lượng làm việc của các thuật toán đã được đánh giá bằng tổng bình phương độ lệch được tiêu chuẩn hoá của các số liệu đo được từ các độ lệch được tách (ở $n = 50$):

$$\rho_p^2 = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n [x_p(i)]^2$$

Trên cơ sở những số liệu hiện có chúng tôi kết luận: Các kết quả nhận được theo mô hình (6.3) không đến mức tốt hơn các kết quả thu được theo mô hình (6.5), đủ để dung hoà sự phức tạp khi thực hiện và thời gian làm việc của máy tính khi áp dụng mô hình (6.3).

Khi tách các độ lệch của mô hình gồm 12 thông số được quan sát dựa trên cơ sở các ước lượng (6.3) thì mô hình “làm việc” khoảng 5 đến 6 lần chậm hơn mô hình dựa trên các ước lượng (6.5). Đồng thời, bộ nhớ thuật toán cần thiết để thực hiện mô hình (6.3) khoảng 2 lần lớn hơn so với bộ nhớ cần phải có đối với mô hình (6.5). Sự vượt trội của tổng số các bình phương độ lệch đối với mô hình (6.3) ở giá trị không lớn của độ lệch của quá trình (dòng thứ hai trong bảng 6.1) được giải thích như sau: Trong tính toán sử dụng giá trị không chính xác của ma trận covariation W_p và ước lượng của nó. Sai số của ước lượng của ma trận covariation kéo theo sai số tương đối lớn khi tách độ lệch không lớn theo giá trị tuyệt đối của chuỗi thời gian.

BẢNG 6.1. SỐ LIỆU SO SÁNH CỦA CÁC ĐỘ LỆCH TUYẾN TÍNH DỌC THEO SÔNG

ρ_1^2 với N = 5	ρ_1^2 với N = 7	ρ_1^2 với N = 9
0,041203 / 0,044033	0,066433 / 0,065077	0,075127 / 0,084673
0,00135 / 0,000068	1,398750 / 0,000088	0,004245 / 0,000091
0,139832 / 0,165129	0,158416 / 0,177840	0,168426 / 0,359671
0,271215 / 0,320923	0,310514 / 0,347523	0,323349 / 0,359671
0,051696 / 0,057596	0,059127 / 0,063913	0,065096 / 0,070894
0,002246 / 0,002351	0,002844 / 0,003352	0,002935 / 0,003682
0,123240 / 0,155617	0,169995 / 0,191906	0,174761 / 0,196909
0,977676 / 1,189959	0,366807 / 0,401060	0,482023 / 0,506096
1,753221 / 1,915817	1,939037 / 2,183129	2,118587 / 2,3214443
4,577705 / 5,438052	0,017511 / 0,018520	0,026807 / 0,022936
11,815250 / 14,175118	14,695220 / 16,593079	16,326172 / 18,519470
0,012643 / 0,014280	0,019045 / 0,020053	0,023725 / 0,024632

Ghi chú: Tử số – số liệu theo mô hình tối ưu; Mẫu số – theo mô hình trung bình trượt.

So sánh các kết quả mô hình hoá ở những N khác nhau cho thấy, trong trường hợp đó để tính các độ lệch mẫu từ 5 lần đo cho kết quả tốt nhất.

Để xác định đối tượng tối ưu của mẫu đo N được sử dụng khi tách độ lệch tuyến tính cũng như để phát hiện các sai số của chuỗi thời gian giám sát, để phân loại chất lượng của đối tượng môi trường nước và để tính độ tin cậy của lời giải nhận được đối với trạng thái của môi trường nước, đòi hỏi phải tính các ma trận phương sai của các vector giá trị hiện tại của độ lệch thuộc chuỗi thời gian của các thông số được giám sát và các dự báo của chúng trên một và hai bước về phía trước.

Chú ý tới các phương trình (6.4) và (6.5) ta xác định hệ số covariation giữa các ước lượng $\hat{x}_p(N)$ và $\hat{x}_i(N)$:

$$r_{p,i}(\hat{x}_p(N), \hat{x}_i(N)) = Mx \left[\frac{1}{N} \sum_{j=\frac{1}{2}(N+1)}^{\frac{1}{2}(N-1)} \dot{x}_p(N_1 + i) + \frac{6}{N(N+1)} \sum_{j=\frac{1}{2}(N+1)}^{\frac{1}{2}(N-1)} i \dot{x}_p(N_1 + i) \right] \times$$

$$\times \left[\frac{1}{N} \sum_{j=\frac{1}{2}(N+1)}^{\frac{1}{2}(N-1)} \dot{x}_i(N + j) + \frac{6}{N(N+1)} \sum_{j=\frac{1}{2}(N+1)}^{\frac{1}{2}(N-1)} i \dot{x}_i(N_1 + j) \right]$$

Trong đó:

M – dấu của kì vọng toán;

$\dot{x}_p(N_1 + i), \dot{x}_z(N_1 + j)$ – giá trị trung tâm của các đại lượng tương ứng;

$$N_1 = (N + 1)/2.$$

Sau những biến đổi đơn giản ta có:

$$\begin{aligned} r_{p,t} = & \sum_{j=\frac{N+1}{2}}^{\frac{1}{2}(N-1)} \sum_{j>1} A(i, j) R_{p,t}(j-i) + \sum_{i=\frac{1}{2}(N+1)}^{\frac{1}{2}(N-1)} \sum_{j<1} A(i, j) R_{p,t}(i-j) + \\ & + R_{p,t}(0) \sum_{j=\frac{1}{2}(N+1)}^{\frac{1}{2}(N-1)} A(i, i); \quad p, t = 1, m \end{aligned} \quad (6.6)$$

Ở đây, $R_{p,t}(i), i = 0, 1, \dots, N-1$ hàm covariation tương hỗ của các thông số p và t.

$$A(i, j) = \frac{1}{N^2} + \frac{6(i+j)}{N^2(N+1)} + \frac{36ij}{N^2(N+1)^2}$$

Các hệ số tương quan tương ứng được tính theo các hệ thức:

$$\mu_{p,t} = \frac{r_{p,t}}{\sigma_{\hat{x}_p(N)} \sigma_{\hat{x}_t(N)}}; \quad p, t = 1, \dots, n \quad p \neq 1$$

$$\text{Ở đây: } \sigma_{\hat{x}_p(N)}^2 = r_{p,p}; \quad \sigma_{\hat{x}_t(N)}^2 = r_{t,t}$$

Tương tự, các phần tử của ma trận covariation đối với các giá trị được dự báo của các thông số được tính trên một bước gián đoạn về phía trước.

$$\begin{aligned} r_{pt}^1 \left[\left(\hat{x}_p(N+1), \hat{x}_t(N+1) \right) \right] = & \frac{1}{\sigma_{\hat{x}_p(N+1)} \sigma_{\hat{x}_t(N+1)}} \times \\ \times & \left\{ \sum_{i=\frac{1}{2}(-N+1)}^{\frac{1}{2}(N-1)} \sum_{j>1} A1(i, j) R_{p,t}(j-i) + \sum_{i=\frac{1}{2}(-N+1)}^{\frac{1}{2}(N-1)} \sum_{j<1} A1(i, j) R_{p,t}(i-j) + \right. \\ & \left. + R_{p,t}(0) \sum_{i=\frac{1}{2}(-N+1)}^{\frac{1}{2}(N-1)} A1(i, -j) \right\}; \quad p, t = 1, \dots, m \quad p \neq 1 \end{aligned} \quad (6.7)$$

Ở đây:

$$\sigma_{x_p(N-1)}^2 = 2 \sum_{i=\frac{1}{2}(-N+1)}^{\frac{1}{2}(N-1)} \sum_{j>i} A1(i, j) R_{pp}(j-i) + R_{pp}(0) \sum_{i=\frac{1}{2}(-N+1)}^{\frac{1}{2}(N-1)} A1(i, j)$$

$$p = 1, \dots, m$$

$$A1(i, j) = \frac{1}{N^2} + \frac{6(i+j)}{N^2(N-1)} + \frac{36ij}{N^2(N-1)^2}$$

Khi dự báo trên hai bước về phía trước trong các biểu thức (6.6) và (6.7) có các hệ số $A_2(i, j)$ tham gia:

$$A2(i, j) = \frac{1}{N^2} + \frac{6(N+3)(i+j)}{N^2(N^2-1)} + \frac{36(N+3)^2 ij}{N^2(N^2-1)^2}$$

Một cách tương tự, ta có được biểu thức để tính ma trận covariation của vectơ ước lượng:

$$\hat{X}^1(N) = \left[\hat{X}_1(N), \dots, \hat{X}_m(N) \right]$$

Biểu thức này nhận được từ mô hình (6.3), nhưng trong trường hợp này các biểu thức tương ứng trở nên rất cồng kềnh và không thuận tiện khi vận dụng vào thực tiễn.

6.2. MÔ HÌNH HOÁ TOÁN HỌC SỰ LAN TRUYỀN TẠP CHẤT TRONG CÁC MÔI TRƯỜNG NƯỚC

Các thông số lí hoá đặc trưng cho trạng thái của đối tượng nước thay đổi liên tục theo thời gian dưới sự tác động của các điều kiện nhân chủng học, điều kiện thuỷ văn và thuỷ sinh học tự nhiên, cũng như các yếu tố hình thành dòng chảy. Quá trình ngẫu nhiên không ổn định của những thay đổi đó có thể mô tả bằng phương trình:

$$S_p(t) = m_s^p(t) + x_p(t), \quad p = 1, \dots, m$$

Trong đó:

$S_p(t)$ – giá trị của thông số được giám sát p ;

m_s^p – thành phần xác định của quá trình;

$x_p(t)$ – thành phần ngẫu nhiên; m – số lượng các thông số được giám sát.

Vì vậy, có thể chia bài toán xác định các mô hình toán lan truyền tạp chất trong các đối tượng nước ra làm hai bộ phận:

1. Nghiên cứu mô hình mô tả thành phần xác định;
2. Nghiên cứu mô hình mô tả thành phần ngẫu nhiên.

Các mô hình khuếch tán và thống kê đưa ra dưới đây tương đương với các mô hình thành phần xác định và ngẫu nhiên.

6.2.1. Các mô hình khuếch tán và thống kê của sự lan truyền tạp chất trong các đối tượng nước

Mô hình hoá ô nhiễm nước tự nhiên – là một bài toán khá phức tạp. Điều đó được thể hiện bởi nhiều yếu tố ảnh hưởng lên quá trình gây ô nhiễm và sự đa dạng của ô nhiễm. Ở đây chỉ giới hạn xem xét một số mô hình mô tả các quá trình chuyển dời và pha loãng các chất độc hại cũng như quá trình tự làm sạch của các đối tượng nước trong khoảng thời gian tương đối ngắn.

Sự lan truyền các chất gây ô nhiễm trong dòng nước được mô tả một cách đầy đủ nhất bằng phương trình khuếch tán rối ba chiều của các chất:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial S}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial S}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial S}{\partial z} \right) - V \frac{\partial S}{\partial x} - KS \quad (6.8)$$

Trong đó:

S – nồng độ chất gây ô nhiễm;

t – thời gian;

x, y, z – tọa độ không gian;

K_x, K_y, K_z – hệ số khuếch tán rối theo hướng các trục x, y, z ;

V – tốc độ dòng chảy;

K – hệ số phi bảo toàn.

Trong trường hợp tổng quát các hệ số K_x, K_y, K_z, K và V là các hàm số của tọa độ không gian và thời gian.

Giải phương trình (6.8) theo các nồng độ $S(x, y, z, t)$ tương đối khó. Vì vậy, căn cứ vào các điều kiện xả nước thải, các đặc điểm của dòng nước và mục đích để xây dựng mô hình toán học, người ta đã biến đổi phương trình

(6.8) khuếch tán rối ba chiều thành phương trình khuếch tán hai hoặc một chiều. Giải các phương trình này được thực hiện bằng các phương pháp số hoặc giải tích.

Trong trường hợp dọc theo bờ sông các nguồn thải hoạt động liên tục, nồng độ các chất thải được lan truyền không đồng đều theo dòng chảy. Bỏ qua sự phân bố không đồng đều theo chiều sâu của dòng chảy, từ phương trình (6.8) có thể chuyển sang phương trình khuếch tán rối hai chiều.

$$\frac{\partial S}{\partial t} = K_x \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} - V \frac{\partial S}{\partial x} - KS + f \quad (6.9)$$

Trong đó: f – cường độ xả của nguồn ô nhiễm.

Bằng cách giải phương trình (6.9) xác định được sự phân bố nồng độ chất theo chiều dài và chiều rộng của dòng chảy có tính đến sự không đồng đều của phân bố đó. Giải bài toán được thực hiện bằng các phương pháp số của mạng lưới với bước chuyển sang sơ đồ sai phân tương ứng. Trường hợp khi phân bố nồng độ chất theo tiết diện của dòng chảy gần với sự phân bố đều, hay các chỉ số ô nhiễm trung bình của dòng chảy là mối quan tâm thì người ta sử dụng phương trình khuếch tán rối một chiều, trong trường hợp tổng quát có dạng:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = K_x \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} - V \frac{\partial S}{\partial x} - KS + f(x,t) \quad (6.10)$$

Ở đây, $f(x, t)$ là hàm số của các nguồn chất gây ô nhiễm trong dòng nước.

Giả sử, nồng độ chất không đổi trong mặt cắt, có nghĩa là $\partial S / \partial y = \partial S / \partial z = 0$, hệ số khuếch tán rối theo chiều dọc K_x là không đổi, tốc độ dòng chảy và hệ số phi bảo toàn K là những đại lượng không đổi.

Phương trình (6.10) được giải với những điều kiện ban đầu và điều kiện biên có tính đến sự hình thành chất lượng dòng nước. Ở nguồn điểm tức thời của khối lượng đơn vị chất gây ô nhiễm hệ thức $f(x, t) = \frac{\delta(x)\delta(t)}{\omega}$ là đúng. Ở

đây, ω là diện tích mặt cắt thật của hàm δ . Ở điều kiện ban đầu thứ nhất $S(x, 0) = 0$, lời giải phương trình (6.10) có dạng:

$$S(x, t) = \frac{1}{2\omega\sqrt{\pi K_x t}} e^{-\frac{(x-Vt)^2}{4Dt}}$$

Tính đúng đắn của biểu thức trên đối với các sông nhỏ, kênh rạch đã được chứng minh bằng thực nghiệm.

Ở những điều kiện ban đầu và điều kiện biên:

$$S(x, 0) = \zeta(x); \quad S(0, t) = f(t); \quad x \in [0, \infty)$$

lời giải phương trình (6.10) có dạng:

$$S(x, t) = U(x, t) e^{\mu x - \lambda t}$$

$$\text{Ở đây: } \mu = \frac{V}{2a^2}; \quad \lambda = \frac{V^2}{4a^2} + K; \quad a^2 = K_x; \quad U(x, t) = W(x, t) + W_0(x, t)$$

$$W(x, t) = \frac{x}{2a\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{\psi(t-\tau) \exp\left(-\frac{x^2}{4a^2\tau}\right)}{\tau^{3/2}} d\tau$$

$$W_0(x, t) = \frac{x}{2a\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \varphi(\theta) \left[\exp\left(-\frac{(\theta-x)^2}{4a^2t}\right) - \exp\left(-\frac{(\theta+x)^2}{4a^2t}\right) \right] d\theta$$

$$\varphi(x) = \zeta(x) \exp(-\mu x); \quad \varphi(t) = f(t) \exp(\lambda t)$$

Ở các điều kiện ban đầu và điều kiện biên:

$$S(X, t_0) = \varphi(X); \quad S(x_0, t) = \eta(t); \quad f(X, t) = \sum_{i=1}^k a_i(t) \delta(X - X_i);$$

$$X_i \in \tau_x, \quad x \in [x_0, \infty]; \quad t > t_0.$$

có nghĩa là khi K – nguồn gây ô nhiễm độc lập tác động lên đối tượng nước nằm ở các điểm không gian x_i của khu vực được giám sát thuộc đối tượng nước J_x với cường độ ô nhiễm $a_i(t)$ ($t = 1, \dots, k$), lời giải phương trình (6.10) có dạng:

$$S(X, t_0) = S_1(X, t) + S_2(X, t) + S_3(X, t);$$

$$S_1(X, t) = \sum_{i=1}^k \int_{t_0}^t g_a(x, x_i, t, \tau) a_i(\tau) d\tau;$$

$$S_2(X, t) = \int_{t_0}^t g_\eta(X, x_0, t, \tau) \eta(\tau) d\tau;$$

$$S_3(X, t) = \int_{x_0}^\infty g_\varphi(X, x, t, t_0) \varphi(x) dx$$

Ở đây, hàm số ảnh hưởng của nguồn thứ i là $a_i(t)$:

$$g_a(X, x_i, t, \tau) = \frac{1}{2\sqrt{K_x}\pi(t-\tau)} \exp[\mu(X-x_i)\lambda(t-\tau)] \times \\ \times \left\{ \exp\left[-\frac{(X-x_i)^2}{4K_x(t-\tau)}\right] - \exp\left[-\frac{(X+x)^2}{4K_x(t-\tau)}\right] \right\}$$

Hàm số ảnh hưởng của điều kiện biên $\eta(t)$:

$$g_\eta(X, x_0, t, \tau) = \frac{(X-X_0)}{2\sqrt{K_x}\pi(t-\tau)^3} \exp\left[\mu(X-x_0)\lambda(t-\tau)\frac{(X-x_0)^2}{4K_x(t-\tau)}\right]$$

Hàm số ảnh hưởng của phân bố ban đầu $\varphi(x)$; $\mu = v/2K_x$; $\lambda = K + v^2/4K_x$;

$$g_\psi(X, x, t, t_0) = \frac{1}{2\sqrt{K_x}\pi(t-t_0)} \exp[\mu(X-x)\lambda(t-t_0)] \times \\ \times \left\{ \exp\left[-\frac{(X-x)^2}{4K_x(t-t_0)}\right] - \exp\left[-\frac{(X+x)^2}{4K(t-t_0)}\right] \right\}$$

Ta sẽ tiến hành phân tích so sánh lời giải của phương trình khuếch tán rối một và hai chiều của các chất không bảo toàn ở các giá trị không đổi của các thông số dòng, của các hệ số khuếch tán rối và của tính phi bảo toàn. Với sự xấp xỉ từng đoạn của hàm $f(t)$, $X = 0$ và điều kiện có tính giới hạn của hàm số $S(X, t)$, đối với những giá trị tương đối lớn X , phương trình (6.10) có thể được giải như sau:

$$S(X, t_m) = \frac{1}{2} \sum_{i=\ell}^{m-1} f_{i-\ell} [(Q_{m-i+1} - Q_{m-i}) + (R_{m-i+1} - R_{m-i})], \quad (6.11)$$

Ở đây, $f_i(f(t_i))$, $t_i = i\Delta t$, $i = 1, \dots, m$ Δt bước chia nhỏ trục thời gian.

$$Q_j = \exp\left(\frac{V-V_0}{2K_x}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{X-j\Delta t V_0}{2\sqrt{K_x j \Delta t}}\right); \quad (6.12)$$

$$R_j = \exp\left(\frac{V+V_0}{2K_x}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x+j\Delta t V_0}{2\sqrt{K_x j \Delta t}}\right); \quad (6.13)$$

$$V_0 = \sqrt{V^2 + 4K_x}$$

Đối với trường hợp đơn giản hơn của một đơn vị xả không đổi, biểu thức (6.11) được đơn giản hoá, có tính đến (6.12) và (6.13), có dạng:

$$S_0(X, t) = \frac{1}{2} [G(X, t, V_0) + G(X, t - V_0)] \quad (6.14)$$

Trong đó: $\sigma(X, t, \zeta) = \exp \left[\frac{(V + \varepsilon)x}{2K_x} \right] \operatorname{erfc} \frac{x + \tau\zeta}{2\sqrt{K_x t}}$

Đại lượng V_0 được xác định bằng hệ thức (6.13).

Mô hình một chiều khuếch tán rối của các chất không bảo toàn mô tả một cách thoả đáng quá trình tự làm sạch và lan truyền các chất gây ô nhiễm trong dòng chảy nhỏ với tốc độ chảy không lớn; hơn nữa các lời giải nhận được trên cơ sở mô hình này có thể chấp nhận được trên những đoạn nằm ở phía dưới một tuyến định hướng nào đó gọi là tuyến định hướng trộn toàn bộ. Nhưng để giải phần lớn các bài toán đánh giá chất lượng nước, điều kiện sử dụng của mô hình một chiều là chưa đủ. Do đó xuất hiện sự cần thiết nghiên cứu đánh giá về lượng cho phép xác định các giới hạn tác động của mô hình khuếch tán rối một chiều căn cứ vào giá trị các thông số dòng chảy, các đặc điểm của chất gây ô nhiễm và cách xả nước thải. Để giải bài toán này chúng ta hãy xem xét một cách chi tiết hơn phương trình khuếch tán rối hai chiều (6.9).

Áp dụng các điều kiện đầu không, tức là $S(x, y, 0) = 0$ với các điều kiện biên như sau:

$$\left. \frac{\partial S}{\partial y} \right|_{y=0, y=H} = 0 \quad (6.15)$$

$$\left. \frac{\partial S}{\partial x} \right|_{x=\infty} = 0 \quad (6.16)$$

Trong đó: H – bề rộng dòng chảy.

Giả sử, nguồn gây ô nhiễm đặt ở góc toạ độ, còn cường độ xả thay đổi theo quy luật $f(t)$ và yếu dần theo chiều rộng của dòng chảy theo quy luật số mũ, tức là:

$$S(0, y, t) = f(t) \exp(-\beta y); \beta \leq 0; 0 \leq y \leq H \quad (6.17)$$

Nếu đưa vào tọa độ không thử nguyên $\eta = (\pi/H)y$ và hàm cần tìm mới $U(x, \eta, t) = S(x, \eta, t) \exp(kt)$ thì hệ phương trình (6.9), (6.15) và (6.16) được chuyển đổi thành dạng:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + b^2 \frac{\partial^2 U}{\partial \eta^2} - V \frac{\partial U}{\partial x}; \quad U(x, \eta, 0) = 0 \quad \left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{x=\infty} = 0 \quad (6.18)$$

$$U(0, \eta, t) = f(t) \exp(-a\eta + Kt), \quad \left. \frac{\partial U}{\partial \eta} \right|_{\eta=0, \pi} = 0 \quad (6.19)$$

Ở đây, $a^2 = K_x$; $b^2 = (\pi^2/H^2)K_y$; $\alpha = (H/\pi)\beta$.

Để đơn giản hoá sự tính toán, về sau ta giới hạn ở trường hợp xả cố định của cường độ đơn vị, tức là chúng ta xem xét lời giải của hệ (6.18) khi $f(t) = 1$. Nhờ áp dụng một cách tuần tự biến η vào hệ phép biến đổi cosin hữu hạn Fourier theo biến η :

$$F(X, p, t) = F_0[U(X, \eta, t)] = \int_0^x U(X, \eta, t) \cos p\eta dx \quad (6.20)$$

Thế $\bar{F} = F \exp(\lambda X + \mu t)$, $\lambda = V/(2a^2)$; $\mu = b^2 p^2 - V^2/(4a^2)$ và biến đổi Laplace theo t ta được:

$$\bar{F}(X, p, \xi) = L[\bar{F}(X, p, t)] = \int_0^\infty F(x, p, t) \exp(-\xi t) dt$$

Chúng ta được hệ sau:

$$a^2 \frac{\partial^2 \bar{F}}{\partial x^2} - \xi \bar{F} = 0; \quad \left(\frac{\partial \bar{F}}{\partial x} + \lambda \bar{F} \right) \bigg|_{x=\infty} = 0;$$

$$F(0, p, \xi) = \frac{1 - (-1)^p \exp(-2\pi)}{p^2 + \alpha^2} \cdot \frac{\alpha}{\xi - (k - \mu)}.$$

Giải hệ này ta có:

$$\bar{F}(x, p, \xi) = \frac{\alpha}{\xi - (k - \mu)} \cdot \frac{1 - (-1)^p \exp(-\alpha\pi)}{a^2 + p^2} \exp\left(-\frac{\sqrt{\xi}}{\alpha} x\right)$$

Đồng thời, áp dụng một cách tuần tự phép biến đổi ngược Laplace, hệ thức (6.20), phép biến đổi ngược Fourier vào biểu thức này, đồng thời tính tới $S(x, \eta, t) = U(x, \eta, t) \exp(-Kt)$ và chú ý đến (6.19). Giải các hệ phương trình (6.9) và (6.15) và (6.18) ta có:

$$S(x, y, t) = \frac{1 - \exp(-\beta H)}{\beta H} S_0(x, t) + \beta H \Sigma \frac{1 - (l)^p \exp(-\beta H)}{(\beta H)^2 + (\pi p)^2} \times \\ \times [G(x, t, V_p) + G(x, t, -V_p) \cos\left(\frac{\pi}{H} p_y\right)]; \quad (6.21)$$

$$V_p = \sqrt{V^2 + 4K_x \left(\frac{\pi}{H} p\right)^2 + K_y + K}; \quad (6.22)$$

$S_0(x, t)$ và $G(x, t, \xi)$ được xác định theo (6.14).

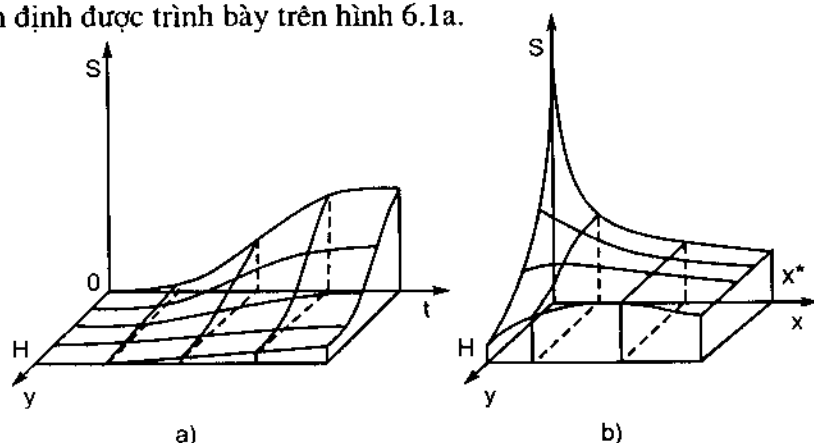
Từ điều kiện (6.17), chú ý đến trường hợp khi thông số xả $\beta = 0$, phù hợp với sự xả đồng đều chất gây ô nhiễm theo chiều rộng của dòng chảy. Khi đó, lời giải của phương trình khuếch tán rối hai chiều (6.21) trùng hợp với lời giải của bài toán một chiều, vì:

$$S(x, y, t)|_{\beta=0} = S_0(x, t),$$

Ở đây, $S_0(x, t)$ – lời giải phương trình khuếch tán rối một chiều (6.14).

Phân tích hệ phương trình (6.21) cho thấy, ở giá trị ấn định của tỉ số y/H việc tăng chiều rộng của dòng chảy H lên n lần đồng nghĩa với giảm hệ số K_y xuống n^2 lần.

Dạng đặc trưng của hàm số $S(x, y, t)$ có được theo công thức (5.21) ở giá trị x ấn định được trình bày trên hình 6.1a.



Hình 6.1. Dạng đồ thị nồng độ $S = S(x, y, t)$
a) ở trị số ấn định tọa độ dọc x ; b) ở chế độ $t = 0$

Phân tích chi tiết công thức (6.21) trên máy tính cho phép đưa ra các kết luận sau:

1. Sự gia tăng β dẫn đến làm tăng tính không đồng nhất $S(x, y, t)$ theo chiều rộng của dòng chảy; tức là đại lượng:

$$\Delta S = [S(x, 0, t) - S(x, H, t)] / S(x, 0, t) \quad (6.23)$$

tăng với việc tăng giá trị β

2. Sự tăng toạ độ x , ngược lại dẫn đến làm giảm ΔS ; bắt đầu từ giá trị x^* nào đó, đại lượng ΔS thực tế bằng 0, tức là hướng tuyến tính cách vị trí xả khoảng cách x^* là hướng tuyến tính trộn hoàn toàn.

3. Đại lượng x^* là biên tác động của mô hình hai chiều, phụ thuộc vào giá trị của thông số xả β , tốc độ V , chiều rộng H , hệ số K_x và thực tế không phụ thuộc vào hệ số phi bảo toàn K .

Để làm sáng tỏ sự phụ thuộc của x^* vào các thông số β , V , H và K_x , trạng thái ổn định của quá trình lan truyền chất gây ô nhiễm đã được xem xét cùng với hàm số xả đơn vị, có nghĩa là khi $t = \infty$. Khi đó, biểu thức của S_0 và S được xác định theo công thức (6.14) và (6.21), rút gọn và có dạng tương ứng:

$$S_0 = S(x) = \frac{1}{2} E(x, V_0) \quad (6.24)$$

$$S = S(x, y) = \gamma S_0(x) + \beta H \sum_{p=1}^{\infty} C_p E(x, V_p) \cos\left(\frac{\pi y}{H} p\right) \quad (6.25)$$

$$\text{Ở đây: } \gamma = [1 - \exp(-\beta H)] / \beta H; \quad (6.26)$$

$$E(x, V_p) = \exp\left[\frac{(V - V_p)x}{2Kx}\right]; \quad (6.27)$$

$$C_p = [1 - (1)^p \exp(-\beta H)] / [(\beta H)^2 + (\pi p)^2] \quad (6.28)$$

V_p được xác định bằng hệ thức (6.22); $p = 0, 1, 2, 3, \dots$

Dạng đặc trưng của hàm $S(x, y)$ xác định bởi công thức (6.25), được trình bày trên hình 6.1b.

Đại lượng x đã được xác định như là giá trị tối thiểu của tọa độ x mà bắt đầu từ đó sai số tương đối ΔS ở (6.23) sẽ không vượt quá 5%.

$$[S(x, 0) - S(x, H)] / S(x, 0) < 0,05 \quad (6.29)$$

Ở đây, $S(x, 0)$ và $S(x, H)$ đã xác định, phù hợp với (6.25), từ hệ thức:

$$S(x, 0) = \gamma S_0 + \beta H \sum_{p=1}^{\infty} C_p E(x, V_p);$$

$$S(x, H) = \gamma S_0 + \beta H \sum_{p=1}^{\infty} (-1)^p C_p E(x, V_p);$$

S_0 – theo công thức (6.24); γ , E , C_p – theo các công thức (6.26) đến (6.28).

Điều kiện (6.29) được sử dụng để tìm x^* , có thể hình dung dưới dạng

$$39\sigma_1 - \sigma_2 < \gamma S_0 \quad (6.30)$$

Ở đây: $\sigma_1 = \beta H \sum_{l=1}^{\infty} C_{2l-1} E(x, V_{2l-1}); \sigma_2 = \beta H \sum_{l=1}^{\infty} C_{2l} E(x, V_{2l})$

Phân tích các trị số x^* (km) thu thập được bằng máy tính điện tử từ điều kiện (6.30) ở những giá trị khác nhau của các thông số V (km/h), K_x (km²/h), H (km) và β , cho phép thiết lập sự phụ thuộc sau:

$$x^* = \varphi(K_x) V \tilde{H}^2 [1 = \exp(-\beta H)] \quad (6.31)$$

Ở đây, $\varphi(K_x)$ là hàm số gần như tuyến tính đối với biến K_x ; $\tilde{H}$ – giá trị quy đổi của chiều rộng dòng chảy, được xác định bằng hệ thức:

$$\tilde{H} = 0,06H / \sqrt{K_y}$$

Việc tuyến tính hoá hàm $\varphi(K_x)$ cho phép dùng công thức (6.31) để tìm biên tác động của mô hình hai chiều dưới dạng:

$$x^* = (1,55 K_x + 0,44) V H^2 \frac{1}{K_y} \left[1 - \exp \left(-\beta \frac{0,06}{\sqrt{K_y}} H \right) \right]$$

Trong những trường hợp khi xả chất ô nhiễm tập trung chủ yếu theo bề rộng, tức là giá trị β tương đối lớn, để tìm x^* có thể sử dụng công thức đơn giản hơn:

$$x^* \approx 0,45V (1/K_y) H^2$$

Công thức này có thể sử dụng để nhận ước lượng trên cùng của giá trị x^* , nếu đại lượng β không biết. Trong những trường hợp khi nước thải gây nên sự gia tăng đáng kể lưu lượng nước trong dòng nước thì để tính tới chuyển động không ổn định của dòng người ta tính các đặc trưng thủy lực của nó sử dụng phương trình Sen – Venana:

$$W \frac{\partial z}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = q ; \quad \frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial(VQ)}{\partial x} = q\omega \left(\frac{\partial z}{\partial x} + \frac{Q|Q|}{K^2} \right) \quad (6.32)$$

Ở đây:

W – chiều rộng của bề mặt nước;

z – độ cao bề mặt tự do;

Q – lưu lượng nước;

V – tốc độ dòng chảy của nước;

q – cường độ của lượng nước chảy ven bờ;

ω – diện tích thiết diện thật của lòng sông;

K – môđun lưu lượng ($K = \omega \cdot C\sqrt{R}$, C – hệ số Sedi; R – bán kính thủy lực).

Bài toán (6.32) cũng như (6.10) được giải bằng các phương pháp số, chẳng hạn, bằng phương pháp mạng. Nếu ta có khối lượng thông tin đo được đáng kể (về phương diện thống kê toán học) thì cần chuyển sang các mô hình thống kê đơn giản hơn – các mô hình này tỏ ra ổn định hơn đối với những sai số đo đạc so với những mô hình phức tạp hơn.

Bản chất của việc xây dựng các mô hình thống kê có thể minh họa bằng ví dụ sau. Nghiên cứu dòng nước được giám sát tại đoạn $j-1$ ở tuyến định hướng được giám sát, chúng ta xem xét một trong những đoạn này. Giả sử, đoạn thứ j của dòng nước được kiểm soát chịu tác động của các nguồn gây ô nhiễm tập trung được kiểm soát p_j . Vào những thời điểm gián đoạn $n = 1, \dots, N$ trong tuyến định hướng được kiểm soát và tại những điểm chịu tác động của nguồn gây ô nhiễm đo được nồng độ $C_{ip}(n)$ của các i thành phần và lưu lượng của khối lượng nước $Q_p(n)$, $p = 1, \dots, p_j$. Sự ảnh hưởng lên chất lượng nước của những yếu tố khác gây ô nhiễm được tính đến bằng một vài hàm số $v_{ij}(n)$. Chúng ta kí hiệu lưu lượng khối lượng tạp chất i trên đoạn khảo sát của dòng nước bằng kí hiệu $q_{ip} = C_{ip}Q_p$ ($p = 1, \dots, p_j$). Có tính đến sự

đánh dấu, chúng ta mô tả mô hình tổng quát của sự đổi dạng tạp chất thứ i trên đoạn j của dòng nước:

$$C_{i,j+1}(n) = q_{i,j+1}(n) Q_{j+1}(n);$$

$$Q_{i,j+1}(n) = F_{if}(q_{if}(n), q_{il}(n), \dots, q_{ip}(n), \bar{\lambda}, v_y(n);$$

$$Q_{j+1}(n) = \psi_{if}(Q_i(n), Q_l(n), \dots, Q_p(n), \bar{\lambda}_y, v_y(n),$$

Ở đây, $\bar{\lambda}_y = (\lambda_{y1}, \dots, \lambda_{yd})$ – vectơ kích thước d của những thông số chưa biết; F_{if}, ψ_y là các hàm chưa biết.

Bài toán mô hình hoá thống kê bao gồm sự lựa chọn cấu trúc của mô hình (dạng các hàm K_{if} và ψ_{if}) và các thông số chưa biết của chúng bằng cách cực tiểu hoá tiêu chuẩn đã chọn:

$$\Phi(\hat{F}_y, \hat{\psi}_y, \hat{\lambda}_{if}) = \min_{F \in \Omega_{\lambda_{if}} \in \mathbb{R}^0} \sum_{n=1}^N \rho\{q_{if}(n), \hat{F}_y, \hat{\psi}_y, \hat{\lambda}\} h(n),$$

Ở đây: ρ – phiếm hàm sai số;

$h(n)$ – hàm số trọng lượng quyết định mức độ quan trọng của thông tin tại thời điểm thứ n ;

$\mathbb{R}^c$ không gian Oclit c chiều.

Căn cứ vào dạng hàm F_{if}, ψ_{if} đã chọn và hàm sai số của chuỗi, V. Xtarodonski và các đồng tác giả đã đề xuất các mô hình thống kê của sự lan truyền tạp chất trong dòng nước. Một số mô hình trong đó sẽ được xem xét dưới đây khi phân tích các phương pháp dự báo trạng thái của đối tượng nước. Lưu ý rằng các mô hình thống kê được sử dụng rộng rãi trong các bài toán mô hình hoá trạng thái của đối tượng nước nhờ tính đơn giản, ổn định đối với các hiện tượng thăng giáng ngẫu nhiên, do không cần thiết nghiên cứu sâu các quá trình lý – hoá xảy ra trong hệ.

Để đánh giá chất lượng các mô hình toán học, đồng thời để so sánh giữa chúng với nhau cần có những tiêu chuẩn khách quan về tính hiệu quả của những mô hình này. Các tiêu chuẩn đó là: độ chính xác mô hình hoá, tính đơn giản và tính rõ ràng của những mô hình đã nghiên cứu, những đòi hỏi về khối lượng và chất lượng thông tin đo lường cần thiết... Tính chính xác mô hình hoá là tiêu chuẩn quan trọng nhất trong số các tiêu chuẩn. Để đánh giá một cách khách quan độ chính xác của những mô hình đã nghiên cứu cần phải tính toán chất lượng của chúng trên những số liệu độc lập, không tham gia vào sự nhận dạng của các mô hình. V. Xtarodonski đưa ra

đại lượng $RR = S/\sigma^2$ – với tư cách là tiêu chuẩn hiệu quả của các mô hình, trong đó S là độ lệch quân phương của quá trình mô hình hoá; σ^2 là phương sai của quá trình thực. Đại lượng RR là số đo chất lượng tương đối của mô hình toán học đối với đặc tính phân tán của quá trình thực. Đại lượng RR tỉ lệ thuận với số lượng thông tin về quá trình thực với việc sử dụng mô hình toán học. Trường hợp khi phương sai của quá trình thực không biết và sự đánh giá nó có liên quan với những trở ngại nhất định, để so sánh chất lượng của hai mô hình có thể sử dụng tiêu chuẩn

$$\hat{R} R = S_1/S_2$$

biểu thị hệ thức giữa các độ lệch quân phương của các mô hình được xem xét.

6.2.2. Mô hình hoá sự lan truyền các thành phần ngẫu nhiên của tạp chất trong các đối tượng nước

Thông thường, thành phần ngẫu nhiên của quá trình hình thành trạng thái môi trường (6.4) được xấp xỉ bằng chuỗi Gauss – Markov nhờ các tính chất giới hạn của nó. Do các đối tượng môi trường nước là nhiều chiều, ta sẽ hạn chế xem xét mô hình hoá các chuỗi Markov đa chiều. Các chuỗi Markov một chiều là trường hợp riêng của chúng.

Việc mô hình hoá các chuỗi ngẫu nhiên đa chiều trên máy tính điện tử được áp dụng rộng rãi khi giải nhiều bài toán ứng dụng. Tất cả các phương pháp mô hình hoá các chuỗi ngẫu nhiên có ý nói sự tồn tại thông tin sơ bộ nhất định: cả hàm phân bố nhiều chiều hoặc là của mật độ phổ; của vector kì vọng toán và hàm covariation... thông thường được cho dưới dạng các kết quả quan sát và nhờ chúng để đánh giá các đặc trưng chưa biết của chuỗi ngẫu nhiên. Sai số cho phép trong các ước lượng ảnh hưởng đến độ chính xác của kết quả mô hình hoá.

Ta xem xét sự phụ thuộc của độ chính xác mô hình hoá vào sai số đánh giá các đặc trưng của chuỗi mô hình hoá. Chuỗi Gauss ổn định được xác định một cách đầy đủ bằng việc cho trước ma trận covariation. Vì vậy cho nên chuỗi Gauss – Markov kích thước m : $X(t) = [x_1(t), \dots, x_m(t)]$ với độ sâu quan hệ N có thể trình bày dưới dạng:

$$x_p(t) = \sum_{l=1}^{p-1} b_{lp}^p x_l(t) + \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^N a_{ip}^p x_i(t-j) + \sigma_p^2 \xi(t) \quad (6.33)$$

Trong đó:

b_l^p, a_{if}^p – các hệ số phụ thuộc vào hàm số covariation tương hỗ tự động của chuỗi ngẫu nhiên kích thước m : $x(t) = x_1(t), x_2(t), \dots, x_m(t)$;

σ_p^2 – phương sai dư của chuỗi ngẫu nhiên $x_p(t)$;

$\xi(t)$ – đại lượng ngẫu nhiên phân bố chuẩn.

Các hệ số chưa biết và phương sai dư ở (6.33) được xác định theo phương pháp bình phương nhỏ nhất. Bằng các kí hiệu:

$$R_{k,i}(l h - j l) = \begin{cases} R_{k,j}(l h - j l); & \text{ khi } h \geq j \\ R_{i,k}(l h - j l); & \text{ khi } h < j \end{cases}$$

$$k, i = 1, \dots, m; j, n = 1, \dots, N;$$

$$A_p^T = (b^p, a^p) l x [mN + (p-1)]; \quad C_p^T = (R_{k,i}(h) l_{xmN};$$

$$B_p = (R_{k,i}(l h - j l) mN \times [mN + (p-1)], p = 1, \dots, m$$

Ở đây, $R_{k,i}(l h - j l)$ là các covariation tương ứng.

Biểu thức đối với các hệ số chưa biết có dạng:

$$A_p = B_p^+ C_p, \quad (6.34)$$

Ở đây, B_p^+ là ma trận giả nghịch đảo.

Biểu thức đối với phương sai dư được viết dưới dạng:

$$\begin{aligned} \sigma^2 = R_p(0) - \sum_{l=1}^{p-1} \sum_{k=1}^{b-1} b_l^p b_k^p R_{l,k}(0) - \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^m \sum_{f=1}^N a_{ki}^p a_{fk}^p R_{ik}(l l - j l) - \\ - 2 \sum_{i=1}^{p-1} \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^m b_i^p a_{ij}^p R_{ii}(j) \end{aligned} \quad (6.35)$$

Ở đây, $R_p(0)$ là phương sai của quá trình ngẫu nhiên thứ p .

Ta hãy đánh giá sai số mô hình hoá. Sai số phụ thuộc trước hết vào độ chính xác của các ước lượng giá trị của hàm covariation, của các số liệu ngoài trời, đồng thời còn phụ thuộc vào tính chính xác của việc giải hệ các phương trình tuyến tính (6.34). Đưa vào các kí hiệu:

$$X_p^T(t-1) = [x_1(t), x_2(t), \dots, x_{p-1}(t), x_1(t-1), x_1(t-2), \dots, x_1(t-N), \\ x_2(t-1), \dots, x_m(1-N)]; \quad p = 1, \dots, m$$

Các kích thước vector của cột $X_p(t-1)$ bằng $[mN + (p-1)] < 1$, chúng ta viết lại (6.33) như sau:

$$x_p(t) = A_p^T X_p(t-1) + \sigma_p \xi(t); \quad p = 1, \dots, m; \quad (6.36)$$

Ở đây, A_p được xác định theo biểu thức (6.34).

Các giá trị của các hàm covariation tương hỗ và tự động được tính toán theo các số liệu thực nghiệm, là các phần tử của ma trận B_p và C_p . Vì vậy, trong trường hợp thực người ta biết được không phải những giá trị chính xác của ma trận B_p và C_p mà là các ước lượng của chúng $\hat{B}_p$ và $\hat{C}_p$. Ta kí hiệu:

$$\hat{B}_p = B_p + \xi_p, \quad \hat{C}_p = C_p + \varepsilon_p$$

Ở đây, ξ_p và ε_p là ma trận sai số tính toán của các ma trận B_p và C_p tương ứng. Khi đó, trong trường hợp thực để xác định A_p , chúng ta có hệ phương trình:

$$\hat{B}_p A_p = \hat{C}_p \quad (6.37)$$

kí hiệu $\hat{A}_{p0}$ - giả lời giải chuẩn của hệ (6.37). Khi đó, $\hat{A}_{p0} = \hat{B}_p + \hat{C}_p$ và xuất hiện đẳng thức $\hat{A}_{p0} = A_{p0} + \Delta A_{p0}$, ở đây ΔA_{p0} là sai số tuyệt đối của phép tính ma trận A_{p0} . Ta cũng kí hiệu:

$$\delta A_{p0} = \frac{\|\hat{A}_p - A_{p0}\|}{A_{p0}}; \quad \delta B_p = \frac{\|\xi_p\|}{\|B_p\|}; \quad \delta C_p = \frac{\|\varepsilon_p\|}{\|C_p\|}$$

Ở đây, $\| \cdot \|$ là chuẩn Ôclit của ma trận tương ứng.

Giả sử, δB_p và δC_p là những đại lượng tương đối nhỏ. Khi đó, ước lượng sau là đúng: $\delta A_{p0} \leq \text{cond}^+ B_p (\delta B_p + \delta C_p)$ (6.38)

Ở đây, $\text{cond}^+ B_p = \|B_p\| \|B_p^+\|$ là số quy ước của ma trận B_p .

Sử dụng ước lượng $\hat{A}_{p0}$ trong (6.36) dẫn đến các sai số của mô hình hoá, tức là thật ra chuỗi ngẫu nhiên được mô hình hoá:

$$\hat{x}_p(t) = \hat{A}_{p0}^T X_p(t-1) + \delta_p \xi_p(t); \quad p = 1, \dots, m, \quad (6.39)$$

Ở đây, $\hat{\sigma}_p = \sigma_p + \Delta\sigma_p$; $\Delta\sigma_p$ là sai số tuyệt đối của việc tính phương sai dư σ_p .

Giả sử, biết giá trị chính xác của các vectơ ban đầu $x_1(t-1), \dots, x_l(t-N), x_2(t-1), \dots, X_m(t-N)$; và cũng biết các phương sai dư của quá trình được mô hình hoá $\sigma_p, p=1, \dots, m$. Viết lại (6.39) dưới dạng:

$$\hat{x}_p(t) = (A_{p0}^T + \Delta A_{p0}^T) X_p(t-1) + \sigma_p \xi_p(t); p = 1, \dots, m \quad (6.40)$$

Công thức truy hồi xác định chuỗi ngẫu nhiên phát sinh tại bước k có dạng:

$$x_p(t+k) = (A_{p0}^T + \Delta A_{p0}^T) X_p(t+k-1) + \Delta X_p(t+k-1) + \sigma_p \xi(t+k)$$

Ở đây, $X_p(t+k-1)$ là vectơ của những giá trị chính xác của chuỗi phát sinh tại bước thứ $(t+k-1)$; $\Delta X_p(t+k-1)$ là vectơ của sai số tuyệt đối tại bước thứ $(k-1)$ của các giá trị đã được tính của chuỗi phát sinh.

$$\Delta X_p^T(t+k-1) = (\Delta X_1(t+k-1) X_1(t+k-2), \dots$$

$$\sum_{i=1}^{b-1} \Delta X_1(t+k-1) X_1(t+k-2), \Delta A_1^T X_1(t+k-2), \Delta A_1^T(t+k-3), \dots,$$

$$\Delta A_1^T(t+k-N-1), \Delta A_2^T X_2(t+k-2), \dots, \Delta A_2^T(t+k-N-1), \dots,$$

$$\Delta A_m^T X_m(t+k-2), \dots, \Delta A_m^T X_m(t+k-N-1)]_{1 \times [mN + (p-1)]}$$

Sai số tuyệt đối của giá trị được tính của chuỗi phát sinh:

$$|\Delta x_p(t+k)| = \|A_{p0}^T \Delta X_p(t+k-1) + \Delta A_{p0}^T \hat{X}_p(t+k-1)\| \quad (6.41)$$

Ở đây, $\hat{X}_p(t+k-1)$ có giá trị tính được của chuỗi phát sinh tại bước thứ $(t+k-1)$.

Xác định điều kiện mà sai số của phép tính các ước lượng của các phần tử ma trận covariation tương hỗ của chuỗi phát sinh phải thoả mãn, sao cho để với $k \geq 1$ bất kì xuất hiện hệ thức:

$$P(|\Delta x_p(t+k)| \leq \gamma_p) \geq 1 - \alpha; \forall p: p \in (1, \dots, m) \quad (6.42)$$

Có tính đến (6.38), (6.41) ta được:

$$\begin{aligned} & P\left(\left\|\Delta X_p(t+k)\right\| \leq \gamma\right) P\left(\left\|A_{p0}^T\right\| \cdot\left\|\Delta X_p(t+k-1)\right\|+\left\|\Delta A_{p0}^T\right\| \cdot\left\|\hat{X}_p(t+k-1)\right\| \leq \gamma\right) \geq \\ & \geq P\left(\left\|A_{p0}^T\right\| \cdot\left\|\Delta X_p(t+k-1)\right\|+\operatorname{cond}^+ B_p\left(\delta B_p+\delta C_p\right) \cdot\left\|\hat{X}_p(t+k-1)\right\| \leq \gamma\right) \end{aligned}$$

Vì vậy, nếu γ được xác định từ điều kiện:

$$P\left(\left\|A_{p0}^T\right\| \cdot\left\|\Delta X_p(t+k-1)\right\|+\operatorname{cond}^+ B_p\left(\delta B_p+\delta C_p\right) \cdot\left\|\hat{X}_p(t+k-1)\right\| \leq \gamma\right)=1-\alpha \quad (6.43)$$

thì sẽ xuất hiện (6.42).

Hãy xem xét trường hợp khi trong mô hình (6.33) các giá trị thường xuyên của các chuỗi được mô hình hoá không được tính đến, tức là khi $b_l^p = 0, l = 1, \dots, P-1 = 1, \dots, m$. Đồng thời, ma trận B_p trở thành toàn phương.

Đại lượng ngẫu nhiên $\hat{X}_1(t-j)$ tuân theo quy luật phân bố chuẩn với các kì vọng toán học, bằng 0 và với phương sai $R_1(0)$.

Vì vậy, lúc nào cũng có thể tìm được đại lượng β_1 , với đại lượng đó xuất hiện hệ thức:

$$P\left(\left|\hat{x}_1(t-j)\right| \leq \beta_1\right)=1-\alpha$$

Cần nhắc đến tính chất tái sinh x^2 của phân bố xác suất, ta viết:

$$P\left(\left\|\hat{X}_p(t+k-1)\right\| \leq \Delta\right)=P\left\{\left(\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^N\left|\hat{x}_i(t-j)\right|^2\right)^{1 / 2} \leq D\right\} \geq 1-\alpha \quad (6.44)$$

Ở đây:
$$D=N^{\frac{1}{2}}\left(\sum_{i=1}^m \beta_i^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

Để đánh giá chuẩn của vector sai số, tương tự ta có:

$$P\left(\left\|\Delta X_p(t+k-1)\right\| \leq d\right)=P\left\{\left(\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^N\left|\Delta A_i^T X_i(t-j)\right|^2\right)^{1 / 2} \leq d\right\} \geq 1-\alpha \quad (6.45)$$

Ở đây:
$$d=N^{\frac{1}{2}}\left(\sum_{i=1}^m \beta_i^2\right)^{\frac{1}{2}}\left\{\sum_{i=1}^m\left[\operatorname{cond}+\beta_1\left\|A_{i0}\right\|\left(\delta B_i+\delta C_i\right)\right]\right\}^{1 / 2}$$

Có tính đến (6.44), (6.45), hệ thức (6.43) có thể viết lại dưới dạng:

$$\begin{aligned} P\left(\|A_{p0}\| \cdot \|\Delta X_p(t+k-1)\| + \text{cond}^+ B_p (\delta B_p + \delta C_p) \cdot \|\hat{X}_p(t+k-1)\| \leq \right. \\ \left. \leq P\|A_{p0}\| \cdot (d + \text{cond}^+ B_p (\delta B_p + \delta C_p) D) \right\} \geq 1 - \alpha_0 \end{aligned}$$

Nếu γ_p thỏa mãn điều kiện:

$$\|A_{p0}\| \cdot (d + \text{cond}^+ B_p (\delta B_p + \delta C_p) D) \leq \gamma_p \quad (6.46)$$

thì sẽ xuất hiện hệ thức (6.42).

Ta kí hiệu sai số tuyệt đối cực đại của việc tính một giá trị của hàm covariation là Δ_R . Khi đó:

$$\|\xi\| \leq [m^2 N^2 + mN(p-1)]^{\frac{1}{2}} \Delta_R; \quad \|\xi_p\| \leq (mN)^{\frac{1}{2}} \Delta_R,$$

và hệ thức (6.46) sẽ có dạng:

$$\Delta_R \leq \frac{\gamma_p}{N^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{i=1}^m \beta_i^2 \right)^{\frac{1}{2}} \|A_{p0}\| \left\{ N^{\frac{1}{2}} \left[\left(\text{cond}^+ B_i \|A_{i0}\| D_i \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} + \text{cond}^+ B_p D_p \right\}} \quad (6.47)$$

$$\text{Ở đây: } D_i = \frac{[m^2 N^2 + mN(t-1)]^{\frac{1}{2}} \|C_i\| + (mN)^{\frac{1}{2}} \|B_0\|}{\|B_i\| \cdot \|C_i\|}; \quad i = 1, \dots, m$$

Như vậy, nếu điều kiện (6.47) được thực hiện với tất cả $p = 1, \dots, m$ thì chuỗi đa chiều Gauss – Markov được phát sinh với độ chính xác đã cho với xác suất lớn hơn hoặc bằng $1 - \alpha$. Dung tích mẫu n đảm bảo tính các giá trị của hàm covariation với sai số tuyệt đối không vượt quá Δ_R , được xác định bằng hệ thức (6.42).

Bây giờ, ta xét trường hợp tổng quát, khi trong mô hình (6.33) các giá trị thường xuyên của chuỗi mô hình hoá được tính đến. Khi đó, biểu thức (6.44) và (6.45) có dạng tương ứng:

$$P\left(\|\hat{X}_p(t+k-1)\| \leq D\right) = P\left[\left(\sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^N |\hat{x}_j(t-j)|^2 + \sum_{i=1}^{p-1} |\hat{x}_i(t)|^2\right)^{\frac{1}{2}} \leq D\right] \geq 1 - \alpha \quad (6.48)$$

$$\begin{aligned}
\text{Ở đây: } D &= \left[(N+1) \sum_{i=1}^{p-1} \beta_i^2 + N \sum_{i=p}^m \beta_i^2 \right]^{\frac{1}{2}}; \\
P \left(\left\| \Delta X_p(t+k-1) \right\| \leq Q_p \right) &= \\
&= P \left(\left(\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^N \left\| \Delta A_i^T X_i(t-j) \right\|^2 + \sum_{i=1}^{p-1} \sum_{d=1}^l \left\| \Delta X_d(t+k-1) X_d(t+k-2) \right\|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq Q_p \right) \geq \\
P \left(\left(\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^N \left\| \Delta A_i^T \right\|^2 \left\| X_i(t-j) \right\|^2 + \sum_{i=1}^{p-1} \sum_{d=1}^l \left\| \Delta X_d(t+k-1) \right\|^2 \left\| X_d(t+k-2) \right\|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq Q_d \right) &\geq \\
&\geq 1 - \alpha
\end{aligned} \tag{6.49}$$

Ở đây:

$$Q_1 = d; \quad Q_p = \left\{ N \sum_{i=1}^m \beta_i^2 \left[\sum_{i=1}^m \left(\text{cond}^+ B_i \|A_{i0}\| (\delta B_i + \delta C_i) \right)^2 + \sum_{i=1}^{p-1} |Q_i| \right] \right\}^{\frac{1}{2}}$$

Như vậy, ta thu được hệ thức truy hồi (6.49), cho phép đánh giá đại lượng ngẫu nhiên $\left\| \Delta X_p(t+k-1) \right\|$ với xác suất đã cho đối với trường hợp tổng quát của mô hình (6.33). Cần lưu ý rằng, các ước lượng (6.44), (6.45) và (6.48) không phụ thuộc vào thông số thời gian, tức là sai số mô hình hoá của chuỗi thời gian đa chiều được xác định bằng sai số của phép tính các ma trận B_p và C_p ; các giá trị của các hàm covariation là các phần tử của các ma trận và cũng là sự định ước của các ma trận B_p bằng chuyển các vector A_{p0} , là phương sai dư của chuỗi δ_p^2 được mô hình hoá, là kích thước và độ sâu quan hệ của nó. Vì vậy, trước khi bắt đầu mô hình hoá chuỗi đa chiều cần phải đánh giá Δ_R – sai số của phép tính các giá trị của các hàm covariation, đảm bảo sai số cho trước của việc mô hình hoá có tính đến hệ thức (6.48).

Sai số tuyệt đối của mô hình hoá (6.41), có tính đến sai số tính phương sai dư của chuỗi mô hình hoá, có dạng:

$$\Delta x_p(t+k) = A_{p0}^T \Delta X_p(t+k-1) + \Delta A_{p0}^T(t+k-1) + \Delta \delta_p \xi_p(t+k)$$

Ta viết biểu thức (6.35) ở dạng ma trận:

$$\delta_p^2 = R_p(0) - A_p^T 1x [mN + (p-1)] R [mN + (p-1)] [mN + (p+1)] A_p [mN + (p-1)]_{x1} - 2BI_p^T R L_{(p-1)x1} \quad (6.50)$$

Ở đây: $BI_p = (b^p)_{(p-1)x1}$; $RI^T = RI(I)RI(p-1)$; $RI RI(\ell) = (AI_{1 \times mN} R(I)_{mN \times 1})$

$$\ell = 1, \dots, p-1 \quad AI_p^T = (a^p_{1 \times mN})$$

Có tính đến sai số, biểu thức (6.50) có thể viết lại như sau:

$$\delta_p^2 + \Delta \delta_p^2 = R_p(0) + \Delta R_p(0) - (A_p^T + \Delta A_p^T)(R + \Delta R)(A_p + \Delta R_p) - 2(BI_p^T + \Delta BI_p^T)(RI_p + \Delta RI_p)$$

Từ đây, đối với sai số tính phương sai dư ta có hệ thức:

$$|\Delta \delta_p|^2 \leq |\Delta R_p(0)| + 2\|A_p^T\| \cdot \|R\| \cdot \|\Delta A_p\| + \|\Delta A_p^T\| \cdot \|\Delta R\| \cdot \|A_p\| + \|\Delta A_p^T\| \cdot \|R\| \cdot \|\Delta A_p\| + \|\Delta A_p^T\| \cdot \|\Delta R\| \cdot \|\Delta A_p\| + 2(\|RI_p^T\| \cdot \|RI_p\| + \|\Delta BI_p^T\| \cdot \|RI_p\| + \|\Delta BI_p^T\| \cdot \|\Delta RI_p\|) \quad (6.51)$$

Khi thực hiện điều kiện (6.47), sai số tính phương sai (6.51) sẽ không lớn. Nếu trong (6.51) bỏ qua các số hạng bậc cao hơn thì để đánh giá sai số của phương sai dư của quá trình được mô hình hoá, người ta dùng biểu thức:

$$\|\Delta RI_p\| = \left(\sum_{\ell=1}^{p-1} \|\Delta R \ell(\ell)\|^2 \right)^{\frac{1}{2}};$$

$$\|\Delta RI(\ell)\| \leq \|\Delta AI_p\| \cdot \|R(\ell)\| + \|AI_p\| + \|AR(\ell)\| + \|\Delta AI_p\| \cdot \|AR(\ell)\|$$

$$\|\Delta R(\ell)\| \leq (mN)^{\frac{1}{2}} \Delta_R; \quad \|\Delta BI_p\| < \|\Delta A_p\| \cdot \|\Delta AI_p\| \leq \|\Delta A_p\| \quad (6.52)$$

Sai số tính phương sai dư của chuỗi mô hình hoá được tính bằng cách cho thêm vào vế trái của biểu thức (6.46) các ước tính ở bên trên $\Delta \delta_p^2$ tính theo hệ thức (6.52).

Các kết quả trên nhận được trong giả thiết rằng hệ phương trình tuyến tính: $B_p A_p = C_p$ (6.53)

là tương thích. Sự tương thích của hệ (6.53) có nghĩa là:

$$B_p^+ B_p - E = 0 \quad (6.54)$$

Thuật toán tính B_p^+ có sai số, do đó điều kiện (6.54) sẽ được thực hiện với sai số nhất định. Ta kí hiệu ΔB_p^+ là sai số của phép tính B_p^+ , tức là $\hat{B}_p = B_p^+ + \Delta B_p^+$.

Hệ là tương thích nếu:

$$0 \leq \|\hat{B}_p + B_p - E\| \leq \|B_p\| \|\Delta B_p^+\|$$

Sự tương thích (6.53) có nghĩa là $M(x_p(t) \neq A_p^T M(x_p(t-1)))$ tức là ngay cả khi $M(x_p(t-1)) = 0$ xuất hiện bất đẳng thức $M(x_p(t)) \neq 0$, sao cho $M(x_p(t+k))$ ($k > 0$), hơn nữa sẽ không bằng không. Kỳ vọng toán học $x_p(t)$ sẽ tăng càng nhanh nếu càng nhiều phần tử của vectơ A_p , tức là môđun vectơ A_p . Nếu tất cả các phần tử của vectơ A_p nhỏ hơn đơn vị thì $M(x_p(t+k))$ với sự tăng k sẽ dẫn tới không, tức là chuỗi ngẫu nhiên mô hình hoá được thiết lập theo thời gian. Trường hợp ngược lại, chuỗi bị phân kì. Phương sai của chuỗi cũng sẽ có đặc tính tương tự. Chuỗi được mô hình hoá bị phân kì nếu các hàm covariation cũng là những hàm phân kì. Tính phủ định của phương sai tính được theo hệ thức (6.35) có nghĩa là chuỗi Gauss – Markov với những đặc điểm đã cho không thể mô hình hoá theo mô hình (6.33).

Ví dụ, để kiểm tra điều kiện (6.47) phác thảo 2100 cách làm của chuỗi một chiều Gauss – Markov theo (6.33) với hàm tự tương quan: $R(0) = 1$; $R(1) = 0,2457$; $R(2) = 0,3235$; $R(3) = 0,318$; $R(4) = 0,0516$; $R(5) = 0,0488$; $R(6) = 0,00157$; $R(7) = -0,00233$ tức là $m = 1$, $N = 7$. Trong trường hợp này:

$$\|B^*B - E\| = 0,153105 \cdot 10^{-4}; \|C\| = 0,434875; \|B\| = 2,99145;$$

$$\|A\| = 0,0519399; \|B^+\| = 4,603693;$$

$$\text{cond}^+B = 13,77171.$$

Hệ thức (6.47) có dạng $\Delta R \leq 0,01833825\gamma$. Theo các giá trị của chuỗi, đã tính được các ước lượng của hàm tự tương quan:

$$\hat{R}(0) = 0,965998; \hat{R}(1) = 0,256597; \hat{R}(2) = 0,322361;$$

$$\hat{R}(3) = 0,108244; \hat{R}(4) = 0,055888; \hat{R}(5) = 0,573747;$$

$$\hat{R}(6) = 0,00858013; \hat{R}(7) = 0,005352$$

Theo (6.42) sai số của các điểm số tính được không vượt quá $\Delta_R = 0,039$ với xác suất đã cho, điều này được thấy rõ khi so sánh trực tiếp các ước lượng đã cho và các ước lượng tính toán được của các giá trị thuộc hàm tự tương quan. Theo mô hình (6.33) đã phác thảo 2100 cách làm của chuỗi một chiều Markov với các giá trị đánh giá của hàm tự tương quan. Khi mô hình hoá đã sử dụng các đại lượng độc lập, các đại lượng giả ngẫu nhiên phân bố, các đại lượng được áp dụng khi mô hình hoá với các giá trị đã cho của hàm tự tương quan. So sánh các giá trị tương ứng của các chuỗi mô hình hoá thu được trong cả hai trường hợp chỉ ra tính đúng đắn của hệ thức (6.42) có dạng:

$$|\hat{x}(t) - x(t)| \leq 0,471346 \text{ với xác suất trên } 0,95.$$

6.3. DỰ BÁO TRẠNG THÁI CỦA CÁC ĐỐI TƯỢNG NƯỚC

Những tác động của con người lên đối tượng nước thiên nhiên dẫn đến không chỉ làm thay đổi trạng thái của nó ở thời điểm hiện tại, mà còn dẫn đến những hậu quả lâu dài cần phải được dự báo sớm, nhằm ngăn ngừa những huỷ hoại bất thuận nghịch của cân bằng sinh thái. Đồng thời cho tương lai, cần dự báo trạng thái của đối tượng nước căn cứ vào những tác động đang có hoặc giả định sẽ có lên đối tượng nước nhằm mục đích quản lí những tác động đó.

Căn cứ vào thời gian dự báo, người ta chia ra làm năm loại dự báo: dự báo đối phó nhanh (từ vài giờ đến vài ngày); dự báo ngắn hạn (đến 1 tháng); dự báo trung hạn (đến 1 năm); dự báo dài hạn (đến 10 năm) và dự báo viễn cảnh (từ 15 đến 25 năm).

Tồn tại nhiều mô hình toán học được sử dụng để dự báo trạng thái của các đối tượng nước. Các mô hình khác nhau bởi cấu trúc và tính phức tạp của những mối liên hệ hàm số phản ánh quy luật hình thành trạng thái của đối tượng; bởi phương pháp sử dụng thông tin đo đạc hiện có; bởi khả năng thích nghi đối với những đặc trưng thay đổi của đối tượng, ví dụ như: sự tự tổ chức cấu trúc trên cơ sở tập hợp những mối liên hệ hàm số đã cho; tiêu chuẩn tự cơ cấu, khối lượng và đặc tính của thông tin tiên nghiệm.... Tính đa dạng của các mô hình toán học thể hiện ở chỗ các đối tượng nước được nghiên cứu khác nhau một cách đáng kể mà còn do tính đa dạng của những bài toán mà các mô hình toán học lập nên để giải chúng. Vì vậy, khi nghiên cứu thuật toán mới hoặc sử dụng thuật toán hiện có để dự báo trạng thái của

các đối tượng nước cần phải xuất phát từ những điều kiện cụ thể đặc trưng cho đối tượng đó và mục đích cuối cùng mà mô hình toán học được xây dựng để đạt tới.

Các phương pháp dự báo hiện hành có thể chia thành các nhóm sau: nhóm ngoại suy, nhóm stistic và nhóm mô hình hoá toán học. Gần đây, phương pháp mô hình hoá toán học được phổ biến rộng, đến lượt mình nhóm mô hình hoá toán học lại được chia ra các phân nhóm: khuếch tán, thống kê và mô phỏng. Các mô hình xác định mô tả quá trình lan truyền các chất gây ô nhiễm trong các đối tượng nước trong thời gian và không gian đã được xem xét một cách tương đối tỉ mỉ ở trên. Chỉ lưu ý rằng, do bản chất ngẫu nhiên của những hiện tượng được nghiên cứu và tính phức tạp của việc đánh giá những thông số chưa biết, chất lượng dự báo của những mô hình xác định phụ thuộc vào phạm vi dự báo. Nhà nghiên cứu I.Vlaxova đã chỉ ra rằng giới hạn dự báo trước thời tiết theo các phương trình vi phân, về nguyên tắc, không thể quá 15 ngày đêm. Khi lựa chọn cấu trúc và các phương pháp nhận dạng phù hợp, các mô hình xác định cho phép dự báo khoảng thời gian quan tâm với độ chính xác chấp nhận được trong trường hợp sử dụng đúng đắn những số liệu thực nghiệm. Nhiều công trình nghiên cứu làm sáng tỏ những mặt mạnh và mặt yếu của phương pháp thống kê để dự báo chất lượng các đối tượng nước. Chúng ta dừng lại ở một số trong những phương pháp có triển vọng hơn cả để giải bài toán dự báo chất lượng đối tượng nước.

Phương pháp tự hồi quy của trung bình trượt tích phân hoá (ARPSS) có được sự phổ biến rộng rãi và thường được sử dụng trong các biến thể khác nhau để dự báo chất lượng môi trường thiên nhiên. Bản chất của phương pháp là ở chỗ:

1. Việc chọn cấu trúc ARPSS dựa trên cơ sở tính sai phân hữu hạn từ những giá trị đã đo;

2. Đánh giá tiếp những thông số chưa biết của cấu trúc đã chọn bằng cách cực tiểu hoá độ lệch của các giá trị dự báo từ các giá trị đo. Ví dụ, sử dụng phương pháp trung bình trượt phù hợp với mô hình tuyến tính dự báo chuỗi thời gian của thông số tương ứng của đối tượng nước được giới thiệu ở mục 6.1.

Trong công trình nghiên cứu của V. Belogurov và S. Vaxilenko, khả năng vận dụng một số thuật toán thống kê đã được xem xét: phương pháp phân tích hồi quy từng đôi; phương pháp đa thức nội suy Lagrange, phương pháp thống kê nhóm của các đối số – để dự báo chất lượng nước sông. Sự phụ thuộc

logarit, hypecbon, parabol, tuyến tính được sử dụng với tư cách là phương pháp hồi quy. Các thông số chưa biết được đánh giá bằng phương pháp bình phương nhỏ nhất, chất lượng dự báo – được đánh giá bằng đại lượng phương sai dư. Các phụ thuộc tuyến tính, parabol cho kết quả gần giống nhau được coi là sự phụ thuộc hồi quy tốt nhất. Chất lượng dự báo được hoàn thiện nhờ sự biến thể thuật toán dự báo bằng các đa thức nội suy Lagrange.

Bản chất của sự biến thể như sau: Nếu như trong thuật toán nội suy cổ điển, bậc đa thức trên cơ sở thông tin đo $x_n, x_{n-1}, \dots$ được tối ưu hoá bằng các đa thức Lagrange, thì trong thuật toán biến thể song song với bậc của đa thức, bước γ cũng được tối ưu hoá. Để dự báo đại lượng x_{n+1} , khi đó không dùng dãy x_n, x_{n-1} mà sử dụng chuỗi $x_{n+1-v}, x_{n+1-2v}, \dots$. Số v được chọn ở điều kiện cực tiểu độ lệch trung bình của những giá trị dự báo từ các giá trị đo.

Các thuật toán của phương pháp thống kê nhóm các đối số được sử dụng rộng rãi để giải những bài toán đa dạng xác định những đối tượng phức tạp nhằm quản lý và xây dựng dự báo.

Nhiều công trình nghiên cứu dành cho việc mô tả thuật toán và các kết quả sử dụng khi dự báo những đối tượng phức tạp trong đó có các đối tượng nước. Ưu việt của thuật toán này so với những thuật toán khác ở chỗ, cấu trúc của các mô hình không được vạch ra một cách tiên nghiệm. Trên cơ sở tập hợp đã cho của các hàm cơ sở và tập hợp các tiêu chuẩn tối ưu hoá thuật toán theo phương pháp thống kê nhóm các đối số bằng cách tự tổ chức, cấu trúc tối ưu hơn được lựa chọn vì các thông số chưa biết được đánh giá. Thuật toán này mang lại các dự báo thuỷ văn học có thể chấp nhận được theo các chuỗi thời gian ngắn; thuật toán này nổi bật hơn bởi chất lượng cao của những dự báo dài hạn khi thông tin ban đầu bị "rối" nặng.

Các hệ tự động hoá giám sát trạng thái các đối tượng môi trường hoạt động trong thời gian thực. Ở những hệ này, dự báo được thực hiện tùy theo việc nhập các kết quả đo kế tiếp. Thời gian làm việc của thuật toán dự báo trùng với thời gian làm việc của những thuật toán khác, xử lý và phản ánh các kết quả đo của tập hợp các thông số được giám sát bởi hệ thống, không được vượt quá khoảng thời gian giữa các lần nhập thông tin đo cạnh nhau. Ngoài ra, do sự hạn chế nguồn dự trữ của bộ nhớ, trong máy tính điện tử thường chỉ lưu trữ số lượng các phép đo cuối cùng được ấn định trước. Vì vậy, với quan điểm tiết kiệm thời gian tính toán trên máy tính điện tử và đồng thời gia tăng

tính linh hoạt và tính xác thực của dự báo, các thuật toán thích nghi có khả năng làm chính xác các giá trị của các thông số được đánh giá cùng với việc nhập thông tin là những thuật toán tốt hơn cả.

Ở đây, trước hết cần phải nhắc tới phương pháp làm trơn hàm mũ (thuật toán R. Brown) cũng như các thuật toán Katrmaza và thuật toán trung bình trượt. Trong ví dụ sử dụng thuật toán san bằng số mũ để dự báo chất lượng nước sông Đônhetbac, giả thiết rằng chuỗi thời gian $x_t (t = 1, 2, \dots, n)$ của các giá trị đo của chỉ số dự báo được mô tả bằng đa thức lũy thừa m:

$$y_t = \sum_{i=1}^m \frac{a_i}{i!} t^i + \varepsilon_t \quad (6.55)$$

Ở đây, ε_t là "ồn" ngẫu nhiên.

Theo các giá trị đo $x_t, t = 1, \dots, n$, cần xây dựng dự báo tại thời điểm $(n + \theta), \theta = 1, \dots, q$. Dự báo của chuỗi thời gian x_t tại thời điểm $(t + \theta)$ có thể được xây dựng bằng cách khai triển trong chuỗi Taylor:

$$x_{t+\theta}^* = \sum_{k=0}^m \frac{\theta^k}{k!} x_t^{(k)} \quad (6.56)$$

Ở đây, $x_t^{(k)}$ là đạo hàm k tại thời điểm t.

Theo định lí R. Brown, bất kì đạo hàm bậc k nào của x_t có thể biểu thị qua những tổ hợp tuyến tính của trung bình hàm mũ được xác định theo công thức:

$$S_t^{(k)}(x) = \alpha S_{t-1}^{(k-1)}(x) + (1-\alpha) S_t^{(k)}(x) \quad (6.57)$$

$$\text{Ở đây: } S_t^{(k)}(x) = \alpha \sum_{i=1}^m (1-\alpha)^i S_{t-i}^{(k-1)}; \quad S_{t-1}^{(0)} = x_{t-1};$$

α - thông số làm trơn ($0 < \alpha < 1$).

Trên cơ sở hệ thức (6.55), (6.57), hệ các phương trình tuyến tính đối với các hệ số $\alpha_i, i = 1, \dots, n$ được lập. Giải hệ các phương trình này mang lại các công thức truy hồi để quy đổi chúng. Sử dụng giá trị của các hệ số này, theo hệ thức (6.56) để tính toán giá trị dự báo tương ứng.

Trong trường hợp của mô hình tuyến tính $x_t = a_0 + a_1 t + \varepsilon_t$, hệ các phương trình để tính toán các điểm số $\hat{a}_0$ và $\hat{a}_1$ có dạng:

$$S_t^{(1)}(x) = \hat{a}_0 + \frac{1-\alpha}{\alpha} \hat{a}_1; \quad S_t^{(2)}(x) = \hat{a}_0 + \frac{\alpha(1-\alpha)}{\alpha} \hat{a}_1$$

Khi đó giá trị dự báo $C_{t+\theta}^* = \hat{a}_0 + \theta \cdot \hat{a}_1$.

Để xác định các giá trị của thông số làm tròn α , dãy $x_1, x_2, \dots, x_n$ được chia ra làm hai phần, phần thứ nhất dùng để xây dựng mô hình dự báo và phần thứ hai dùng để kiểm tra chất lượng mô hình dự báo. Thông số α được coi như bằng giá trị mà có được một dự báo tốt nhất theo phần hai của dãy.

Bản chất của phương pháp thuật toán một bước Katrmaza để dự báo các cấu tử riêng biệt của nước sông như sau:

Giả sử, chỉ tiêu chất lượng đối tượng nước i ($i = 1, 2, \dots, m$) được mô tả bằng phương trình:

$$y_i(n) = C_i^T X(n)$$

Trong đó:

$y_i(n)$ – giá trị của chỉ tiêu i trong thời điểm rời rạc n ;

C_i – vectơ $m \times k$ chiều của các thông số chưa biết được đánh giá;

$X(n)$ – vectơ $m \times K$ chiều của sự lựa chọn từ các chuỗi động học của các chỉ tiêu chất lượng nước:

$$X(n) = (y_1(n-1), \dots, y_1(n-k), \dots, y_m(n-1), \dots, y_m(n-k), \dots, y_m(n-1), \dots, y_m(n-k))^T$$

Trong đó:

m – thông số được đo của nước;

k – số bước, được tính khi dự báo sớm của các thông số nước.

Giá trị được dự báo của thông số y_i trên θ bước về phía trước được tính bằng hệ thức:

$$y_i(n+\theta) = C_i^T(n) X^*(n+\theta), \quad \theta = 1, 2, \dots, q$$

Các cấu tử của vectơ $X^*(n+\theta)$ được xác định bằng phương trình:

$$x_p^*(n+i) = \begin{cases} g_p^*(n+i) & \text{khi } i > 0 \\ y_p(n+i) & \text{khi } i \leq 0 \end{cases}$$

Các hệ số ẩn $C_i(n)$ được tính theo hệ thức truy hồi:

$$C(n) = C(n-1) + \frac{y(n) - C^T(n-1)X(n)}{\gamma - X^T(n)X(n)}$$

Hệ thức có được bằng cách cực tiểu hoá giá trị trung bình của bình phương độ lệch của những giá trị được dự báo từ các giá trị đo được. Hệ số hiệu chỉnh γ được chọn trong từng trường hợp cụ thể trên cơ sở những số liệu thực nghiệm. Được biết rằng, thuật toán cho kết quả tốt hơn nếu thời gian được chuẩn hoá sơ bộ. Trong trường hợp đó, giá trị trung bình và phương sai mẫu được tính theo hệ thức:

$$\bar{X}(n) = (1 - \alpha)\bar{X}(n-1) + \alpha X(n) ;$$

$$D(X) = \bar{X}^2(n) - \bar{X}(n)^2,$$

Ở đây: $\bar{X}^2(n) = (1 - \alpha)\bar{X}^2(n-1) + \alpha X^2(n)$; $\alpha(0 < \alpha < 1)$ được chọn trên cơ sở các số liệu thực nghiệm, tương tự theo thuật toán của R. Brown.

Phương pháp trung bình trượt. Kí hiệu: M – số lượng phép đo được lưu giữ trong bộ nhớ máy tính. Đối với mỗi $N \in \Omega$, ở đây Ω tập hợp rời rạc của các giá trị cho trước chiều sâu liên kết của thuật toán, theo phương pháp trung bình trượt, toàn bộ khối đến phép đo $(M - l)$ được xem xét. Trên mỗi tập hợp con gồm có N phép đo, các hệ số trung bình trượt được tính toán và sự dự báo được thực hiện trên l bước về phía trước. Tổng được tích lũy:

$$S_N = \sum_{i=N+l}^{M-l} (x_p(i) - \hat{x}_p(i))^2$$

và phương sai tương ứng được đánh giá:

$$D_n = \frac{S_N}{(M - 2l - n - 1)}$$

Dự báo cuối cùng tại bước l được thực hiện ở độ sâu liên kết $N \in \Omega$ thích hợp với phương sai tối thiểu D_N .

Để dự báo trạng thái các đối tượng nước, việc sử dụng các bộ lọc Calman rất có triển vọng. Giả sử, trạng thái đối tượng nước $X(t)$ như là một quá trình ngẫu nhiên, được mô tả bằng phương trình:

$$X(t+1) = \sum_{k=0}^r \phi_k(t)X(t-k) + \varphi(t) + \xi(t) \quad (6.58)$$

Mô hình quan sát có dạng:

$$y(t) = \sum_{k=0}^r H_k(t)X(t-k) + \eta(t) \quad (6.59)$$

Trong đó:

$\varphi(t)$ – hàm xác định đã biết;

$\Phi_k(t)$ và $H_k(t)$ – các ma trận chuyển tiếp cho trước;

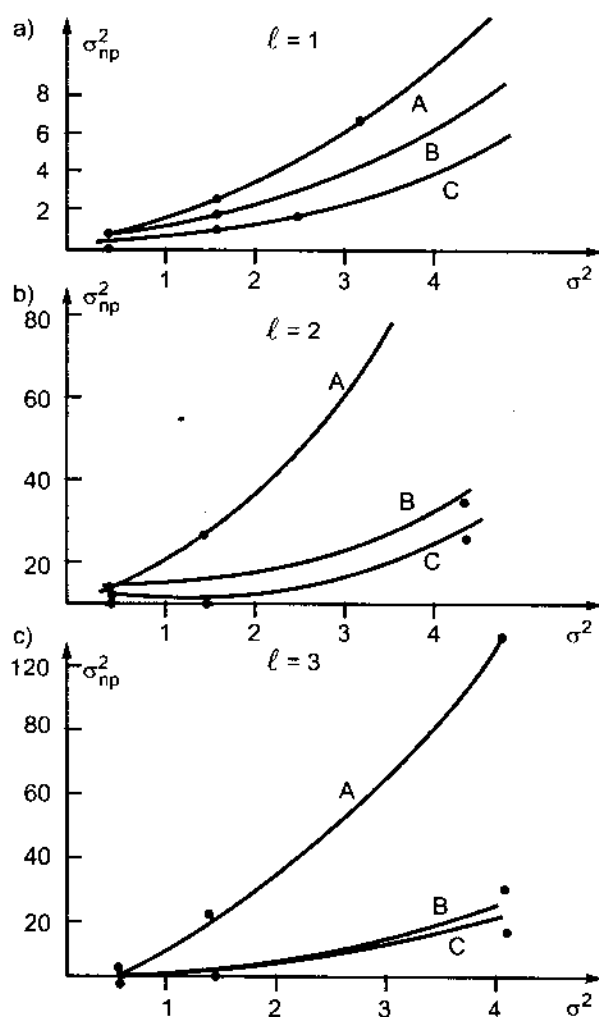
$\xi(t)$ và $\eta(t)$ – các "ồn" độc lập đối với nhau.

Hệ các phương trình sai phân, xác định bộ lọc Calman, cho phép dự báo trạng thái của đối tượng $X(t+v)$ trên cơ sở các giá trị đo $y(1), \dots, y(t)$ đối với lớp chung của những quá trình không ổn định. Trong trường hợp phi tuyến tính của các mô hình (6.58), (6.59) có thể sử dụng bộ lọc tổng quát Calman với sự tuyến tính hoá số bộ của các mô hình. Nhược điểm của các bộ lọc Calman là cần cho trước giá trị quy định của các ma trận chuyển tiếp $\Phi_k(t)$ và $H_k(t)$, điều đó nhiều khi khó thực hiện. Tiến hành phân tích so sánh các thuật toán làm tròn hàm mũ Katrmaza và trung bình trượt với quan điểm về độ xác thực dự báo, tính đơn giản trong thực hành của thuật toán, tiết kiệm bộ nhớ cần thiết của máy tính và thời gian thực hiện dự báo. Trên hình 6.2 giới thiệu các đặc trưng của những thuật toán đó theo các số liệu thu thập được khi phân tích nước thải của một nhà máy cạnh cảng.

Kết quả khảo sát chỉ ra rằng, các thuật toán làm tròn hàm mũ và trung bình trượt có tính ưu việt trước thuật toán Katrmaza về tính đích thực dự báo. Tính đích thực của những thuật toán đó là gần như nhau và tiến gần đến khoảng khẳng định của dự báo trên 24 nhịp, trong khi thuật toán Katrmaza cho kết quả chấp nhận được chỉ trong khi dự báo trên 1 bước về phía trước (đường cong 1 trên hình 6.2). Ngoài ra, trong thực hành thuật toán Katrmaza là phức tạp, đòi hỏi thể tích bộ nhớ lớn và thời gian dài để tính toán trên máy tính so với hai thuật toán khác.

Thuật toán Brown hơn hẳn thuật toán trung bình trượt về tốc độ, dung tích bộ nhớ gần bằng nhau. Trong thực hành cả hai thuật toán đều tương đối đơn giản. Tính ưu việt của thuật toán trung bình trượt trước các thuật toán khác là ở chỗ, đối với các thuật toán Brown và Katrmaza đòi hỏi thời gian dài huấn luyện để nắm được thuật toán thời gian này phụ thuộc vào các đặc điểm của đối tượng được dự báo, ngược lại thời gian huấn luyện về thuật toán trung bình trượt là không đổi và được biết trước. Chất lượng vận hành các thuật toán Brown và Katrmaza phụ thuộc rất nhiều vào các giá trị của các hệ số hiệu chỉnh hàm chứa trong các mô hình. Chúng được lựa chọn một

cách độc lập trong từng trường hợp cụ thể trên cơ sở những số liệu thực nghiệm, điều đó gây trở ngại cho việc sử dụng chúng trong các hệ được tự động hoá.



Hình 6.2. Sự phụ thuộc của phương sai dự báo σ_{np}^2 – từ phương sai các kết quả quan sát σ^2 đối với những thuật toán thích nghi khác nhau

A, B, C – Các kết quả thu được ứng với thuật toán Katrmaza; Brown và trung bình trượt

Thuật toán trung bình trượt có huấn luyện và thuật toán làm trơn hàm mũ với sự lựa chọn tự động mô hình dự báo tốt nhất với các thông số tối ưu được thực hành trong các hệ tự động hoá kiểm soát ô nhiễm môi trường nước, các hệ này đã được nghiên cứu.

Kết quả vận hành các thuật toán trong điều kiện thực tế khẳng định tính đúng đắn của những kết luận được rút ra. Tuy nhiên, không được coi chúng đã là câu trả lời đầy đủ để đưa ra kết luận cuối cùng về những ưu nhược điểm của những thuật toán được xem xét dùng để dự báo các thông số gây ô nhiễm các đối tượng nước thiên nhiên bất kì. Đối với từng đối tượng cụ thể và sự tuyển lựa cụ thể các thông số đòi hỏi phải có những khảo sát bổ sung.

6.4. ĐÁNH GIÁ TRẠNG THÁI CỦA ĐỐI TƯỢNG ĐƯỢC GIÁM SÁT

Chất lượng môi trường được xác định bởi nhiều thông số hoá lí và sinh học. Căn cứ vào các giá trị của chúng, môi trường thiên nhiên được giám sát có thể ở trạng thái này hay trạng thái khác. Trạng thái của môi trường thiên nhiên được người ta đánh giá bằng cách đo các thông số của chúng và so sánh với nồng độ giới hạn cho phép. Khi số các thông số nhiều, nếu không có máy tính, công việc này trở nên khó khăn và sẽ hiện diện những sai số ngẫu nhiên chứa trong các kết quả đo. Gần đây, trên thế giới, các công trình về xây dựng những chỉ tiêu tổng quát chất lượng môi trường được giám sát dựa trên các mô hình toán học liên kết những chỉ tiêu riêng biệt của chúng đã được triển khai. Đối với các đối tượng nước có hàng chục chỉ tiêu như vậy – được gọi là *những chỉ số chất lượng nước*. Các chỉ số khác nhau bởi số lượng và loại của các thông số được sử dụng để đánh giá trạng thái của đối tượng. Nhưng chúng cho phép thực hiện đánh giá tổng hợp trạng thái nước. Trong khi đó thì bằng các tiêu chuẩn dựa trên sự so sánh trực tiếp các thông số đo được với nồng độ giới hạn cho phép chỉ có thể xét đoán tương quan về lượng của từng chỉ tiêu riêng biệt của nó. Việc sử dụng kĩ thuật máy tính trong các hệ tự động hoá đem lại khả năng kiểm soát trạng thái môi trường một cách đáng tin cậy trên cơ sở so sánh các thông số đo với nồng độ giới hạn cho phép hoặc với chỉ số chất lượng nước ở những sai số ngẫu nhiên của phép đo. Dưới đây giới thiệu thuật toán thống kê chấp nhận (ra) quyết định về sự ô nhiễm đối tượng môi trường, thuật toán này sử dụng các giá trị đo của những thông số được giám sát bị ảnh hưởng bởi sai số ngẫu nhiên và tương quan với nhau.

Ta công thức hoá bài toán. Giả sử trạng thái của đối tượng được đặc trưng bằng m thông số $\mu_1, \dots, \mu_m$. Căn cứ vào giá trị của các thông số được giám sát $\mu_i, i = 1, \dots, m$ đối tượng có thể hoặc không bị coi là ô nhiễm. Chúng ta coi đối tượng bị ô nhiễm nếu giá trị dù là của một thông số được giám sát lớn hơn nồng độ giới hạn cho phép. Đưa vào kí hiệu:

$$G = \{\mu: \mu_i \leq a_i; \forall i \in (1, \dots, m)\}$$

Trong đó:

a_i – nồng độ giới hạn cho phép;

μ_i – thông số được giám sát.

Vùng G là vùng thông số m chiều đối với đối tượng không bị ô nhiễm, còn $\bar{G} = R - G$ là vùng thông số đối với đối tượng bị ô nhiễm; R là không gian thông số m chiều.

Phép đo được tiến hành với những sai số ngẫu nhiên. Vì vậy, việc chấp nhận quyết định được xây dựng bằng các phương pháp thống kê toán học, hiểu là sự tích lũy thông tin thống kê.

Trong hệ được tự động hoá kiểm soát môi trường, việc đánh giá trạng thái của đối tượng ở thời điểm hiện tại thực hiện trên cơ sở độ lệch của các thông số được đo:

$$\hat{X}(N) = \{\hat{x}_1(N), \dots, \hat{x}_m(N)\} \text{ tính toán theo hệ thức (6.4).}$$

Kì vọng toán của các ước lượng $M(\hat{x}_i(N) = \mu)$ chưa biết, còn các phần tử của ma trận phương sai W được xác định bằng hệ thức (6.6). Bài toán được xếp đặt (điều chỉnh) như sau: Cần kiểm định giả thiết $H_0: \mu \in G$, ở giả thiết cạnh tranh $H_1: \mu \in \bar{G}$. Giả sử, các kết quả đo được phân bố theo quy luật chuẩn. Bởi vì, các thông số đo $\hat{x}_i(N)$, $i = 1, \dots, m$ là sự tổ hợp tuyến tính của những đại lượng ngẫu nhiên phân bố chuẩn, nên vectơ ngẫu nhiên $\hat{X}$ tuân theo định luật phân bố xác suất đa chiều:

$$P(\hat{X}, \mu) = \frac{1}{[(2\pi^m dW)]^{\frac{1}{2}}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\hat{X} - \mu)^T (W^{-1} (\hat{X} - \mu)) \right\}$$

Các giả thiết kiểm định bao gồm toàn bộ không gian tham số, vì vậy quy tắc chính yếu được xác định như sau: Nếu $\hat{X} \in G$ thì giả thiết H_0 được chấp nhận, ngược lại là giả thiết H_1 . Hiển nhiên xuất hiện vấn đề về độ tin cậy của quyết định. Giả sử $\hat{X} \in G$, khi đó xác suất của sai lầm là:

$$P_{\text{sai số}}(\hat{X}, A) = P\left(\frac{H_0}{H_1}\right) = \int_G P\left(\frac{\hat{X}}{\mu}\right) d\mu \quad (6.60)$$

Để dàng nhận thấy rằng, với $\hat{X} \in \overline{G}$ để tính xác suất quyết định sai cũng có kết quả tương tự.

Giả thiết rằng đối tượng đang ở một trong những trạng thái đã cho M ($M \geq 2$). Chúng ta cũng giả sử, mỗi trạng thái của đối tượng được đặc trưng bằng một vùng đã cho từ không gian các giá trị của các thông số được giám sát. Ví dụ ở Balan, Đức và nhiều nước khác căn cứ vào các chỉ tiêu và nồng độ các chất gây ô nhiễm, người ta phân chia nước thành một số loại (4 ÷ 5 loại) tùy theo cấp độ hữu dụng.

Kí hiệu:

$$G_i = \{\mu: a_j^i < \mu_j \leq a_j^{i+1}; \quad \forall j \in (1, \dots, m)\}$$

Vùng chấp nhận H_i ($i = 1, \dots, M$) của giả thiết dự đoán phát hiện đối tượng ở trạng thái i . Tương tự trường hợp riêng $M = 2$ đã được xem xét ở trên, quy tắc chủ yếu được xác định như sau: Vector $\hat{X}$ của các kì vọng toán được đánh giá theo công thức (6.4) và giả thiết được chấp thuận theo đó thì $\hat{X} \in G_i$, $i = 1, \dots, M$. Giả sử $\hat{X} \in G_i$, khi đó lực lượng của tiêu chuẩn tức là xác suất quyết định đúng được xác định theo công thức:

$$P_d(\hat{X}, G_i) = \int_{G_i} P\left(\frac{\hat{X}}{\mu}\right) d\mu \quad (6.61)$$

6.5. ĐÁNH GIÁ CHẤT LƯỢNG CỦA QUYẾT ĐỊNH CHẤP NHẬN

Để xác định xác suất tin cậy của quyết định được chấp nhận (6.60), (6.61), cần tính tích phân mật độ phân bố xác suất chuẩn đa chiều. Việc lập bảng các kết quả tính toán của hàm xác suất phân bố chuẩn một, hai, ba chiều được phổ biến rộng rãi, nhưng việc sử dụng những bảng số này, một mặt không thuận tiện, ngay cả khi tính toán một lần, mặt khác hầu như không thể sử dụng vào các hệ tự động hoá. Ngoài ra, việc sử dụng bảng số để tính tích phân trên vùng của cấu trúc phức tạp từ mật độ phân bố xác suất chuẩn là không thể được. Bài toán trở nên khá phức tạp với sự gia tăng kích thước. Do đó việc lập thuật toán tiện dụng cho phép tính các tích phân được nhắc đến trên vùng cấu trúc bất kì với độ chính xác đã cho trong tỉ lệ thực của thời gian – bài toán có tầm quan trọng hàng đầu.

Với mục đích đó có thể sử dụng các phương pháp số và các phương pháp Monte – Carlo. Các phương pháp số bị hạn chế từng phần, bởi chất lượng của chúng phụ thuộc đáng kể vào dạng của vùng lấy tích phân. So sánh với các phương pháp Monte – Carlo, để thực hiện chúng cần ít thời gian máy và đảm bảo độ chính xác cần thiết, tuy nhiên các phương pháp Monte – Carlo nổi trội bởi tính vạn năng và tính đơn giản trong thực hành.

Dưới đây giới thiệu thuật toán để tính tích phân chuẩn đa chiều trên miền đã cho của cấu trúc bất kì bằng phương pháp Monte– Carlo.

Xác suất rơi của vectơ ngẫu nhiên phân bố chuẩn $X = (x_1, \dots, x_m)$ chiều m với kì vọng toán $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_m)$ và ma trận covariation $W_{m \times m}$ vào vùng G đa chiều – m là tích phân dạng:

$$P = \int_G \int \frac{1}{[(2\pi)^m \det W]^{\frac{1}{2}}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (X - \mu)^T W^{-1} (X - \mu) \right\} dx \quad (6.62)$$

Để thuận tiện ghi chép ta đưa vào kí hiệu: $Y = X - \mu$;

$$W^{-1} = V = \left\| D_{ij} \right\|_{m \times m}$$

Khi đó: $(X - \mu)^T W^{-1} (X - \mu) = Y^T V Y = A(X, Y)$

Bản chất của phương pháp Monte– Carlo là ở việc mô hình hoá một loạt các thực hành của vectơ ngẫu nhiên $X = (x_1, \dots, x_m)$ và tính tỉ số của số rơi vào vùng G và số lượng chung của các giá trị được trình diễn.

Đưa vào ma trận trực giao $\alpha = \left\| \alpha_{ij} \right\|_{m \times m}$ sao cho các cột của ma trận là các vectơ riêng của ma trận V . Khi đó:

$$\alpha^T V \alpha = K = \left\| \begin{array}{cccc} k_{11} & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & k_{mm} \end{array} \right\|$$

Trong đó:

k_{ij} , $i = 1, \dots, m$, là số riêng i của ma trận V ;

α^T là ma trận chuyển vị.

Ta kí hiệu: $(X - \mu) = \alpha K_1^{-1} Z$

Ở đây:
$$K_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{k_{11}} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \sqrt{k_{mm}} \end{pmatrix}$$

Thì
$$Z = K_1 \alpha^{-1} (X - \mu) = K_1 \alpha^T (X - \mu) \quad (6.63)$$

Trong các kí hiệu mới, dạng toàn phương (6.63) được viết như sau:

$$A(Y; Y) = Z^T (K_1^{-1}) \alpha^T V \alpha K_1^{-1} Z = Z^T K_1^{-1} K K_1^{-1} Z = Z^T Z$$

Bởi vì α và K_1 là những ma trận tương ứng của các vectơ riêng và các số của ma trận V , Jacôbian của sự biến đổi như vậy bằng $[\det W]^{\frac{1}{2}}$. Như vậy, tích phân (6.62) có dạng:

$$P = \int_{G'} \int \frac{1}{(2\pi)^{\frac{m}{2}}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m Z_i^2 \right\} dZ \quad (6.64)$$

Ở đây, G' là ánh xạ của vùng G trong không gian tọa độ Z được tính theo (6.63).

Từ hệ thức (6.64) ta thấy, các tọa độ của vectơ Z độc lập và phân bố chuẩn cùng với các kì vọng toán bằng không và phương sai bằng một.

Như vậy, nếu mô hình hoá vectơ ngẫu nhiên m chiều $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_m)$, ở đây $\xi_i \sim N(0; 0,1)$ và $\text{cov}(\xi_i, \xi_j) = 0$ khi $i \neq j$ và biến đổi nó theo biểu thức:

$$\eta = \mu + \alpha K_1^{-1} \xi \quad (6.65)$$

thì $\eta = (\eta_1, \dots, \eta_m)$ sẽ là vectơ ngẫu nhiên phân bố chuẩn với các kì vọng toán μ và ma trận covariation W .

Giả sử, theo hệ thức (6.65), n giá trị của vectơ ngẫu nhiên η được tính và giả sử các giá trị v nào đó từ chúng thuộc vùng G . Khi đó:

$$\hat{p} = \frac{v}{n} \quad (6.66)$$

là ước lượng giá trị tích phân (6.62) được tính theo phương pháp Monte – Carlo.

Độ chính xác của ước lượng (6.66) phụ thuộc vào n – dung tích mẫu. Trong trường hợp được xem xét ta có sơ đồ Becnuli, bởi vì ở mỗi thí nghiệm có hai tình huống: rơi hoặc không rơi khi thực hành của vectơ ngẫu nhiên η vào vùng G . Xác suất của cả hai tình huống trong mỗi thực nghiệm là không đổi. Biết rằng:

$$P\left(\left|\frac{v}{n} - p\right| \geq \varepsilon\right) \leq \frac{p(1-p)}{n\varepsilon^2} \leq \frac{1}{4n\varepsilon^2}$$

Từ đây, dung lượng cần thiết của các vectơ m – chiều được xác định từ hệ thức:

$$n = \frac{1}{4} \alpha \varepsilon^2 \quad (6.67)$$

Trong đó:

ε – độ chính xác cần có của phép tính tích phân (6.62);

$(1 - \alpha)$ – độ tin cậy đạt tới của độ chính xác cần có.

Ước lượng của dung tích mẫu được tính theo hệ thức (6.67), nói chung là cao hơn, vì nó nhận được cho trường hợp xấu nhất, khi $p = q = 0,5$. Để xác định xác suất khác biệt p từ 0,5 với độ chính xác ε , dung tích mẫu n được tính theo (6.67) vượt xa dung lượng tối thiểu cần để đạt tới độ chính xác cần có. Việc phát sinh một lượng dư các vectơ ngẫu nhiên n làm tăng thời gian cần để tính toán xác suất p .

Để khắc phục trở ngại này ta quy định độ chính xác thô tính toán tích phân (6.62) $\varepsilon_1 > \varepsilon$ và đối với dung tích mẫu $n = \frac{1}{4} \alpha_1 \varepsilon_1^2$, ở đây $\alpha_1 \leq \alpha$, ta tìm ước lượng $\hat{p}_{n_1}$. Cuối cùng, khối lượng chọn lọc được xác định theo hệ thức:

$$n = \max_{p \in [p_{n_1} - \varepsilon_1; p_{n_1} + \varepsilon_1]} \frac{p(1-p)}{\alpha \varepsilon^2}$$

tức là cực đại hoá các trị số của vectơ ngẫu nhiên η được thực hiện.

6.6. NHẬN DẠNG NGUỒN XẢ GÂY Ô NHIỄM VÀO MÔI TRƯỜNG NƯỚC

Để giám sát trạng thái môi trường tự nhiên trước hết cần phải nhận dạng các nguồn gây ô nhiễm. Nhiệm vụ này đặc biệt cấp bách trong điều kiện

thành phố, bởi vì do có một số lượng lớn các nguồn gây ô nhiễm nên rất khó giám sát được từng nguồn. Giải quyết nhiệm vụ này cho phép nhận được không chỉ hiệu quả sinh thái mà còn hiệu quả kinh tế đáng kể do giảm thiểu đến mức thấp nhất các phương tiện kĩ thuật, chẳng hạn các phương tiện đo đạc; để giám sát cục bộ từng nguồn gây ô nhiễm.

Chúng ta hãy xem xét bài toán nhận dạng các nguồn gây ô nhiễm của con sông giữa hai tuyến định hướng được giám sát bằng các hệ được tự động hoá. Các thuật toán đề xuất được xây dựng theo giả định rằng nước chảy vào các đối tượng ô nhiễm có thành phần khác nhau, hoặc (khi có cùng thành phần) khác nhau bởi tỉ lệ các thành phần.

Giả sử trạng thái nước sông trên đoạn khảo sát được giám sát bởi M trạm tự động. Mỗi một trạm giám sát m thông số hoá lí của nước. Ta kí hiệu chỉ tiêu chất lượng nước tại trạm j tức là trong tuyến định hướng được giám sát j . Ở thời điểm t_N bằng kí hiệu: $\hat{X}_j(t_N) = \{\hat{x}_{jp}(t_N)\}$; $j = 1, \dots, M$; $p = 1, 2, \dots, m$. Dấu $\wedge$ trên $\hat{x}$ chỉ ra rằng, đối với tuyến định hướng j người ta biết không chỉ các giá trị chính xác của các thông số được giám sát mà còn cả ước lượng của chúng.

Giả sử, tại thời điểm t_N trong tuyến định hướng j xuất hiện ô nhiễm, nghĩa là:

$$\hat{X}_j(t_N) = \{\hat{x}_{jp}(t_N)\} \in \bar{G}$$

Ở đây: $\bar{G}_j = R - G_j$; R – không gian thông số m chiều;

G_j – vùng m chiều không bị ô nhiễm nước ở tuyến định hướng j

$$G_j = \{\hat{x}_{jp}(t) : \mu_{jp}^1 < \hat{x}_{jp}(t) \leq \mu_{jp}^2; \quad \forall p \in (1, \dots, m)\}$$

(μ_{jp}^1, μ_{jp}^2) – vùng không ô nhiễm nước theo thông số p ở tuyến định hướng j .

Ta tiếp nhận sự tham gia $\hat{X}(t_N)$ vào sự hình thành chất lượng nước ở tuyến định hướng j .

* Tuyến định hướng $(j-1)$ với chất lượng nước $\hat{X}_{j-1}(t_N - \tau_{j-1})$, ở đây, τ_{j-1} là thời gian chảy của nước từ tuyến định hướng $(j-1)$ đến tuyến định hướng j .

* K – các đối tượng được giám sát với nồng độ đã biết của chất thải $Z_{j-1,k}(t_N - \tau_k)$, $k = 1, \dots, K$; với τ_k là thời gian chảy của nước từ đối tượng được giám sát k đến tuyến định hướng j).

* R – các đối tượng không được giám sát, các đối tượng này ở chế độ làm việc bình thường thải ra nồng độ $Y_{j-1,\tau}(t_N - \tau)$, $\tau = 1, \dots, R$ (trong chế độ có sự cố có khả năng bổ sung $\Delta Y_{j-1,\tau}(t_N - \tau)$, $\tau = 1, \dots, R$; ở đây τ_r là thời gian của nước từ đối tượng không được giám sát τ đến tuyến định hướng j).

Những yếu tố không được giám sát khác được gọi là nhiễu, ảnh hưởng của chúng lên chất lượng nước ở tuyến định hướng j ta kí hiệu bằng:

$$\bar{X}_0^j(t) = \{\bar{x}_{0p}^j(t)\}, \quad p = 1, \dots, m$$

Sau khi đưa các kí hiệu vào, mô hình hình thành chất lượng nước ở tuyến định hướng j có dạng:

$$\begin{aligned} \hat{X}_j(t_N) = & F_j \left[\hat{X}_{j-1}(t_N - \tau_{j-1}), \lambda_{j-1}; Z_{j-1,k}(t_N - \tau_k) \right. \\ & \alpha_{j-1,l}(k = 1, \dots, K); Y_{j-1,\tau}(t_N - \tau_r), \\ & \left. \beta_{j-1,r}(r = 1, \dots, R) \right] + \bar{X}_0^j(t_N), \end{aligned}$$

Trong đó:

F_j – toán tử đã biết phù hợp với quá trình hình thành chất lượng nước ở tuyến định hướng j;

$\tau, \lambda, \alpha, \beta$ – các thông số đặc trưng cho thời gian chảy của nước đến tuyến định hướng j và đặc điểm của sự hình thành chất lượng nước ở tuyến đó.

Khi có sự ô nhiễm, tức là khi $\hat{X}_j(t_N) \in \bar{G}$, mô hình hình thành chất lượng nước có dạng:

$$\begin{aligned} \hat{X}_j(t_N) = & F_j \left[\hat{x}_{j-1}(t_N - \tau_{j-1}), \lambda_{j-1}; Z_{j-1,k}(t_N - \tau_k), \alpha_{j-1,l}(k = 1, \dots, K); \right. \\ & Y_{j-1,r_1}(t_N - \tau_1); \beta_{j-1,r_1}(r_1 \in R'); \\ & \left. Y_{j-1,r_2}(t_N - \tau_2); \beta_{j-1,r_2}(r_2 \in R') \right] \end{aligned} \quad (6.68)$$

Ở đây, $R' \cup R'' = R$, $R' \cap R'' = \emptyset$, hơn nữa phép chia tập hợp R ra các tập hợp con R' và R'' đã được biết đến.

Bài toán gồm việc chia tập hợp R ra các tập hợp con R và R' ở thời điểm phát hiện sự ô nhiễm. Khi phát hiện sự ô nhiễm ở tuyến định hướng j bằng toán tử F_j (từ 6.68), các nồng độ chất gây ô nhiễm ở tuyến định hướng j được

xác định, giả thiết rằng sự xả gây sự cố là do một hoặc hai ... hoặc R đối tượng không được giám sát, tức là các điểm m chiều được tính:

$X_j^{i_1 \dots i_r}(t_N)$ ở đây $i_j \in (1, \dots, R)$, $i_{j_1} \neq i_{j_2}$; r – số đối tượng nước được kiểm soát bị nghi vấn trong việc xả thải gây ô nhiễm cùng một lúc. Số điểm $X_j^{i_1 \dots i_r}(t_N)$ đối với mỗi tập hợp từ r_R đối tượng bằng C_R^r , còn số lượng chung của tất cả các điểm bằng $\sum_{r=1}^R C_R^r = 2^R - 1$. Cần giải đáp, tập hợp nào của các đối tượng được giám sát r gây ra việc thải gây ô nhiễm, tức là cần kiểm tra giả thiết:

$$H_i: M(\hat{X}_j(t_N)) = X_j^{i_1 \dots i_r}(t_N), i = 1, 2, \dots, 2^R - 1 \quad (6.69)$$

Căn cứ vào thông tin tiên nghiệm hiện có có thể xem xét các phương pháp khác nhau để kiểm định giả thiết (6.69). Cùng với sự gia tăng thông tin tiên nghiệm, việc sử dụng những thủ tục phức tạp hơn chấp nhận quyết định trở nên có thể được, đảm bảo được độ xác thực cao hơn. Chúng ta hãy xem xét những phương pháp này căn cứ vào sự gia tăng khối lượng thông tin tiên nghiệm cần thiết.

6.6.1. Phương pháp phân loại các nguồn xả gây sự cố trên cơ sở các kết quả đo

Trong những trường hợp khi quy luật phân bố xác suất của đại lượng đo $\hat{X}_j(t_N)$ còn chưa biết thì thủ tục ra quyết định được dựa trên khoảng cách giữa các điểm $\hat{X}_j(t_N)$ và $X_j^{i_1 \dots i_r}(t_N)$:

$$d_{i_1 \dots i_r} = d(\hat{X}_j(t_N), X_j^{i_1 \dots i_r}(t_N)) \quad (6.70)$$

Đối tượng không được giám sát hay tập hợp của chúng tương ứng với khoảng cách tối thiểu (6.70) được coi là nguồn khởi xướng ô nhiễm. Thuật toán phát hiện nguồn khởi xướng ô nhiễm có dạng: Đối với $r = 1$, các điểm $X_j^i(t_N)$ được tính theo (6.68) và các khoảng cách tương ứng (6.70). Phần tử nhỏ nhất d_1^* được chọn trong số đó. Số lượng các đối tượng nghi vấn được tăng lên một đơn vị, tức là $r = 2$. Các điểm $X_j^{i_1, i_2}(t_N)$ và các khoảng cách tương ứng d_{i_1, i_2} được tính để từ đó chọn ra phần tử nhỏ nhất $d_2^* \dots$. Từ các giá trị $d_1^*, d_2^*, \dots, d_n^*$ xác định khoảng cách nhỏ nhất và các đối tượng làm xuất hiện nguồn khởi xướng xả nước thải ứng với phần tử đó. Trong trường hợp khi chỉ một và chính đối tượng đó có thể xả những nồng độ khác nhau gây ô

nhhiem, cần xem xét chúng như là sự xả nước thải từ các đối tượng không được giám sát khác nhau và sử dụng thuật toán đã giới thiệu ở trên.

Độ tin cậy của việc ra quyết định trong thuật toán đó phụ thuộc vào mức nhiều $X_0(t)$. Với sự gia tăng của tỉ số $\frac{M(\hat{X}_j(t_N))}{\sqrt{D(\bar{X}_0^j(t))}}$, xác suất nhận dạng không đúng các nguồn ô nhiễm giảm dần.

Khi không có ma trận hiệp biến của vectơ đo $\hat{X}_j(t_N)$ khoảng cách Ocolit được sử dụng xem như khoảng cách d:

$$d_{i_1 \dots i_r} = (\hat{X}_j(t_N) - X_j^{i_1 \dots i_r}(t_N))^T (\hat{X}_j(t_N) - X_j^{i_1 \dots i_r}(t_N))$$

Trong tuyến định hướng j, trạng thái nước được kiểm soát bằng các trạm tự động, nhờ đó ma trận hiệp biến W được đánh giá trên cơ sở thông tin đo đạc đã tích lũy được $\hat{X}_j(t_N)$, $N = 1, 2, \dots$

Với tư cách là số đo khoảng cách, người ta sử dụng khoảng cách Makhalanôbit:

$$d_{i_1 \dots i_r} = (\hat{X}_j(t_N) - X_j^{i_1 \dots i_r}(t_N))^T W_j^{-1} (\hat{X}_j(t_N) - X_j^{i_1 \dots i_r}(t_N))$$

Ưu điểm của phương pháp này là dễ thực hiện và nhu cầu tối thiểu về thông tin tiên nghiệm, nhưng ngay cả khi có thông tin đó cũng không thể sử dụng nó bởi vì trong phương pháp này tất cả các nguồn ô nhiễm đều rất nguy hiểm.

Dưới đây giới thiệu một phương pháp khác xác định nguồn khởi xướng xả chất thải gây sự cố ô nhiễm.

6.6.2. Phương pháp dựa trên gia số mật độ phân bố xác suất các kết quả đo

Để nhận biết dạng nguồn ô nhiễm có thể tiếp cận phương pháp X.Trerkisxky sau đây.

Đặc trưng xác suất của vectơ ngẫu nhiên $\bar{X}_0^j(t)$ có thể được xác định bằng cách xử lý thống kê các giá trị $\bar{X}_0^j(t_N)$, $N = 1, 2, \dots$, được tính theo hệ thức:

$$\bar{X}_0^j(t_N) = \hat{X}_j(t_N) - F_j[\cdot]_{t=t_N}; \quad N = 1, 2, \dots$$

Trên cơ sở hệ thức này và hệ thức $\Delta \bar{X}_0^j(t_N) = \bar{X}_0^j(t_N) - \bar{X}_0^j(t_{N-1})$ với $N = 1, 2, \dots$, ta tìm mật độ phân bố xác suất các gia số $\Delta X_0^j(t)$. Phân tích quá trình làm sạch và xả nước thải của đối tượng được giám sát r và dựa vào định luật các số lớn ta xác định mật độ phân bố các gia số nồng độ $\Delta y_{j-1,r}$ khi xả nước thải gây sự cố. Tuyến tính hoá toán tử F_j ở (6.68) trên cơ sở mật độ phân bố xác suất tìm được đối với ΔX_0 và $\Delta Y_{j-1,r}$, ta xác định mật độ phân bố xác suất các gia số nồng độ ở tuyến định hướng j căn cứ vào việc xả nước thải gây sự cố bởi đối tượng được giám sát r ($r = 1, \dots, R$).

Khi phát hiện sự cố ô nhiễm ở tuyến định hướng j , ta tính gia số nồng độ ở tuyến định hướng và theo các mật độ xác suất R đã tìm được để phát hiện các phần tử xác suất tương ứng với gia số nồng độ theo tính toán. Đối tượng không được giám sát đó chấp nhận nguồn khởi xướng gây ô nhiễm vì phần tử xác suất lớn nhất ứng với đối tượng không được giám sát này.

Phương pháp này cũng có nhiều hạn chế. Đòi hỏi phải biết các quy luật phân bố nhiễu ngẫu nhiên $\bar{X}_0^j(t)$ cũng như sự gia tăng nồng độ các thành phần nước thải khi có sự cố đối với từng đối tượng không được giám sát. Việc nhận được những phân bố này, nhất là sự gia tăng nồng độ – là một công việc rất phức tạp và nặng nề. Chúng phải được xác định riêng rẽ đối với từng đoạn sông bị khảo sát. Khi đồng thời xảy ra sự cố do nước thải của một số đối tượng không được giám sát, phương pháp được đề xuất sẽ có những sai số đáng kể, bởi vì mật độ xác suất của các gia số nồng độ các thành phần được giám sát bị biến mất trong giả thiết không có sự xả đồng thời của một số đối tượng không được giám sát. Việc tính tới sự xả nước thải gây sự cố "tập thể" trong phương pháp này, về nguyên tắc, là có thể, nhưng trong trường hợp đó cần biết các mật độ phân bố sự gia tăng nồng độ các thành phần chất thải trong trạng thái sự cố, tức là biết tất cả mật độ phân bố có thể $\Delta y_{j-1,r}$, $r = 1, \dots, R$. Điều đó làm cản trở việc giải bài toán thực tiễn. Phương pháp này đòi hỏi thực hiện một số lượng lớn phép tính, trong đó có phép tính tích phân xác suất.

Ví dụ, giữa các tuyến định hướng $(j-1)$ và j có hai đối tượng không được giám sát. Các chỉ tiêu chất lượng nước sông ở các tuyến định hướng này, các đặc trưng xác suất nhiễu $\bar{X}_0^j(t)$, cũng như nồng độ chất thải ở trạng thái bình thường y_{ir} và trong trạng thái sự cố $y_{ir \max}$ được giới thiệu trong bảng 6.2.

BẢNG 6.2. CÁC CHỈ TIÊU XÁC SUẤT CHẤT LƯỢNG NƯỚC Ở TRẠNG THÁI BÌNH THƯỜNG VÀ TRẠNG THÁI GẶP SỰ CỐ CỦA XẢ NƯỚC THẢI GÂY Ô NHIỄM

Chỉ tiêu chất lượng nước	$X_{i,j-1}$		$\frac{y_{i1}}{y_{i2max}}$	$\frac{y_{i2}}{y_{i2max}}$	σ_{i0}	$\hat{x}_{ij}(t)$		μ_{ij}
	$T = t_1 - \tau$	$T = t_2 - \tau$				$t = t_1$	$t = t_2$	
Lưu lượng m^3/s	50	50	$\frac{1}{5}$	$\frac{0,5}{1,0}$	3	52	50	—
Hàm lượng các cấu tử $mg//Clorua$	290	300	$\frac{400}{105}$	$\frac{300}{8000}$	20	323	400	350
Sunfat	300	350	$\frac{700}{2300}$	—	25	374	374	500
Nitơ amoni	1,450	1,400	$\frac{5}{800}$	—	0,1	1,40	1,5	2,00
Sản phẩm dầu mỡ	0,026	0,027	—	$\frac{0,04}{0,20}$	0,001	0,027	0,3	0,05
Sắt	0,190	0,170	—	$\frac{1}{10}$	0,02	0,18	0,2	0,50

Chấp nhận: $M(\bar{X}_0(t)) = 0$, $D(\bar{X}_0(t)) = \sigma^2$, μ_{ij} nồng độ giới hạn cho phép của thành phần i trong tuyến định hướng j . Nồng độ các muối clorua và sản phẩm dầu mỡ ở $t = t_2$ cao hơn nồng độ giới hạn cho phép tương ứng, điều đó chỉ ra sự tồn tại sự ô nhiễm ở tuyến định hướng j bởi đối tượng thứ hai gây ra.

Các phương trình mô tả gần sát các điều kiện xả nước thải vào hồ chứa được sử dụng làm mô hình (6.68):

$$x_y(t) = \begin{cases} x_{i,j-1}(t-\tau) & \text{khi } i=1 \\ \frac{1}{x_{1,j}(t)} \left[x_{i,j}(t-\tau)x_{1,j-1}(t-\tau) + \sum_{r=1}^2 y_{ir} \right] + x_{i0} & \text{khi } i=2, \dots, 6 \end{cases}$$

Trong công trình nghiên cứu của Trekinxki, gia số mật độ phân bố xác suất nồng độ $\Delta y_{i-1,r}$ đã được tính sẵn khi xả gây sự cố. Giá trị lớn nhất ứng với mật độ phân bố xác suất khi xả bởi đối tượng thứ hai. Đối tượng thứ hai thừa nhận là nguồn khởi xướng ô nhiễm.

**BẢNG 6.3. CÁC KẾT QUẢ TÍNH TOÁN NỒNG ĐỘ THÀNH PHẦN I
Ở TUYẾN ĐỊNH HƯỚNG J TẠI THỜI ĐIỂM t_2**

Chỉ tiêu chất lượng nước	$x_{1i}(t_2)$	$x_{2i}(t_2)$	$x_{3i}(t_2)$
Lưu lượng, m ³ /giây	50,0	50	50
Hàm lượng các cấu tử, mg/l			
– Clorua	10300,5	468	10464
– Sunfat	580,0	364	580
– Nitơ amoni	81,4	1,5	81,4
– Sản phẩm dầu mỏ	0,0274	0,031	0,031
– Sắt	0,18	0,370	0,370
Khoảng cách Makhalanôbit	957818,03	72444,970	964112,390
Khoảng cách Ôclit	9958,00	68,732	10066,420

Trong bảng 6.3 giới thiệu kết quả tính toán $x_{1i}(t_2)$ – nồng độ thành phần i ở tuyến định hướng j tại thời điểm t_2 trong giả thiết, rằng sự xả gây ô nhiễm (sự cố) do đối tượng không được giám sát thứ nhất, $x_{2i}(t_2)$ – trong giả thiết, rằng sự xả do cả hai đối tượng đồng thời. Các đại lượng D_j^2 và d_j , $j = 1, 2, 3$ – khoảng cách Makhalanôbit và Ôclit giữa các điểm sáu chiều $x_1(t_2)$, $x_2(t_2)$ và điểm $\hat{x}_j(t_2)$. Bởi vì $D_2^2 < D_1^2 < D_3^2$, đồng thời $d_2 < d_1 < d_3$, chúng ta kết luận rằng: đối tượng thứ hai đã xả nước thải gây sự cố ô nhiễm. Việc sử dụng khoảng cách Ôclit trong các tính toán tỏ ra được ưa thích hơn so với khoảng cách Makhalanôbit, bởi vì trong trường hợp thứ nhất phương sai nhiều ngẫu nhiên $\bar{X}_0^j(t)$ không được sử dụng.

6.6.3. Kiểm định những giả thiết đơn giản đối với các nguồn xả gây sự cố

Trong các trường hợp, khi nhờ sự xử lý sơ bộ thông tin do hoặc từ những lập luận lí thuyết nào đó dựa trên các kết quả của thực nghiệm, có thể xác

lập được sự ổn định mật độ phân bố xác suất các kết quả đo $\hat{X}_j(t_N)$, để ra quyết định đối với nguồn khởi xướng ô nhiễm tốt nhất sử dụng thông tin tiên nghiệm và ra quyết định cuối cùng một cách xác đáng hơn. Phương pháp này bảo đảm lực lượng đã cho của tiêu chuẩn. Bản chất của bài toán như sau:

Trên cơ sở điểm m chiều đo được $\hat{X}_j(t_N)$ cần thừa nhận một trong các giả thiết (6.69). Dưới đây để đơn giản hoá ghi chép chúng ta sẽ sử dụng các kí hiệu:

x_j – điểm đo chiều m trong không gian X^m của phép đo.

a_i – kì vọng toán của điểm đo X khi H_i đúng tức là $X = \hat{X}_j(t_N)$,
 $a_i \equiv X^{i_1 \dots i_N}(t_N)$;

$P(H_i)$ – xác suất tiên nghiệm của giả thiết H_i ;

$P\left(\frac{X}{H_i}\right)$ – phân bố xác suất X trong điều kiện giả thiết H_i đúng,

$\delta(X) = \{\delta_1(X), \dots, \delta_S(X)\}$ – quy tắc giải quyết.

$$\delta_i(X) = \begin{cases} 1 & \text{nếu quyết định giả thiết } H_i \text{ đúng} \\ 0 & \text{trong trường hợp ngược lại} \end{cases}$$

$E_{ij} = \{X: \delta_i(X) = 1\}$ – miền chấp nhận giả thiết H_i .

Bởi vì, các giả thiết H_i , $i = 1, \dots, S$ là không giao nhau, nên $E_i \cap E_j = 0$
 và $\bigcup_{i=1}^S E_i = X^m$, trong đó S là số giả thiết.

Giả sử, giả thiết H_i là đúng, đưa vào hàm số mất mát $L(H_i, \delta(X))$, khi đó sự rủi ro ứng với giả thiết H_i được xác định như sau:

$$P(H_i, \delta(X)) = \int_{X^m} L(H_i, \delta(x)) P(X) | H_i) dX$$

Hàm số rủi ro $\delta(x)$ đối với từng quy tắc quyết định:

$$R(\delta(x)) = \sum_{i=1}^S P(H_i, \delta(x)) P(H_i) = \sum_{i=1}^S P(H_i) \int_{X^m} L(H_i, \delta(x)) P(X | H_i) dX \quad (6.71)$$

Bài toán bao gồm việc phát hiện quy tắc quyết định $\delta^*(X)$, tức là các E_i , $i = 1, \dots, s$ miễn chấp nhận tính đúng của các giả thiết H_i :

$$R(\delta^*(X)) = \min_{\{\delta(x)\}} R(\delta(X)) \quad (6.72)$$

Chúng ta xem xét trường hợp khi tổn thất do chấp nhận các giả thiết sai là như nhau, còn tổn thất do chấp nhận giải pháp đúng bằng 0, tức là:

$$L(H_i, H_j) = \begin{cases} C & \text{khi } i \neq j \\ 0 & \text{khi } i = j \end{cases} \quad (6.73)$$

Khi đó hàm số của sự rủi ro bằng:

$$R(\delta(x)) = \sum_{i=1}^s P(H_i) C = \sum_{j=1, j \neq i}^s \int_{E_j} P(X|H_i) dX = C \left(1 - \sum_{i=1}^s P(H_i) \sum_{E_i} P(X|H_i) dX \right) \quad (6.74)$$

Cực tiểu trong (6.74) đạt được bằng cách giải bài toán:

$$\sum_{i=1}^s P(H_i) \int_{E_j} P(X|H_i) dX \Rightarrow \max_{\{E_i\}} \quad (6.75)$$

Từ đây, ta thấy rằng có thể chấp nhận $C = 1$ mà không hạn chế tính tổng quát. Bài toán (6.75) được giải như sau:

$$E_i = \{X: P(H_i) P(X|H_i) > P(H_j) P(X|H_j)\}; \quad (6.76)$$

$$\forall j \in (1, \dots, i-1, i+1, \dots), i = 1, \dots, s$$

Chúng ta viết lại biểu thức (6.71) như sau:

$$R(\delta(x)) = \sum_{i=1}^s \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^s L(H_i, H_j) P(H_i) \int_{E_j} P(X|H_i) dX \quad (6.77)$$

Để dễ dàng nhận thấy rằng vùng tối ưu E_j chấp nhận giả thiết H_j cực tiểu hoá hàm số rủi ro (6.77) có dạng:

$$E_j = \left\{ X \sum_{i=1, i \neq k}^s L(H_i, H_j) P(H_i) P(X|H_i) < \sum_{i=1, i \neq j}^s L(H_i, H_k) P(H_i) P(X|H_i) \right. \\ \left. \forall k \in (1, 2, \dots, j-1, j+1, \dots, s) \right\} \quad i = 1, \dots, s \quad (6.78)$$

Nếu $L(H_i, H_j) = 0$ thì vùng tối ưu E_j chấp nhận giả thiết được rút gọn:

$$E_j = \left\{ X: \sum_{i=1, i \neq k}^s L(H_i)P(X|H_i) < \sum_{i=1, i \neq k}^s L(H_i, H_k)P(H_i)P(X|H_i); \right. \\ \left. \forall k \in (1, 2, \dots, j-1, j+1, \dots, s) \right\} \quad i = 1, \dots, s$$

Giả sử, các kết quả đo tuân theo quy luật chuẩn phân bố xác suất. Về lý thuyết, điều đó được giải thích bởi việc kết quả đo ảnh hưởng lên tập hợp của những yếu tố đa dạng, một phần tương đối trong sai số đo là bằng nhau. Định lý giới hạn của lý thuyết xác suất cho phép chấp nhận sai số tổng có phân bố chuẩn. Ngoài ra, khi phân tích các số liệu thực nghiệm nhận được bằng máy phân tích AMA – 201 trên sóng Kura, khẳng định giả thiết về tính chuẩn của phân bố xác suất các kết quả đo.

Không giới hạn ở tính tổng quát, ta xem xét trường hợp không tương quan của các cấu tử của vectơ đo $X = (x_1, \dots, x_m)$, bởi vì bằng phép khử tương quan sơ bộ bao giờ cũng có thể có được vectơ đo với các cấu tử không đối xạ từ vectơ đo với các cấu tử tương quan. Như vậy, sau đây sẽ giả sử, vectơ $X = (x_1, \dots, x_m)$ tuân theo quy luật phân bố xác suất chuẩn:

$$P(X|H_i) = (2\pi)^{-\frac{m}{2}} \sigma^{-m} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^m (x_i - \alpha_E^i)^2 \right\} \quad (6.79)$$

Ta kí hiệu vùng E_i chấp nhận quyết định về tính đúng của giả thiết H_{ij} :

$$E_{ij} = \left\{ X: P(H_i)P(X|H_i) > P(H_j)P(X|H_j) \right\} \quad (6.80)$$

Khi đó vùng E_i chấp nhận giả thiết H_i (6.76) trong trường hợp hàm tổn thất bậc (6.73) được viết lại dưới dạng:

$$E_i = \bigcap_{j=1, j \neq i}^s E_{ij}$$

Tính đến (6.79) và (6.80), đối với vùng E_{ij} ta có:

$$E_{ij} = \left\{ X \sum_{i=1}^m (a_\ell^i - a_\ell^j) x_\ell > \lambda_{ij} \right\}$$

$$\text{Ở đây: } \lambda_{ij} = \sigma^2 \ln \frac{P(H_j)}{P(H_i)} - \frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^m \left[(a_\ell^i)^2 - (a_\ell^j)^2 \right];$$

Khi đó vùng E_i chấp nhận giả thiết H_i được viết dưới dạng:

$$E_i = \left\{ X \sum_{\ell=1}^m (a_{\ell}^i - a_{\ell}^j) x_{\ell} > \lambda_{ij}; \quad \forall j \in (1, \dots, i-1, i+1, \dots, s) \right\}$$

Như vậy, đối với những vùng xác định chấp nhận quyết định hàm số rủi ro được tính theo hệ thức:

$$R(\delta(X)) = C \left\{ 1 - \sum_{i=1}^s P(H_i) \prod_{j=1, j \neq i}^s \left[1 - \Phi \left(\frac{\lambda_{ij} - \sum_{\ell=1}^m (a_{\ell}^i - a_{\ell}^j) a_{\ell}^i}{\sigma \sqrt{\sum_{\ell=1}^m (a_{\ell}^i - a_{\ell}^j)^2}} \right) \right] \right\}$$

Trong đó, $\Phi(\cdot)$ là hàm số lập bảng chuẩn của phân bố chuẩn.

Ta nghiên cứu trường hợp hàm tổng thể bất kì. Ta kí hiệu:

$$E_{jk} = \left\{ X : \sum_{i=1}^s L(H_i, H_j) P(H_i) P(X|H_i) < \sum_{i=1, k \neq i}^s L(H_i, H_k) P(H_i) P(X|H_i); \quad k \neq j \right\} \quad (6.81)$$

Vậy thì vùng E_j chấp nhận giả thiết H_j (6.78) được viết lại như sau:

$$E_j = \bigcap_{k=1, k \neq j}^s E_{jk} \quad (6.82)$$

Ta biến đổi (6.81) như sau:

$$\begin{aligned} E_{jk} & \left\{ X : \sum_{i=1}^s L(H_i, H_j) - L(H_i, H_k) P(H_i) P(X|H_i) < \right. \\ & \left. < [L(H_s, H_k) - L(H_s, H_j)] P(H_s) P(X|H_s) \right\} \quad k \neq j \end{aligned} \quad (6.83)$$

Đối với tính xác định, ta giả sử, $[L(H_s, H_k) - L(H_s, H_j)] > 0$ và viết (6.83) dưới dạng:

$$E_{jk} = \left\{ X : \sum_{i=1}^{s-1} \frac{L(H_i, H_j) - L(H_i, H_k) P(H_i)}{L(H_s, H_k) - L(H_s, H_j) P(H_s)} \cdot \frac{P(X|H_i)}{P(X|H_s)} < 1 \right\}, \quad k \neq j$$

Có tính đến (6.79) sau những phép biến đổi không phức tạp, ta có:

$$E_{jk} = \left\{ X: \sum_{i=1}^{s-1} \lambda_{jk}^i \cdot \exp \left\{ \frac{1}{\sigma^2} \sum_{t=1}^m (a_t^i - a_t^j) x_t \right\} < 1 \right\}, \quad k \neq j \quad (6.84)$$

$$\text{Ở đây: } \lambda_{jk}^i = \frac{L(H_i, H_j) - L(H_i, H_k)P(H_i)}{L(H_s, H_k) - L(H_s, H_j)P(H_s)} \exp \left\{ \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^m (a_t^i)^2 - (a_t^i) \right\}$$

Hàm số rủi ro ứng với vùng chấp nhận tính đúng của giả thiết H_j (6.82), trong giả thiết đó E_{jk} được xác định bằng biểu thức (6.84), được tính theo hệ thức (6.77), trong đó:

$$\begin{aligned} \int_{E_j} P(X|H_i) dX &= P(X \in E_j | H_i) = P \left(X \in \bigcap_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^s E_{jk} | H_i \right) = \\ &= \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^s P(X \in E_{jk} | H_i) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^s P \left(\sum_{i=1}^{s-1} \lambda_{jk}^i \exp \left\{ \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^m (a_t^i - a_t^j) x_i \right\} < 1 | H_i \right) \end{aligned} \quad (6.85)$$

Nếu ta kí hiệu mật độ quy ước phân bố xác suất của đại lượng ngẫu nhiên:

$$\xi_{kj} = \sum_{i=1}^{s-1} \lambda_{jk}^i \exp \left\{ \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^m (a_t^i - a_t^j) x_t \right\} = P_{kj} \left(\frac{Z}{H_i} \right); \text{ thì (6.85) được viết}$$

lại dưới dạng:

$$\int_{E_j} P(X|H_i) dX = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^s \int_{-\infty}^1 P_{kj} \left(\frac{Z}{H_i} \right) dZ$$

và hàm rủi ro (6.77) có dạng:

$$R(\delta(x)) = \sum_{i=1}^s \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^s L(H_i, H_j) \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^s \int_{-\infty}^1 P_{kj} \left(\frac{Z}{H_i} \right) dZ$$

Việc tìm trực tiếp mật độ $P_{kj} \left(\frac{Z}{H_i} \right)$ đối với ξ_{kj} tổ hợp tuyến tính của các

đại lượng phân bố ngẫu nhiên chuẩn không làm được. Sự xấp xỉ của nó có thể tính bằng chuỗi Edward:

$$P_{kj}\left(\frac{Z}{H_i}\right) = \alpha(Z) - \frac{1}{3!} \frac{[\mu_3]_{kj}^i}{\left[\frac{\mu_2^2}{2}\right]_{kj}^i} \alpha^{(3)}(Z) + \frac{1}{4!} \frac{[\mu_4]_{kj}^i}{[\mu_2^2]_{kj}^i} \alpha^{(4)}(Z) -$$

$$- \frac{1}{5!} \left[\frac{[\mu_5]_{kj}^i}{\left[\frac{\mu_2^2}{2}\right]_{kj}^i} - \frac{[\mu_3]_{kj}^i}{\left[\frac{\mu_2^2}{2}\right]_{kj}^i} \right] \alpha^{(5)}(Z) + \frac{10}{6!} \frac{[\mu_5]_{kj}^i}{\left[\frac{\mu_2^2}{2}\right]_{kj}^i} \alpha^{(6)}(Z) \quad (6.86)$$

Trong đó:

$[\mu_r]_{kj}^i$ – mômen trung tâm r của đại lượng ngẫu nhiên ξ_{kj} ;

$\alpha(z)$ – mật độ chuẩn của phân bố xác suất;

$\alpha^{(i)}(z)$ – đạo hàm i của $\alpha(z)$.

Các tính chất tiệm cận của chuỗi Edward được G. Klame khảo sát và chỉ ra rằng, trong những điều kiện chung, chuỗi (6.86) hiển nhiên đem lại khai triển tiệm cận $P_{kj}(z)$ với số hạng dư bậc một của thành phần vút bỏ đầu tiên. Các số hạng của bậc $s^{-\ell/2}$ (ở đây s – số hạng trong đại lượng ngẫu nhiên ξ_{kj}) trong chuỗi Edward chứa các mômen $\mu_3, \dots, \mu_{\ell+2}$, các mômen này cần thiết cho phép tính gần đúng của bậc này.

Các mômen trung tâm $[\mu_r]_{kj}^i$ được xác định bằng các mômen gốc tương ứng $[\mu'_r]_{kj}^i$, đối với chúng ta có:

$$[\mu'_r]_{kj}^i = \sum_{p_1=1}^{s-1} \dots \sum_{p_r=1}^{s-1} (\lambda_{j,k}^{p_1} \dots \lambda_{j,k}^{p_r}) \exp\left(\frac{1}{2} D\left(\frac{U_{p_1, \dots, p_r}^j}{H_i}\right) + M\left(\frac{U_{p_1, \dots, p_r}^j}{H_i}\right)\right)$$

$$\text{Ở đây: } U_{p_1, \dots, p_r}^j = \sum_{i=1}^r Y_{p_i, j} = \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^r \sum_{\ell=1}^m (\alpha_{\ell}^{p_i} - \alpha_{\ell}^j) x_{\ell};$$

$$M\left(\frac{U_{p_1, \dots, p_r}^j}{H_i}\right) = \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^r \sum_{\ell=1}^m (\alpha_{\ell}^{p_i} - \alpha_{\ell}^j) \alpha_{\ell}^i;$$

$$D\left(\frac{U_{p_1, \dots, p_r}^j}{H_i}\right) = \sum_{\ell=p_1, \dots, p_r} S_{e_j}^2 + 2 \sum_{\ell, k=p_1, \dots, p_r} K_{\ell, k}^j;$$

Ở đây: $S_{\ell j}^2$ – phương sai của đại lượng ngẫu nhiên;

$K_{\ell,k}^j$ – tương quan giữa các đại lượng ngẫu nhiên $y_{\ell,j}$ và $y_{k,j}$.

6.6.4. Xác định hàm số tổn thất

Dạng của hàm số tổn thất cần được chọn sao cho đơn giản trong sử dụng, hàm số phản ánh được tối đa đặc trưng của bài toán khảo sát. Như đã biết, hàm số tổn thất bậc hai là thuận tiện nhất. Hàm bậc hai phản ánh tốt bản chất của bài toán khảo sát: các điểm ô nhiễm giả thiết trong không gian đó càng cách xa nhau thì khoản phạt càng lớn, trong việc chấp nhận quyết định sai. Khi đó, cần tính toán từng tọa độ không gian của điểm đo với trọng số tương ứng với sự nguy hiểm của thành phần gây ô nhiễm. Chúng tôi đưa vào hàm số phạt có dạng sau:

$$L(H_i, H_j) = \sum_{\ell=1}^m (\alpha_{\ell}^i - \alpha_{\ell}^j)^2 C_{\ell}$$

Trong đó :

$\alpha_1^i \dots \alpha_m^i$, $\alpha^i = (\alpha_1^i, \dots, \alpha_m^i)$ – các điểm của không gian đo chiều m ứng với các giả thiết H_i và H_j ;

C_{ℓ} – hệ số trọng lượng phụ thuộc vào mức độc hại của thành phần ℓ .

Các giá trị C cần lấy khác nhau trong những tình thế khác nhau căn cứ vào mục đích cụ thể đặt ra trước nhiệm vụ phát hiện.

Ngoài ra cần phải tính toán mức độ ô nhiễm của nước được giám sát trong giả thiết H_i và H_j .

Hàm số tổn thất bậc thang nêu trên (6.73) phù hợp với tình huống, khi xác định không đúng nguồn gây ô nhiễm, bởi vì đằng sau nó là quyền lợi của các xí nghiệp (hoặc các bộ phận của xí nghiệp) sẽ bị kết tội sai vi phạm về luật sử dụng nước. Hàm số tổn thất như thế biểu thị quyền lợi của xí nghiệp một cách tốt nhất; đối với từng xí nghiệp việc buộc tội không đúng trong việc gây ô nhiễm môi trường là điều không mong muốn. Dạng hàm số tổn thất không bậc thang phản ánh một cách chính xác hơn quyền lợi của các cơ quan tổ chức bảo vệ thiên nhiên, với độ xác thực cao hơn cho phép

phát hiện những xí nghiệp gây ra ô nhiễm môi trường bởi các chất độc hại. Trong những trường hợp, khi mà việc áp dụng một cách khách quan hàm số tổn thất căn cứ vào thiệt hại mang lại bởi từng xí nghiệp là khó khăn, thay vì bài toán không điều kiện của Bayer (6.72), việc kiểm định giả thiết (6.69) có thể chuyển sang bài toán Bayer có điều kiện, trong đó hàm số tổn thất được đưa vào không tương minh dưới dạng các ràng buộc lên xác suất phát hiện sai các nguồn gây ô nhiễm.

6.6.5. Kiểm định các giả thiết phức tạp đối với các nguồn xả nước thải gây ra sự cố

Chúng ta kí hiệu số lượng các nguồn xả nước thải không được kiểm soát là R . Mỗi nguồn xả m_r ($r = 1, \dots, R$) thông số. Số lượng tổng cộng các thông số được giám sát bằng m , thêm vào đó $m_r \leq m, \forall r \in (1, \dots, R)$. Đối với mỗi nguồn xả nước thải được quy định những vùng chiều m_r những giá trị có thể có của các chất được thải ra khi làm việc ở trạng thái bình thường $\theta_r \in X^m$ và những vùng của những giá trị có thể có những chất được thải ra khi có sự cố ($\Omega_r \in X^m$, ở đây X^m – không gian thông số chiều m_r) thêm vào đó $\theta_r \cap \Omega_r = 0$. Nếu $\theta_r \cap \Omega_r \neq 0$, thì đối tượng thải r gọi là không nhận biết được bởi vì không có khả năng phân biệt một cách minh bạch trạng thái bình thường và trạng thái sự cố của đối tượng r . Nếu $\Omega_r = \Omega_j$ thì các nguồn xả gây sự cố r và j là không khác nhau. Nếu $\Omega_r \cap \Omega_j \neq 0$ thì các nguồn xả r và j trong cùng một trạng thái (khi xả chất thải gây sự cố) có thể là khác nhau, trong những trạng thái khác – không khác nhau. Ta gọi những đối tượng xả thải gây sự cố như vậy là những đối tượng bán dị biệt.

Ta kí hiệu các thông số xả của đối tượng r bằng $y_r = (y_1^r, \dots, y_{m_r}^r)$, $r = 1, \dots, R$. Trên cơ sở những kí hiệu được đưa vào, mô hình hình thành chất lượng nước ở tuyến định hướng j có dạng:

$$\hat{X}_j(t_N) = F_j \left[\begin{array}{l} \hat{X}_{j-1}(t_N - \tau_{j-1}), \lambda_{j-1}; \\ Z_{j-1,k}(t_N - \tau_k), \alpha_{j-1,k} \quad (k = 1, \dots, K) \\ Y_{j-1,r}(t_N - \tau_r), \beta_{j-1,r} \quad (r = 1, \dots, R) \\ Y_{j-1,r} \in \theta_r, r = 1, \dots, R \end{array} \right] + \bar{X}_0^j(t_N)$$

Khi tồn tại sự ô nhiễm, mô hình hình thành chất lượng nước có dạng:

$$\hat{X}(t_N) = F_j \begin{bmatrix} \hat{X}_{j-1}(t_N - \tau_{j-1}), \lambda_{j-1}; \\ Z_{j-1,k}(t_N - \tau_k), \alpha_{j-1,k} \quad (k=1, \dots, K) \\ Y_{j-1,r_1}(t_N - \tau_{r_1}), \beta_{j-1,r_1} \quad (r_1 \in R') \\ Y_{j-1,r_2} + \Delta Y_{j-1,r_2}, \beta_{j-1,r_2} \quad (r_2 \in R'') \end{bmatrix} + \bar{X}_0^j(t_N) \quad (6.87)$$

$$R' \cup R'' = R; R' \cap R'' = \emptyset; Y_{j-1,r_1} \in \Theta_{r_1}, \quad r_1 \in R';$$

Trong đó :

$$Y_{j-1,r_2} + \Delta Y_{j-1,r_2} \in \Omega_{r_2}; \quad r_2 \in R''$$

Khi phát hiện ô nhiễm ở tuyến định hướng j , nhờ toán tử F_j từ (6.87) tính được các điểm m chiều $A_j^{i \dots i_r}(t_N)$ tương ứng với nồng độ ở tuyến định hướng j trong giả thiết, một, hai... hoặc R đối tượng không được giám sát đã để xảy ra sự cố, thêm vào đó các nồng độ có xác suất cao hơn của các chất gây ô nhiễm được gán cho từng đối tượng. Nồng độ có xác suất cao hơn được coi là nồng độ ăn khớp với lời giải của bài toán tối ưu hoá sau đây:

$$A_j^{i \dots i_r}(t_N) = \arg \min_{\{Y\}} d(\hat{X}_j(t_N), F_j[\bullet])$$

Với điều kiện $Y_{j-1}, \eta \in \Theta_\eta, r_1 \in R'; Y_{j-1,r_2} \in \Omega_{r_2}, r_2 \in R''$. Ở đây, $d(\bullet)$ – số đo khoảng cách giữa các vectơ chiều m $\hat{X}_j(t_N)$ và $F_j[\bullet]$. Với tư cách là số đo khoảng cách có thể sử dụng, chẳng hạn, khoảng cách Ôclit hay Makhalanôbit. Chỉ số r chỉ số đối tượng không được giám sát bị nghi vấn trong cùng một sự cố do xả nước thải.

Nếu ta biết mật độ quy ước của sự phân bố xác suất $f\left(\frac{\hat{X}_j(t_N)}{F_j[\bullet]}\right)$ với

$Y_{j-1,\eta} \in \Theta_\eta; r_1 \in R'; Y_{j-1,r_2} \in \Omega_{r_2}, r_2 \in R''$ thì các điểm $A_j^{i \dots i_r}(t_N)$ chiều m được chọn làm mật độ quy ước của chúng. Dưới đây, để xác định nguồn xả có thể sử dụng một trong số các thuật toán đã nêu ở trên để kiểm định giả thiết đối với các điểm $A_j^{i \dots i_r}(t_N)$.

Cũng có thể sử dụng cách làm như sau: nguồn khởi xướng xả thải gây sự cố thừa nhận toàn bộ các đối tượng đối với chúng biểu thức đạt được cực đại.

$$\int f(\hat{X}_j(t_N)/F_j[\bullet]P/F_j[\bullet]/Y_{j-1,t_1} \in \theta_{t_1}, Y_{j-1,t_2} \in \Omega_{t_2})dF_j[\bullet]$$

Trong đó khoảng cách của các nguồn xả được phân bố trên miền các giá trị khả dĩ của toán tử chất lượng nước $F_j[\bullet]$.

6.6.6. Tách các tập hợp xác suất lớn gây ô nhiễm môi trường nước

Cùng với sự tăng số lượng các nguồn xả không được giám sát R , số lượng các điểm được tính toán $A_j^{i_1 \dots i_r}(t_N)$ và số lượng tương ứng các điểm được giám sát H_j của giả thiết tăng lên một cách đáng kể. Khi đó, cách ra quyết định trở nên công kênh và không thuận tiện để thực hiện trong thời gian có thể chấp nhận được trong thực tiễn. Ngoài ra đã biết rằng, chỉ có những phương án được thông báo gần với giả thiết có thực mới ảnh hưởng đến chất lượng kiểm tra giả thiết. Vì vậy, để giảm khối lượng và thời gian cần thiết khi ra quyết định về những nguồn khởi xướng gây ô nhiễm cần phải thực hiện xử lý sơ bộ thông tin do, cho phép loại trừ các giả thiết giả tạo ra khỏi sự nghiên cứu tiếp sau.

Quy tắc cơ bản của lí thuyết đo lường được áp dụng, gồm có các phép đo với xác suất lớn nhất gần cạnh kì vọng toán của chúng. Ta tách vùng xoay quanh điểm $\hat{X}_j(t_N)$, vùng mà điểm $\hat{X}_j(t_N)$ rơi vào với xác suất đã cho trong điều kiện kì vọng toán học của nó thuộc về vùng ấy. Giả sử, đại lượng $\bar{X}_j(t_N)$ được phân bố chuẩn với vectơ của các kì vọng toán μ và ma trận hiệp biến W . Giả thiết về tính chuẩn là không quá thô thiển, bởi vì như đã biết rằng các kết quả đo về căn bản tuân theo phân bố chuẩn.

Khi đó, miền được xác định sẽ có dạng elip, bán kính elip được tính từ điều kiện:

$$P\left(\hat{X}_j(t_N) - X_j^{i_1 \dots i_r}(t_N)\right)^T W_j^{-1} \left(\hat{X}_j(t_N) - X_j^{i_1 \dots i_r}(t_N)\right) \leq \alpha = 1 - \alpha$$

Ở đây, $1 - \alpha$ là xác suất đã cho.

Theo G. Krame, dạng toàn phương

$$Q = \left(\hat{X}_j(t_N) - X_j^{i_1 \dots i_r}(t_N)\right)^T W_j^{-1} \left(\hat{X}_j(t_N) - X_j^{i_1 \dots i_r}(t_N)\right)$$

có phân bố x^2 với các bậc $k = t_r(W_2^{-1}W_j)$ tự do với điều kiện xuất hiện đẳng thức

$$W_j(W_j^{-1}W_jW_j^{-1} - W_j^{-1}) = 0 \quad (6.88)$$

Bởi vì, W_j là ma trận phương sai, nên điều kiện này sẽ được thực hiện và $k = t_r(W_j^{-1}W_j) = t_r(E) = m$.

Như vậy, bán kính elip được xác định bằng cách giải phương trình:

$$P/Q_j \leq \alpha = \int_0^{\alpha} X_m(y) dy = 1 - \alpha \quad \text{theo } \alpha.$$

6.7. TÍNH TOÁN LƯỢNG XẢ GIỚI HẠN CHO PHÉP

Một trong những nhiệm vụ cơ bản trong vấn đề bảo vệ và quản lý trạng thái các đối tượng nước đó là việc xác lập lượng xả giới hạn cho phép các chất gây ô nhiễm cho mỗi hộ tiêu thụ nước xuất phát từ khả năng của đối tượng nước bảo tồn sự cân bằng sinh thái trong tác động đã định. Việc tính toán lượng xả giới hạn cho phép đối với mỗi hộ tiêu thụ nước tại khu vực đã cho của đối tượng nước là tương đối phức tạp, bài toán nhiều yếu tố, cần một lượng thông tin ban đầu khá lớn tích lũy được trong quá trình quan sát: về đặc điểm và trạng thái thủy văn của đối tượng nước; về thành phần và số lượng các chất gây ô nhiễm được thải ra bởi từng nguồn riêng biệt, về khả năng quản lý những sự xả này. Khi giải bài toán này, cần tính toán một cách tổng hợp quyền lợi của tất cả các hộ sử dụng nước, bao gồm: trong tính toán cuối cùng, trong cực tiểu hoá hàm mục tiêu có tính đến sự chi phí vật chất để đảm bảo lượng xả giới hạn cho phép đã cho.

Nên ta kí hiệu C_{ij} – chi phí của xí nghiệp i trong quản lý ảnh hưởng của U_{ij} để duy trì nồng độ chất gây ô nhiễm j trong các giới hạn lượng xả tối hạn cho phép thì bài toán có thể đưa đến sự mini hoá chi phí tổng quát.

$$F = \min \sum_{i=1}^N f_i(X, C_{ij}(U_{ij}), m_i) \quad (6.89)$$

để duy trì nồng độ các chất gây ô nhiễm trong các giới hạn lượng xả tối hạn cho phép tại các điểm được kiểm soát của đối tượng nước.

$\varphi_j(X, a, \lambda) \leq$ lượng xả giới hạn cho phép; $j = 1 \dots m$ có tính đến các khả năng có thể có của xí nghiệp.

$$x_{ij}^{(1)} \leq x_{ij}(U_{ij}) \leq x_{ij}^{(2)}$$

Trong đó:

F_j – phiếm hàm xác định chi phí của nguồn i gây ô nhiễm.

φ_j – phiếm hàm xác định nồng độ chất gây ô nhiễm j tại điểm được kiểm soát căn cứ vào nồng độ chất ô nhiễm (X) được thải ra bởi nguồn gây ô nhiễm, vào vị trí của chúng (α), vào các đặc điểm của đối tượng nước và vào các điều kiện sử dụng nước (λ).

$x_{ij}^{(1)}$ và $x_{ij}^{(2)}$ – giá trị nhỏ nhất và lớn nhất tương ứng trong các giới hạn mà xí nghiệp i có thể duy trì nồng độ chất gây ô nhiễm j .

N – số nguồn gây ô nhiễm.

m_i – số chất gây ô nhiễm được xả ra bởi nguồn gây ô nhiễm i .

m – tổng số chất gây ô nhiễm trong đối tượng nước.

Dạng cụ thể của phiếm hàm $f_i(X, C_{ij}(U_{ij}), m_i)$ phụ thuộc vào đặc điểm sản xuất, dạng chất gây ô nhiễm từ nguồn i , tính chất của các tác động điều khiển và các phương pháp giảm chúng. Mô hình toán $\varphi_i(X, a, \lambda)$ được mô tả trong phần 6.2.

Phương pháp giải bài toán tối ưu (6.89 – 6.91) phụ thuộc vào dạng cụ thể của hàm số. Thường thì là các phương pháp tối ưu phi tuyến sử dụng những tính chất cụ thể của hàm mục tiêu và các ràng buộc. Những phương pháp này đã biết rất rõ, một trong số những phương pháp có khả năng tính toán đánh giá hiệu quả của tất cả các tác động giả thiết từ phía người sử dụng nước là phương pháp mô hình hoá mô phỏng.

Chương VII

MÔ HÌNH KIỂM SOÁT Ô NHIỄM KHÔNG KHÍ

Môi trường không khí bị ô nhiễm bởi hai nguồn: nguồn ô nhiễm tự nhiên và nguồn ô nhiễm nhân tạo. Nguồn ô nhiễm tự nhiên là bụi phun từ núi lửa, các cơn bão lửa... Nguồn ô nhiễm nhân tạo là do hoạt động của con người bao gồm ô nhiễm do sản xuất công nghiệp, ô nhiễm do giao thông vận tải và ô nhiễm do sinh hoạt của con người.

Trong số các loại nguồn ô nhiễm nhân tạo thì ô nhiễm do sản xuất công nghiệp là rất trầm trọng. Các ống thải ở các nhà máy thải ra môi trường không khí rất nhiều loại chất độc hại. Trong quá trình sản xuất, các chất độc hại thoát ra do bốc hơi, rò rỉ, tổn hao trên dây chuyền sản xuất, trên các phương tiện vận tải...

Đặc điểm của chất thải do quá trình sản xuất là nồng độ chất độc hại rất cao và tập trung trong một khoảng không gian nhỏ, thường ở dạng hỗn hợp khí và hơi độc hại. Có các hệ thống thông gió thải khí độc hại. Đối với hệ thống thông gió cục bộ thì nồng độ chất độc hại thải ra khá lớn còn đối với hệ thống thông gió chung thì lượng hỗn hợp khí thải ra lớn, nhưng nồng độ chất độc hại lại thấp.

Khí thải công nghệ và khí thải của hệ thống thông gió cục bộ, trước khi cho thải ra không khí cần qua thiết bị xử lý để làm sạch sơ bộ.

Dưới đây ta sẽ đề cập đến các quy luật cơ bản về khuếch tán bụi, các chất độc hại trong môi trường không khí. Đặc biệt một mô hình kiểm soát ô nhiễm không khí với tên gọi mô hình METILIS do Hiệp hội quản lý môi trường công nghiệp Nhật Bản (JEMAI) chuyển giao cho Trung tâm Tư vấn chuyển giao công nghệ nước sạch và môi trường (CTC) sẽ được xem xét.

7.1. ẢNH HƯỞNG CỦA CÁC YẾU TỐ KHÍ TƯỢNG TỚI SỰ PHÂN BỐ BỤI VÀ CÁC CHẤT ĐỘC HẠI

7.1.1. Ảnh hưởng của gió

Gió là yếu tố có ảnh hưởng lớn nhất tới sự lan truyền các chất ô nhiễm trong không khí. Vì thế ta cần có đầy đủ số liệu về tần suất gió, tốc độ gió theo từng hướng, từng mùa trong cả năm của vùng ta xây dựng công trình.

Tốc độ gió phụ thuộc vào chênh lệch áp suất khí quyển. Tầng không khí sát mặt đất có tốc độ gió ban ngày lớn hơn ban đêm, còn ở trên cao thì ngược lại – tốc độ gió ban đêm lớn hơn ban ngày. Sự phân bố nồng độ chất ô nhiễm phụ thuộc vào tốc độ gió.

7.1.2. Ảnh hưởng của nhiệt độ

Nhiệt độ không khí có ảnh hưởng tới sự phân bố chất ô nhiễm.

Tính năng hấp thụ nhiệt của mặt đất ảnh hưởng đến sự phân bố nhiệt độ không khí theo chiều đứng, thường thì càng lên cao nhiệt độ không khí càng giảm, theo phương đứng gradient nhiệt độ khoảng $1^{\circ}\text{C}/100\text{m}$. Trị số đó thay đổi phụ thuộc vào địa hình bề mặt đất.

Trạng thái không khí có gradient nhiệt độ ngược lại – trên lớn hơn dưới, gọi là sự "nghịch đảo nhiệt". Sự nghịch đảo nhiệt làm yếu sự trao đổi đối lưu, làm giảm sự khuếch tán chất độc hại, làm tăng nồng độ độc hại trong không khí gần mặt đất. Khi thiết kế lắp đặt các ống thải chất độc hại, thì miệng thải của chúng phải cao hơn tầng nghịch nhiệt.

7.1.3. Ảnh hưởng của độ ẩm và mưa

Mưa và độ ẩm lớn có thể làm cho các hạt bụi lơ lửng trong không khí hợp với nhau thành các hạt to hơn và nhanh chóng chìm lắng xuống mặt đất.

Trên mặt đất các vi sinh vật phát tán vào không khí. Nếu độ ẩm lớn các vi sinh vật sẽ phát triển mạnh, bám vào những hạt bụi lơ lửng, bay đi và lây truyền bệnh.

Độ ẩm lớn làm cho các phản ứng hoá học của các chất thải (SO_2 ; SO_3 ; ...) mạnh hơn tạo ra H_2SO_3 ; H_2SO_4 . Mưa có tác dụng làm sạch môi trường không khí, các hạt mưa kéo các hạt bụi và hoà tan một số chất độc hại rơi xuống đất, gây ra ô nhiễm đất và nước.

7.1.4. Ảnh hưởng của địa hình

Địa hình có ảnh hưởng nhiều tới sự phân bố chất độc hại. Những vùng khuất gió, ở sau các đồi gò thường có nồng độ chất độc hại lớn.

7.1.5. Ảnh hưởng của các nhà cửa, công trình

Khi gió thổi vào khu vực có nhà cửa và công trình thì trường chuyển động của gió bị thay đổi. Một số vùng bị khuất gió, tốc độ gió cũng thay đổi, cho nên có ảnh hưởng nhiều tới sự phân bố chất độc hại.

Khi gió thổi thẳng góc với mặt nhà, nhà có chiều ngang hẹp ($b \leq 2,5 H$) thì vùng quần gió ở trên mái nhà và sau nhà dài bằng 6 lần chiều cao nhà và cao bằng 1,8 lần chiều cao nhà.

Nhà có chiều ngang rộng ($b > 2,5 H$) thì vùng quần gió ở trên mái tách riêng ra, dài bằng 2,5 lần chiều cao nhà và cao bằng 0,8 lần chiều cao nhà, còn vùng gió quần ở sau nhà dài bằng 4 lần chiều cao nhà và cao bằng chiều cao nhà. Đối với một khu có nhiều nhà, khi có gió thổi vào thì giữa 2 dãy nhà có vùng gió quần. Nếu dãy nhà ở đầu gió có chiều ngang hẹp thì chiều dài vùng gió quần lên tới mười lần chiều cao nhà, nếu dãy nhà ở đầu gió có chiều ngang rộng thì chiều dài vùng gió quần khoảng 8 lần chiều cao nhà.

Khi khoảng cách giữa các nhà rất lớn ($> 10H$) ta có thể xem như các dãy nhà đứng độc lập.

Trong vùng gió quần, các nguồn gây ô nhiễm thấp sẽ có ảnh hưởng mạnh, chiều cao giới hạn của nguồn:

- Đối với nhà có chiều ngang hẹp, đứng độc lập

$$H_{gh} = 0,36 b_{ng} + 2,5H$$

- Đối với nhà có chiều ngang rộng, đứng độc lập

$$H_{gh} = 0,36b_{ng} + 1,7H$$

- Đối với khu nhà

$$H_{gh} = 0,36 (b_{ng} + X1) + H$$

b_{ng} – khoảng cách từ mép tường sau của nhà tới nguồn ô nhiễm.

$X1$ – khoảng cách thông thủy giữa hai dãy nhà.

Các nguồn ô nhiễm có độ cao lớn hơn chiều cao giới hạn đó, sẽ không gây ô nhiễm cho vùng quần gió ở trên mái nhà và sau nhà.

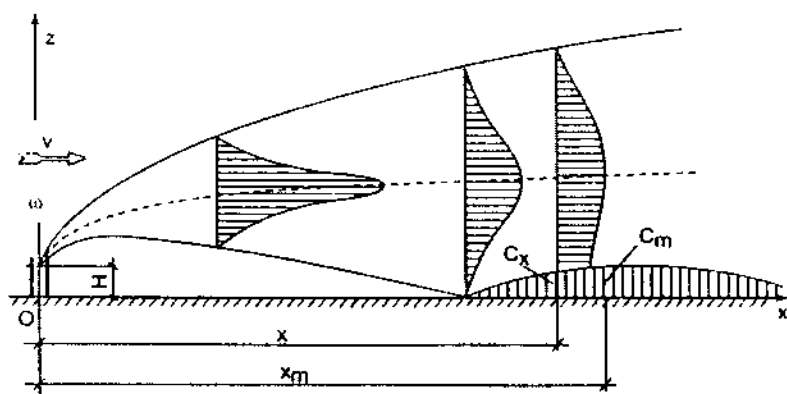
7.2. TÍNH TOÁN NỒNG ĐỘ CHẤT ĐỘC HẠI TRONG KHÔNG KHÍ

7.2.1. Phương trình vi phân cơ bản

Quá trình khuếch tán các chất ô nhiễm trong không khí thường được đặc trưng bằng trị số nồng độ chất ô nhiễm phân bố trong không gian và thay đổi theo thời gian, phụ thuộc vào hướng gió, tốc độ gió.

Các nguồn gây ô nhiễm thải ra qua miệng thải, dưới tác dụng của gió, luồng khí thải bị uốn cong theo chiều gió thổi. Chất ô nhiễm khuếch tán, rộng dần ra, góc mở của luồng $10 \div 20$ độ. Nếu xem góc mở của luồng không thay đổi thì diện tích mặt cắt ngang của luồng tăng theo tỉ lệ bình phương của khoảng cách.

Vùng không khí gần mặt đất bị ô nhiễm thường bắt đầu từ vị trí cách chân ống thải $4 \div 20$ lần chiều cao của ống thải. Vị trí cách chân ống thải $10 \div 40$ lần chiều cao của ống thải có nồng độ ô nhiễm cực đại (hình 7.1).



Hình 7.1. Sơ đồ khuếch tán luồng khí thải ra từ ống khói

Trên mặt cắt ngang của luồng, nồng độ ở trục luồng là lớn nhất và càng ra xa, nồng độ càng giảm dần.

Khi trời lặng gió, luồng khí thải phụt thẳng lên và gây ô nhiễm khoảng không gian xung quanh ống thải.

Tổng quát: Nồng độ trung bình chất ô nhiễm phân bố trong không gian và theo thời gian được xác định từ phương trình vi phân cơ bản.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{u \partial C}{\partial x} + \frac{v \partial C}{\partial y} + \frac{w \partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + \alpha_1 C - \alpha_2 C$$

C – nồng độ chất ô nhiễm trong không khí;

x, y, z – toạ độ của điểm tính toán trong không gian;

t – thời gian; u, v, w – hình chiếu của vector vận tốc gió lên các trục x, y, z;

k_x, k_y, k_z — các thành phần của hệ số khuếch tán chất ô nhiễm;

α_1 — hệ số kể đến sự nhập thêm lượng ô nhiễm trên dòng khuếch tán;

α_2 — hệ số kể đến sự biến hoá từ chất ô nhiễm này sang chất ô nhiễm khác do các phản ứng hoá học xảy ra trên dòng khuếch tán.

Khi giải phương trình trên, thường thừa nhận một số điều kiện gần đúng để đơn giản hoá. Ví dụ, xem nguồn gây ô nhiễm ổn định theo thời gian, ta

$$\text{có } \frac{\partial C}{\partial t} = 0.$$

$$\text{Tính cho mặt phẳng mặt đất } z = \text{const, ta có } \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial^2 C}{\partial^2 z} = 0.$$

Tính sự phân bố chất ô nhiễm theo trục x trùng với hướng gió, thì thành phần tốc độ gió chiếu lên trục y bằng 0.

Chuyển động phương đứng của chất độc hại thường nhỏ so với tốc độ gió, nên có thể bỏ qua.

Đối với các hạt bụi nặng, thành phần W trong phương trình trên sẽ bằng tốc độ rơi của hạt (mang dấu âm), đối với các hạt bụi nhẹ thì $W = 0$. (Trục z hướng từ dưới lên trên).

Nếu bỏ qua hiện tượng chuyển "pha" của chất ô nhiễm và không xét đến các chất ô nhiễm bổ sung trong quá trình khuếch tán thì $\alpha_1 = 0$; $\alpha_2 = 0$.

Tính toán ô nhiễm trong không khí, được phân ra các loại nguồn như sau:

— *Xét về độ cao*: phân ra nguồn thấp và nguồn cao. Nguồn thấp là các nguồn thải từ dây chuyền công nghệ sản xuất, từ các miệng thải của hệ thống gió, từ các cửa mái thoát khí của nhà xưởng... Chúng có độ cao không cao lắm. Chất ô nhiễm phát ra từ các nguồn thấp này, ảnh hưởng lớn tới các vùng gần đó.

Nguồn cao là nguồn phát ra từ các ống thải cao, quá trình khuếch tán ở đây ít chịu ảnh hưởng của các công trình lân cận về mặt khí động.

— *Xét về hình thể*: thì phân thành nguồn điểm, nguồn đường, nguồn mặt và nguồn không gian.

Các miệng ống thải, ống khói, các miệng thải của hệ thống thông gió là nguồn điểm.

Các băng cửa mái, các dãy lỗ thải khí đặt kề nhau và thẳng hàng của hệ thống thông gió, các đoạn đường có mật độ xe chạy nhiều,... là nguồn đường.

Các bãi chứa than, chứa vật liệu có sinh bụi, các bể chứa hoá chất kích thước bề mặt lớn, mặt ao hồ bị ô nhiễm,... là nguồn mặt.

Các vùng gió cuốn bị nhiễm bẩn do dây chuyền công nghệ sản xuất thải ra hoặc do các miệng thải của hệ thống thông gió, tạo thành đám mây bẩn là là trên mặt đất là nguồn không gian.

– *Xét về phương diện nhiệt:* thì phân ra nguồn nóng và nguồn nguội. Các lò nung, lò sấy khí thải của chúng có nhiệt độ cao là nguồn nóng. Các ống thải khí độc hại có nhiệt độ thấp là nguồn nguội.

Thường trong các loại khí thải còn chứa các loại bụi có kích thước và trọng lượng riêng khác nhau, quá trình khuếch tán của chúng khác nhau. Muốn tính toán chính xác thì ta chia phổ ra để tính, chia ra 10 khoảng theo trị số tốc độ rơi w của chúng. Ứng với mỗi khoảng, có trị số tốc độ rơi trung bình w_i ta tính ra nồng độ ô nhiễm C_i , sau đó tập hợp lại.

Với hệ thống lọc bụi có hiệu suất lọc $\geq 90\%$ thì bụi thải ra có phổ như sau:

Hạt có khối lượng riêng $1 \div 2,5 \text{ g/cm}^3$ với $W \leq 5 \text{ cm/s}$ chiếm $40 \div 50\%$.

$W = 5 \div 25 \text{ cm/s}$ chiếm $30 \div 40\%$;

$W > 25 \text{ cm/s}$ chiếm 20% ;

Và thường không có loại $W > 50 \text{ cm/s}$.

Những hạt bụi lớn, nặng sẽ tách khỏi không khí và nhanh chóng rơi xuống mặt đất.

Các hạt nhỏ, kích thước dưới $20 \mu\text{m}$ thường có tốc độ trầm lắng rất nhỏ và khuếch tán cùng với khí ô nhiễm.

Các thiết bị lọc bụi có hiệu suất lọc $> 90\%$ thì hầu như các hạt bụi to đã được thiết bị lọc giữ lại, chỉ có các hạt bụi nhỏ thải ra. Trong tính toán, có thể xem chúng khuếch tán giống như khí ô nhiễm.

Mô hình giải bài toán khuếch tán chất ô nhiễm:

Hiện nay có hơn 20 dạng mô hình tính toán ô nhiễm môi trường không khí, quy tụ có các loại như sau:

1 – Mô hình thống kê kinh nghiệm dựa trên cơ sở lý thuyết toán học Gauss.

2 – Mô hình thống kê thủy động, Berliand (Nga) đã hoàn thiện và áp dụng ở các nước thuộc Cộng đồng các quốc gia độc lập (SNG).

3 – Mô hình METILIS của Nhật Bản dựa trên mô hình ISC của Mỹ.

Các mô hình toán (1,2) thường áp dụng để tính cho các nguồn cao, còn nguồn thấp thì thường dùng công thức kinh nghiệm, bởi vì sự khuếch tán ô nhiễm đối với các nguồn thấp rất khó xác định bằng lý thuyết. Tuy nhiên, mô hình (3) được áp dụng tính cho các nguồn thấp.

7.2.2. Tính toán phân bố nồng độ chất ô nhiễm theo mô hình Gauss

Theo phương trình vi phân tổng quát (7.1), lấy gốc tọa độ là chân ống thải, trục x trùng với hướng gió, trục y trên mặt phẳng ngang và vuông góc với trục x, trục z là trục thẳng đứng, bỏ qua quá trình biến đổi hoá học các chất ô nhiễm trên dòng khuếch tán, xem vận tốc gió v có hướng theo trục x, hình chiếu của vector vận tốc gió lên trục y và z rất nhỏ, có thể bỏ qua, khi đó ta có phương trình vi phân theo mô hình Gauss như sau:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (7.2)$$

Trong đó:

C – nồng độ chất ô nhiễm ở tọa độ x, y, z .

v – tốc độ gió trung bình theo trục x, xem như hằng số.

k_y, k_z – thành phần hệ số khuếch tán khí quyển theo trục ngang y trục đứng z. Sutton và Pasquill đã giải phương trình vi phân bằng biến đổi Fourier, được công thức tính nồng độ chất ô nhiễm theo mô hình Gauss.

$$C_{(x,y,z)} = \frac{E}{2\pi v \sigma_y \sigma_z} \exp \left(\frac{-y^2}{2\sigma_y^2} \right) \left\{ \exp \left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2} \right] + \exp \left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2} \right] \right\} \quad (g/m^3) \quad (7.3)$$

Trong đó:

E (Emission) – lượng chất ô nhiễm phát ra từ nguồn trong một đơn vị thời gian (g/s);

v – tốc độ gió theo trục x (m/s);

σ_y, σ_z – hệ số khuếch tán của khí quyển theo trục ngang y , trục đứng z , phụ thuộc vào tọa độ x của điểm tính toán, trạng thái khí tượng, gradient nhiệt và tốc độ gió trung bình v .

H – chiều cao hiệu dụng của ống thải, $H = h + \Delta h$ (m);

h – chiều cao thực của ống thải (m);

Δh – độ cao phụt lên thẳng của luồng khí thải (m).

Đối với nguồn nguội, nhiệt độ khí thải xấp xỉ nhiệt độ không khí xung quanh

$$\Delta h = k_i \frac{dv_f}{\varphi v_{10}} \quad (7.4)$$

Trong đó:

k_i – hệ số khuếch tán chất ô nhiễm ($k_i = 1,6 \div 2,0$);

d – đường kính miệng thải ra của ống thải, (m);

v_f – tốc độ trung bình khí thải phụt ra tại miệng ra ống thải (m/s); φ – trị số xét đến sự biến thiên tốc độ gió theo chiều cao, lấy chiều cao của miệng ra ống thải, tra φ ở bảng 2 – 12;

v_{10} – tốc độ gió trung bình ở độ cao 10^m (m/s).

Nồng độ chất ô nhiễm trên mặt đất ($z = 0$), từ công thức 2–9 ta có:

$$C_{(x,y,0)} = \frac{E}{Hv\sigma_y\sigma_z} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{y^2}{\sigma_y^2} + \frac{H^2}{\sigma_z^2} \right) \right]$$

BẢNG 7.1. PHÂN LOẠI MỨC ỔN ĐỊNH CỦA KHÍ QUYỂN ĐỂ XÁC ĐỊNH σ_y VÀ σ_z

v_{10} (m/s)	Gradient nhiệt (°C/100m)						
	$\geq 2,1$	$2 \div 1$	$0,9 \div 0,7$	$0,6 \div 0,1$	$-1 \div -1,4$	$-1,5 \div -2$	$\leq -2,1$
1	1	2	3	4	5	6	7
2	1	2	3	4	5	6	7
3	2	2	3	4	5	6	7
4	2	3	3	4	5	5	6
5÷7	–	–	4	4	4	4	–
8	–	1	4	4	4	–	–

BẢNG 7.2. TRỊ SỐ σ_y PHỤ THUỘC MỨC ĐỘ ỔN ĐỊNH CỦA KHÍ QUYỂN VÀ KHOẢNG CÁCH X(M) TỪ NGUỒN

MỨC ỔN ĐỊNH	KHOẢNG CÁCH x(m)						
	100	200	500	1000	2000	5000	10000
1	4	7	13	22	32	55	75
2	6	10	18	30	45	80	110
3	8	14	28	49	76	140	190
4	12	20	40	70	125	260	400
5	16	28	60	115	195	440	780
6	22	38	90	175	370	950	–
7	29	52	140	380	1000	1400	–

BẢNG 7.3. TRỊ SỐ σ_z PHỤ THUỘC MỨC ĐỘ ỔN ĐỊNH CỦA KHÍ QUYỂN VÀ KHOẢNG CÁCH X(M) TỪ NGUỒN

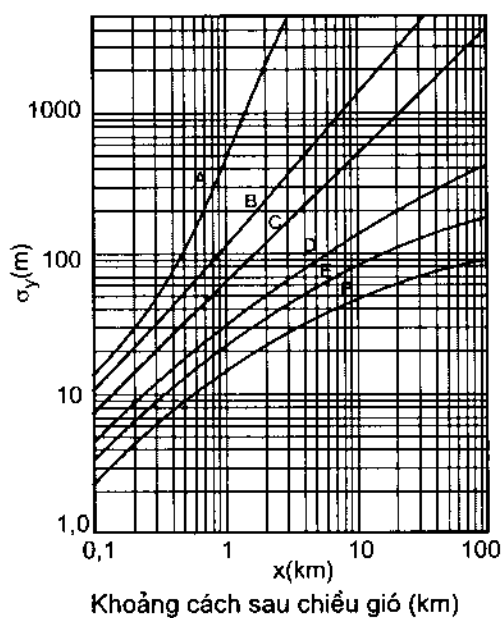
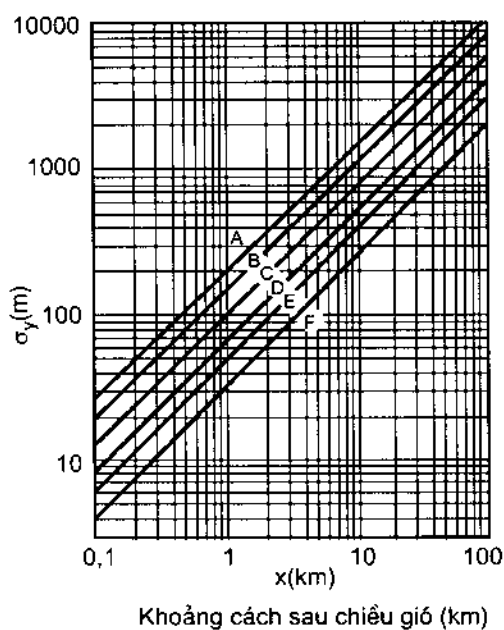
MỨC ỔN ĐỊNH	KHOẢNG CÁCH x(m)						
	100	200	500	1000	2000	5000	10000
1	4	6	11	17	26	45	78
2	5	8	16	27	41	078	135
3	8	12	25	44	70	130	240
4	12	20	40	70	125	260	650
5	18	30	60	120	220	530	2000
6	25	42	240	550	1650	4000	–
7	34	63	60	800	4000	–	–

σ_y , σ_z – hệ số khuếch tán theo phương ngang y và phương đứng z. Nó phụ thuộc vào độ ổn định của khí quyển.

Theo Pasquill, độ ổn định của khí quyển phân ra 6 cấp A, B, C, D, E, F tùy thuộc vận tốc gió và mức độ chiếu sáng của mặt trời ban ngày hoặc mức che phủ của mây ban đêm.

VẬN TỐC GIÓ	BỨC XẠ MẶT TRỜI (BAN NGÀY)			LƯỢNG MÂY CHE (BAN ĐÊM)	
(m/s)	Mạnh	Vừa	Yếu	1/2	3/8
< 2	A	A – B	B	–	–
2 ÷ 3	A ÷ B	B	C	E	F
3 ÷ 5	B	B ÷ C	C	D	E
5 ÷ 6	C	C ÷ D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D

Từ thực nghiệm Gifford lập ra biểu đồ để tra σ_y , σ_z :



Hình 7.2. Biểu đồ để tra σ_y , σ_z

7.2.3. Tính toán phân bố nồng độ chất độc hại theo mô hình thống kê thủy động học

A. I. Vocicov dưới sự chỉ đạo của Berliand, trên cơ sở phát triển phương pháp của Taylor, nghiên cứu sự khuếch tán chất ô nhiễm trong khí quyển theo mô hình thống kê thủy động học, giải phương trình vi phân tổng quát, có công thức tính nồng độ chất ô nhiễm ở điểm có tọa độ x, y trên mặt phẳng gần sát mặt đất ($z = 1 \div 2m$) đối với nguồn điểm:

$$C_{(x,y)} = \frac{E}{2(1+n)k_1\sqrt{\pi} k_0 x^{3/2}} \exp\left(-\frac{v_l H^{1+n}}{(1+n)^2 k_1 x} - \frac{y^2}{4k_0 x}\right) \quad (7.5)$$

Trong đó:

v_l – tốc độ gió trung bình ở độ cao 1m;

$k_1; k_0$ – hệ số khuếch tán chất ô nhiễm ở độ cao $Z = 1m; Z = 0$ (thường khi khuếch tán rối $k_1 = 0,1 \div 0,2$; $k_0 = 0,5 \div 1$;

E – lượng chất ô nhiễm;

n – số mũ của hàm biến thiên tốc độ gió theo chiều cao (thường lấy $n = 0,15 \div 0,02$).

Nồng độ chất độc hại cực đại trên mặt đất (C_{max}) ở điểm có tọa độ x_m trên trục x (hướng gió).

$$\text{Điều kiện là } \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial y} = 0$$

$$C_{max} = \frac{0,116(1+n)^2 E}{v_l H^{1,5(1+n)}} \sqrt{\frac{k_1}{k_0 v_l}} \quad (7.6)$$

$$x_{max} = \frac{2}{3} \frac{v_l H^{1+n}}{k_1(1+n^2)} \quad (7.7)$$

Khi z tăng lên thì khoảng cách x_{max} sẽ nhỏ dần, tức là lớp không khí cách mặt đất càng cao, vị trí có nồng độ cực đại càng xích lại gần nguồn. Độ biến thiên nồng độ độc hại ở khoảng $x < x_{max}$ mạnh hơn khi $x > x_{max}$.

Tốc độ gió nguy hiểm: Ta cần xác định nồng độ lớn nhất của chất độc hại, đối chiếu với tiêu chuẩn vệ sinh của nhà nước, để tìm ra chiều cao tối thiểu cần thiết của ống thải.

Với một tốc độ gió mà ứng với nó nồng độ chất ô nhiễm trong không khí gần mặt đất đạt trị số lớn nhất thì gọi đó là tốc độ gió nguy hiểm.

M.B.Berliand xác định tốc độ gió nguy hiểm qua một đại lượng tốc độ trung gian V_m như sau:

– Đối với nguồn nóng

$$V_m = 0,65 \sqrt{\frac{L_f \Delta T}{H}} \quad (\text{m/s}) \quad (7.8)$$

– Đối với nguồn nguội

$$V_m = 1,3 \frac{w_f D}{H} \quad (\text{m/s}) \quad (7.9)$$

Trong đó:

L_f – thể tích của hỗn hợp khí phụt ra từ miệng ống thải (m^3/s);

$$L_f = w_f F_f \quad (\text{m}^3/\text{s});$$

F_f – diện tích miệng ra của ống thải (m^2);

w_f – tốc độ khí phụt ra ở miệng thải (m/s);

ΔT – hiệu số nhiệt độ khí phụt ra và không khí xung quanh ($^{\circ}\text{C}$);

D – đường kính miệng ra của ống thải (m).

$$\left. \begin{array}{l} V_m \leq 0,5 \text{ thì tốc độ gió nguy hiểm } V_{nh} = 0,5 \text{ (m/s)} \\ 0,5 < V_m \leq 2 \text{ thì tốc độ gió nguy hiểm } V_{nh} = V_m \\ V_m > 2 \text{ thì tốc độ gió nguy hiểm } V_{nh} = V_m (1 + 0,12 \sqrt{f}) \end{array} \right\} \quad (7.10)$$

f – chuẩn số phân biệt nguồn nóng hay nguồn nguội:

$$f = 10^3 \frac{w_f D}{H^2 \Delta T} \quad (7.11)$$

Trong đó:

w_f – tốc độ khí phụt ra ở miệng thải (m/s);

D – đường kính miệng ra của ống thải (m);

Khi $f < 100 \text{ m/s}^2 \text{ } ^{\circ}\text{C}$ và $\Delta T > 0$ là nguồn nóng;

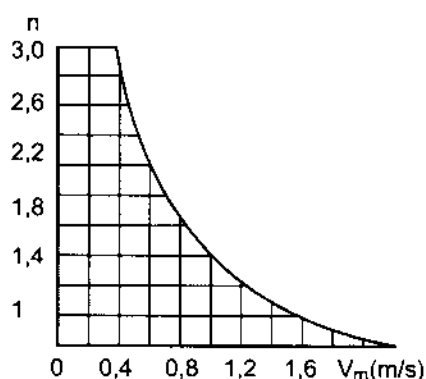
Khi $f > 100 \text{ m/s}^2 \text{ } ^{\circ}\text{C}$ và $\Delta T \leq 0$ là nguồn nguội;

Các công thức tính toán khuếch tán chất ô nhiễm trong không khí thải ra từ các nguồn điểm cao nóng và nguội của Berliand nêu ở bảng 7.5.

A – hệ số tính chất phân tầng của khí quyển ($120 \div 270$);

M – lượng chất ô nhiễm do ống thải thải ra (g/s hoặc mg/s);

F – hệ số hơi và khí $F = 1,0$;



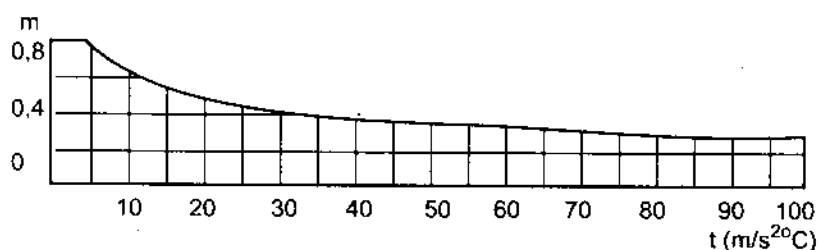
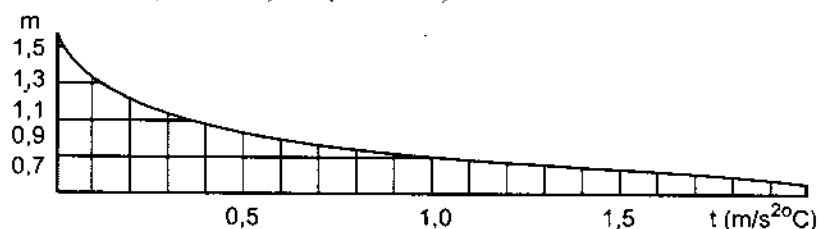
Hình 7.3. Biểu đồ xác định hệ số n đối với nguồn điểm cao

Bụi mà thiết bị lọc có hiệu suất $> 90\%$ $F = 2,0$

Bụi mà thiết bị lọc có hiệu suất $75\% \div 90\%$ $F = 2,5$

Bụi mà thiết bị lọc có hiệu suất $< 75\%$ $F = 3,0$

n, m – hệ số không thứ nguyên, xét đến hỗn hợp phụt ra từ ống thải, xác định theo biểu đồ (hình 7.4) và (hình 7.4).



Hình 7.4. Biểu đồ xác định hệ số m đối với nguồn điểm cao

Trong đó:

L – thể tích của hỗn hợp khí thải ra từ ống thải (m^3/s);

S_x, S_y – đại lượng phụ trợ, dùng để xác định nồng độ chất ô nhiễm phân bố theo trục x và trục y ;

Xác định S_x , S_y theo biểu đồ (hình 2- 8a, 2- 8b, 2-9);

H – chiều cao thực của ống thải (m);

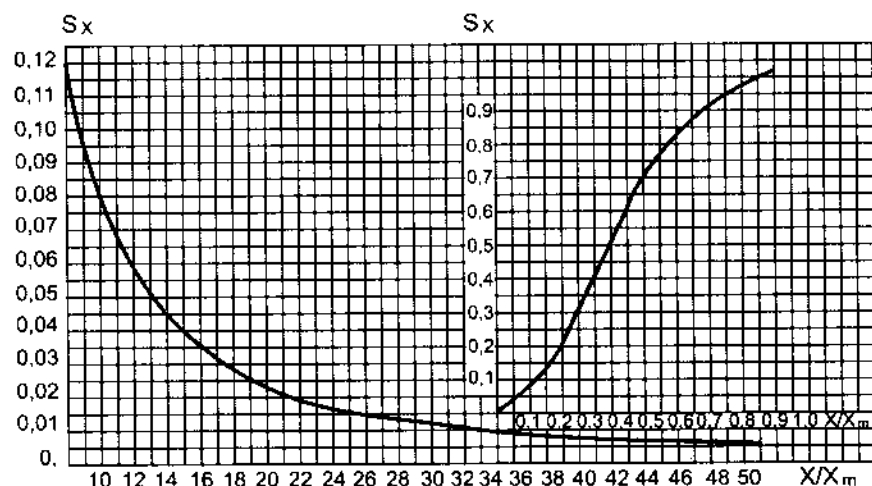
d – đại lượng không thứ nguyên, xác định d theo biểu đồ (hình 2 – 10);

$\sum E$ – tổng lượng chất ô nhiễm của các nguồn cùng tác dụng;

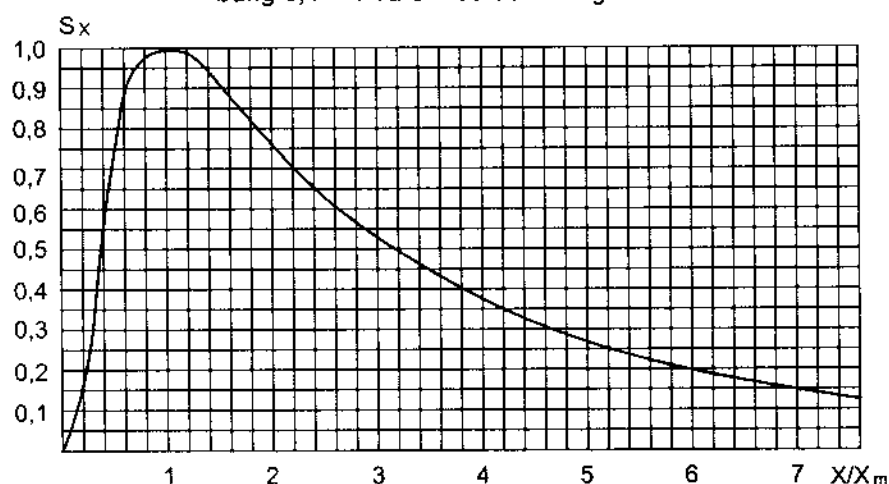
N – tổng số nguồn (tổng số các ống thải);

C_r – trị số cho phép nồng độ chất ô nhiễm (g/m^3);

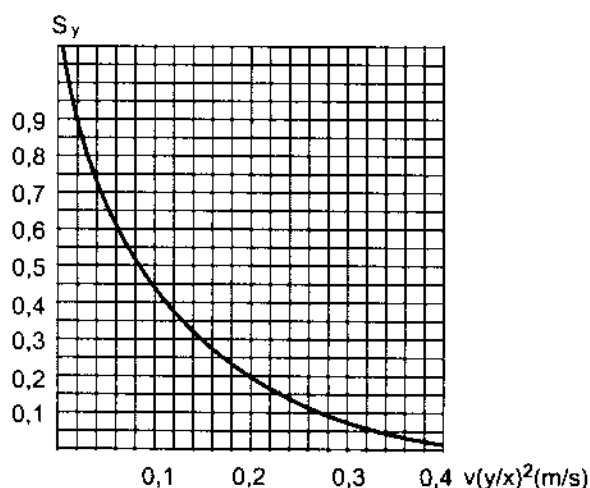
C_n – nồng độ nền của chất ô nhiễm trong không khí (g/m^3)



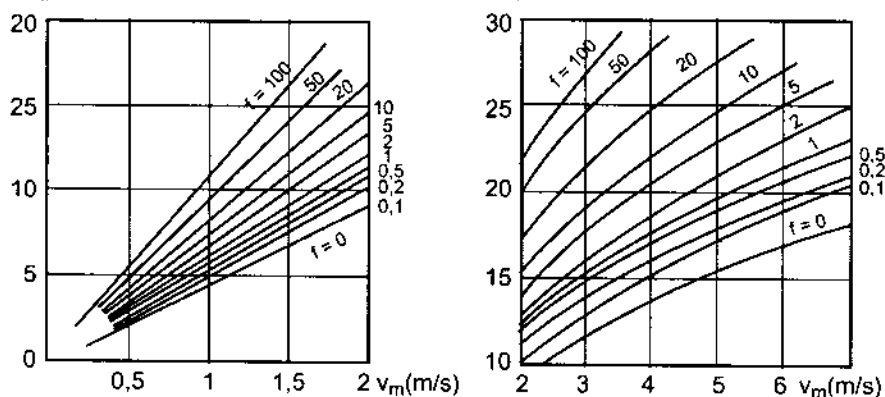
Hình 7.5a. Biểu đồ xác định đại lượng phụ trợ S_x khi tỉ số x/x_m bằng 0,1 ÷ 1 và 8 ÷ 50 đối với nguồn điểm cao



Hình 7.5b. Biểu đồ xác định đại lượng phụ trợ S_x khi tỉ số x/x_m bằng 1 ÷ 8 đối với nguồn điểm cao



Hình 7.6. Biểu đồ xác định đại lượng phụ trợ S_y đối với nguồn điểm cao



Hình 7.7. Biểu đồ xác định đại lượng phụ trợ d

BẢNG 7.5. CÔNG THỨC TÍNH Ô NHIỄM KHÔNG KHÍ DO CÁC NGUỒN CAO
(Theo M.E. Berliand)

TT	ĐẠI LƯỢNG	NGUỒN NÓNG $f < 100; \Delta T > 0$ $f(\text{m/s}^2 \text{ } ^\circ\text{C})$	NGUỒN NGUỘI $f > 100; \Delta T \leq 0$ $f(\text{m/s}^2 \text{ } ^\circ\text{C})$
1	Nồng độ chất độc hại lớn nhất trong không khí gần mặt đất $C_m(\text{mg/m}^3)$, do nguồn điểm cao thải ra, tại vị trí cách nguồn x_m theo chiều gió thổi	$C_m = \frac{AMFmn}{H^2 \sqrt{L\Delta T}} \quad (7.12)$ Ở Việt Nam có thể chọn $A = 240$ $M (\text{g/s})$ $L (\text{m}^3/\text{s}); H(\text{m})$	$C_m = \frac{AMFDn}{8LH^3 \sqrt{H}} \quad (7.13)$ $D(\text{m})$

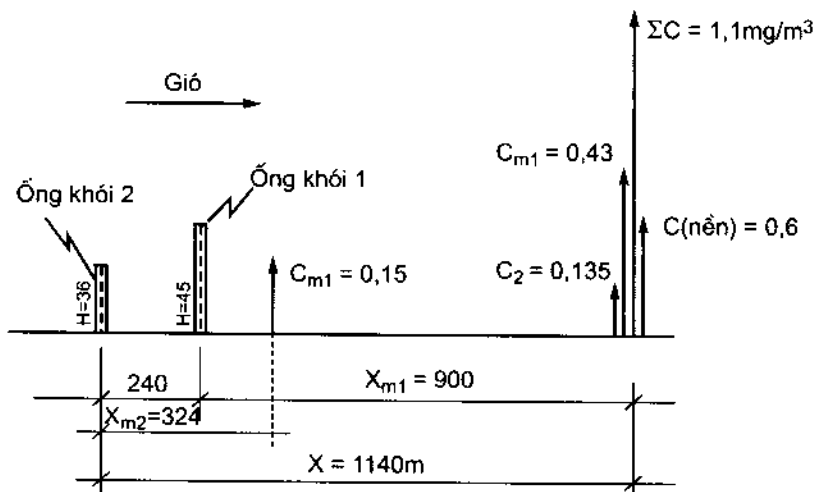
TT	ĐẠI LƯỢNG	NGUỒN NÓNG $f < 100; \Delta T > 0$ $f(m/s^2 \text{ } ^\circ C)$	NGUỒN NGUỘI $f > 100; \Delta T \leq 0$ $f(m/s^2 \text{ } ^\circ C)$
2	Vận tốc V_m (m/s)	$V_m = 0,65 \sqrt[3]{\frac{L\Delta T}{H}} \quad (7.14)$	$V_m = 1,3 \frac{w_f D}{H} \quad (7.15)$
3	Nồng độ chất độc hại $C_x(mg/m^3)$ tại vị trí cách nguồn x theo chiều gió thổi	$C_x = C_m S_x \quad (7.16)$	
4	Nồng độ chất độc hại $C_y(mg/m^3)$ tại vị trí cách nguồn y theo trục vuông góc chiều gió thổi	$C_y = C_x S_y \quad (7.17)$	
5	Khoảng cách $x_m(m)$ tính từ nguồn tới điểm có nồng độ cực đại	$X_m = dH \quad (7.18)$	
6	Chiều cao tối thiểu của ống thải H(m) đảm bảo nồng độ độc hại không vượt quá nồng độ cho phép C_f C_n – nồng độ nền.	$H = \left[\frac{AMFD}{8L(C_f - C_n)} \right]^{3/4} \quad (7.19)$	
7	Giới hạn cho phép lượng chất độc hại thải ra M_{cf} (g/s) từ nguồn điểm độc lập để đảm bảo nồng độ độc hại trong không khí sát mặt đất không vượt quá nồng độ cho phép C_f	$M_{cf} = \frac{(C_{cf} - C_n) H^2 \sqrt[3]{L\Delta T}}{AF_{mn}} \quad (7.20)$	$M_{cf} = \frac{8(C_{cf} - C_n) LH \sqrt[3]{H}}{AF_n D} \quad (7.21)$
8	Tổng nồng độ độc hại cực đại trong không khí sát mặt đất $\Sigma C_m(mg/m^3)$ do N nguồn cùng độ cao, đặt gần nhau cùng tốc độ phát khí, có cùng nhiệt độ khí thải gây ra	$\Sigma C_m = \frac{A(\Sigma M) F_{mn} \sqrt[3]{\frac{N}{(\Sigma L)\Delta T}}}{H^2} \quad (7.22)$	$\Sigma C_m = \frac{A(\Sigma M) F_n ND}{8LH \sqrt[3]{H}} \quad (7.23)$
	Vận tốc $V_m(m/s)$ khi có N nguồn cùng thải	$V_m = 0,65 \sqrt[3]{\frac{\Sigma L\Delta T}{NH}} \quad (7.24)$	

TT	ĐẠI LƯỢNG	NGUỒN NÓNG $f < 100; \Delta T > 0$ $f(m/s^2 \cdot ^\circ C)$	NGUỒN NGUỘI $f > 100; \Delta T \leq 0$ $f(m/s^2 \cdot ^\circ C)$
	Tốc độ gió nguy hiểm $V_m(m/s)$ khi $V_m(m/s)$ là: $V_m \leq 0,5$ $0,5 < V_m < 2$ $V_m > 2$	$\begin{cases} V_{nh} = 0,5 \\ V_{nh} = V_m \\ V_{nh} = V_m(1 + 0,12\sqrt{f}) \end{cases}$ (7.25)	

Ví dụ 7.1: Xác định tổng nồng độ khí cacbon monoxit (CO) trên mặt đất, để xác định khoảng cách li vệ sinh giữa nhà máy và khu dân cư.

Số liệu cho biết

Ống khói	Thể tích hỗn hợp khí thải	Lượng khí CO	Chiều cao ống khói	Đường kính miệng ống	Nhiệt độ hỗn hợp khí thải	Tốc độ phụt khí	Nồng độ nền khí CO
	$L(m^3/s)$	$E(g/s)$	$H(m)$	$D(m)$	$t(^{\circ}C)$	$w_f(m/s)$	$C_n(mg/m^3)$
1	111	160	45	2,6	170	20	0,6
2	10	12,5	36	0,8	45	20	0,6



Hình 7.8

Hệ số tính chất phân tầng khí quyển của vùng là $A = 160$, hệ số hơi và khí $F = 1,0$, nhiệt độ không khí xung quanh là $t = 26^\circ\text{C}$ (hình 7.8).

Giải: Tính đại lượng f theo công thức (7.11)

$$\text{Đối với ống khói 1: } f = \frac{10^3 \times 20 \times 2,6}{45^2 \times (170 - 26)} = 0,178 \text{ m/s}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$\text{Đối với ống khói 2: } f = \frac{10^3 \times 20 \times 0,8}{36^2 \times (45 - 26)} = 0,649 \text{ m/s}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$$

Cả 2 ống khói đều có $\left. \begin{array}{l} f < 100 \\ \Delta t > 0 \end{array} \right\}$ đều là nguồn nóng nên ta dùng công thức (7.12).

Khí thải là CO nên $F = 1$; theo biểu đồ (hình 7.4):

Ống khói 1 có $f = 0,178$ nên $m = 1,25$

Ống khói 2 có $f = 0,649$ nên $m = 0,75$

Hệ số n xác định theo biểu đồ (hình 7.3) phụ thuộc vào V_m

Theo (7.14)

Đối với ống khói 1:

$$V_m = 0,65 \sqrt[3]{\frac{111 (170 - 26)}{45}} = 4,6 \text{ m/s ; } V_m > 2 \text{ nên } n = 1$$

Đối với ống khói 2:

$$V_m = 0,65 \sqrt[3]{\frac{10 (45 - 26)}{36}} = 1,14 \text{ m/s ; } V_m > 2 \text{ nên } n = 1,3$$

Thay số vào công thức (7.12) ta được:

$$C_{m1} = \frac{160 \times 160 \times 1 \times 1,25 \times 1}{45^2 \times \sqrt[3]{111 (170 - 26)}} = 0,67 \text{ mg/m}^3$$

$$C_{m1} = \frac{160 \times 12,5 \times 1 \times 0,75 \times 1,3}{36^2 \times \sqrt[3]{10 (45 - 26)}} = 0,22 \text{ mg/m}^3$$

Toạ độ của điểm có nồng độ khí CO cực đại tính đến ống khói. Căn cứ vào V_m và f tra theo biểu đồ (hình 7.7).

Ống khói 1: $d = 17$ nên $x_m = 17 \times 45 = 765 \text{ m}$

Ống khói 2: $d = 7$ nên $x_m = 7 \times 36 = 252 \text{ m}$

Vì nồng độ C_{m1} lớn hơn C_{m2} gần 3 lần, nên tổng nồng độ cực đại khí CO do hai ống khói gây ra sẽ trùng với toạ độ cực đại do ống khói 1 gây ra.

Ta xác định nồng độ C_2 tại vị trí C_1 đạt cực đại.

Vị trí C_1 đạt cực đại cách ống khói 2 là

$$x = 240 + x_{m1} = 1005 \text{ m}$$

Theo công thức (7.16) $C_x = C_m S_x$

Tỉ số:
$$\frac{x}{x_m} = \frac{1005}{252} = 3,99$$

Theo biểu đồ (hình 7.5a) có $S_x = 0,36$

Vậy nồng độ C_2 tại $x = 1140 \text{ m}$ là $C_2 = 0,22 \times 0,36 = 0,079 \text{ mg/m}^3$

Tổng nồng độ khí CO cực đại là $C = C_{m1} + C_2 + C_n$

$$C = 0,67 + 0,079 + 0,6 = 1,35 \text{ mg/m}^3$$

Đối chiếu tiêu chuẩn vệ sinh, nồng độ khí CO cho phép $C_f = 5 \text{ mg/m}^3$ như vậy đạt yêu cầu.

7.3. MÔ HÌNH METILIS

Mô hình METILIS được dùng để dự đoán tác động đến môi trường của các chất ô nhiễm không khí nguy hại. Mô hình này dựa trên cơ sở phương trình Gauss xem xét các điều kiện của trạng thái ổn định. Phương trình Gauss được dùng đối với mô hình phát thải từ một nguồn điểm như ống khói cao hay ống thải khí. Vấn đề xem xét ở đây liên quan đến công thức cơ bản Gauss, ở đoạn khói phụt ra khỏi ống thải chứa các chất ô nhiễm không khí nguy hại, phương pháp xác định các thông số phân tán, kiểu thiết kế phân chụp đầu ống khói hình nón chịu tác động bởi nguồn thải của các công trình lân cận và các điều kiện áp dụng đối với mô hình phân tán.

Mô hình METILIS được phát triển từ mô hình ISC của Cục bảo vệ môi trường Mĩ. Mô hình ISC thuộc nhóm mô hình phát thải đối với kiểu ống khói có chụp hình nón và ảnh hưởng của chụp hình nón cũng được đưa vào trong khi tính toán. Việc ứng dụng mô hình ISC vào kiểu ống khói này là điều hợp lí vì như vậy chúng ta có thể dễ dàng giải quyết được các vấn đề do luồng không khí hỗn tạp từ các nguồn phát thải san sát nhau của các công trình lân

cạn gây ô nhiễm và cũng bởi vì phần lớn nguồn phát thải chứa các chất ô nhiễm không khí nguy hại là nguồn thải thấp nghĩa là độ cao của chúng thấp. Tuy nhiên, điều đáng tiếc là mô hình ISC không được nghiên cứu mở rộng hơn nữa để có thể đưa vào ứng dụng cho nhiều công trình phát thải thử nghiệm như đã đề cập đến trong nghiên cứu. Một lí do nữa đó là các mô hình của Cục bảo vệ môi trường Mỹ được xem xét ở nồng độ giới hạn tập trung rất cao. Phiên bản mô hình METILIS này sử dụng phương pháp kỹ thuật, thu được từ các ống thông gió thử nghiệm. Điều đó chứng minh hiệu quả dự báo tốt hơn mô hình ISC. Mục đích của chúng ta là làm sao có thể dự báo được phân bố nồng độ (đặc biệt theo trục y hoặc theo chiều gió tạt ngang) của nồng độ trung bình ngắn hạn với độ chính xác cao.

Những vấn đề không có trong mô hình ISC hay những ứng dụng có khác biệt được thấy trong các công trình nghiên cứu của Nhật. Các nghiên cứu được Bộ Thương mại quốc tế và Công nghiệp (MITI) tiến hành từ năm 1985 để dự báo về mức độ ô nhiễm không khí do các ngành công nghiệp. Phiên bản METILIS 2.0 xem xét ở đây được hoàn thiện năm 2003.

7.3.1. Phương trình phân tán

Phương trình phân tán đối với nguồn điểm dùng mô hình Gauss ở trạng thái ổn định. Đối với mỗi nguồn ở mỗi thời điểm, vấn đề khi tính toán hệ tọa độ đó là vị trí bề mặt nền ở đáy ống. Quy ước trục x là theo chiều gió thổi, trục y là theo chiều gió tạt ngang đến trục x, trục z là trục thẳng đứng. Phương pháp chuyển đổi với các hướng trục x và y sẽ được mô tả ở phần sau. Nồng độ tính toán đối với mỗi nguồn ở mỗi điểm tính toán được cộng lại để nhận được nồng độ tổng sinh ra bởi tổ hợp các nguồn phát thải trong một giai đoạn thời gian.

$$C_{(x,y,z)} = \frac{QV}{2\pi u_s \sigma_y \sigma_z} \exp \left[-0.5 \left(\frac{y}{\sigma_y} \right)^2 \right] \quad (7.26)$$

Trong đó :

C là nồng độ chất ô nhiễm theo trục x, y, z (m^3/m^3 ; ppm, ppb hoặc theo đơn vị khác);

Q là tỉ lệ phát thải (m_N^3/s) – chỉ số N là điều kiện tiêu chuẩn;

V là đại lượng thẳng đứng (công thức 7.27);

u_s là độ gió trung bình ở độ cao trông thấy (m/s);

σ_y, σ_z là các hệ số phân tán theo phương y và phương z (m);

Đại lượng thẳng đứng V thể hiện sự phân bố của hàm Gauss theo phương thẳng đứng. Đại lượng này bao gồm độ cao điểm tính toán và tác động của chiều cao hiệu quả của vật khối (độ dài đoạn khối phụt).

$$V = \exp \left[-0,5 \left(\frac{z_r - h_e}{\sigma_z} \right)^2 \right] + \exp \left[-0,5 \left(\frac{z_r + h_e}{\sigma_z} \right)^2 \right] \quad (7.27)$$

Trong đó:

Z_r là độ cao điểm tính toán (m);

h_e là độ cao hiệu quả (m).

7.3.2. Hệ toạ độ và các thiết lập cơ sở khác

Lập các điểm tính toán

Các điểm tính toán được đánh dấu trên hệ trục toạ độ Đêcac (X-Y). Người sử dụng hệ toạ độ này có thể lập bất kì vùng tính toán theo hướng Đông Tây và Bắc Nam cũng như là số vùng nhỏ được phân chia. Trong hệ Đêcac trục x dương sang phía Đông, trục y dương theo hướng Bắc. Lấy toạ độ của nguồn là x_s và y_s và toạ độ x, y của điểm tính toán là x_r và y_r thì vị trí của mỗi điểm tính toán trong mỗi giờ tính toán được cho bởi công thức:

$$\begin{aligned} x &= -(x_r - x_s) \sin(WD) - (y_r - y_s) \cos(WD) \\ y &= (x_r - x_s) \cos(WD) - (y_r - y_s) \sin(WD) \end{aligned} \quad (7.28)$$

Trong công thức này, WD là góc theo hướng gió đang thổi. Khoảng cách theo hướng gió thổi x được dùng để tính toán công trình kiểu ống khói có chụp hình nón và để tính các thông số phân tán.

Hiệu chỉnh tốc độ gió

Như đã biết, việc tính toán tốc độ gió quan sát được chuyển thành tốc độ gió tương đương ở độ cao thực tế của nguồn. Sự điều chỉnh này sử dụng định luật sức gió và được tính theo công thức:

$$u_s = u_{ref} \left(\frac{h_s}{z_{ref}} \right)^p \quad (7.29)$$

Trong đó:

u_s là tốc độ gió ở độ cao ống thải h_s (m/s);

u_{ref} là tốc độ gió ở độ cao đo Z_{ref} (m/s);

h_s là độ cao ống khói (m);

Z_{ref} độ cao ở tốc độ gió đo được (m).

Số mũ mặt cắt gió p trong công thức này được thiết lập theo cấp ổn định của khí quyển. Các giá trị trong bảng 7.6 có thể được sử dụng như các giá trị trung bình. Tuy nhiên, khi tính toán thì tốc độ gió phụ thuộc vào các cấp ổn định của gió như đã trình bày trong bảng 7.10.

BẢNG 7.6. CÁC GIÁ TRỊ CHUẨN CỦA SỐ MŨ P

CẤP ỔN ĐỊNH	GIÁ TRỊ SỐ MŨ P
A	0,07
B	0,07
C	0,10
D	0,15
E	0,35
F	0,35

Chú ý: Mô hình ISC thì chỉ áp dụng các giá trị này đối với các vùng nông thôn

7.3.3. Thiết lập độ cao hiệu dụng

Miệng ống khói hình nón

Nếu nguồn thải chứa chất ô nhiễm không khí nguy hại thì tháp ống hoạt động như một cái máy hút gió do vậy mà người ta đã thiết kế ống khói có chụp hình nón đặt trên miệng ống khói. Khi tốc độ khí thải từ nguồn thoát ra ngoài $< 1,5$ lần tốc độ gió thì phải điều chỉnh độ cao của ống khói để bù cho chụp hình nón.

Mô hình ISC được Brigg bổ sung vào bộ phận chụp hình nón. Độ cao thực tế của ống khói được điều chỉnh theo công thức sau:

$$h' = h_s + 2d_s \left(\frac{v_s}{u_0} - 1.5 \right) \quad v_s < 1.5u_s \quad (7.30)$$

$$h'_s = h_s \quad v_s \geq 1.5 \quad (7.31)$$

Trong đó :

h'_s là chiều cao thực tế của ống khói đã điều chỉnh (m);

d_s là đường kính ống khói (m);

v_s là vận tốc khí thải thoát ra ngoài (m/s);

Nguồn không có luồng khói bay cao

Nếu khí thải thoát ra từ nguồn có nhiệt độ không cao hơn đáng kể so với nhiệt độ môi trường và tốc độ gió chậm thì nguồn đó không có luồng khói bay cao. Trong trường hợp này, độ cao của ống khói được dùng để tính toán. Giải pháp này phù hợp với các ống khói thải và các tháp thông gió thường được lắp đặt cho các nguồn thải chứa chất ô nhiễm không khí nguy hại.

Mỗi bộ phận chụp hình nón được tính toán riêng rẽ với phương pháp được mô tả trong bảng 7.10.

Nguồn có độ nâng cao của vệt khói

Nếu khí thải thoát ra từ nguồn có nhiệt độ tương đối cao so với nhiệt độ môi trường, sử dụng công thức CONCAWE

$$h_c = h_s + \Delta h \quad (7.32)$$

$$\Delta h = 0,175 Q_H^{1/2} u^{-3/4} \quad (7.33)$$

Trong đó :

h_c là chiều cao hiệu quả (m);

h_s là chiều cao thực tế của nguồn thải (m);

Δh là độ nâng cao của vệt khói (m);

Q_H là lượng nhiệt phát ra (cal/s), $Q_H = \rho C_p Q (T_s - T_A)$ (7.34)

ρ là tỉ trọng khí ở 0°C ($1,293 \times 10^3 \text{ g/m}^3$);

C_p là nhiệt đẳng áp riêng (0,24 cal/kg);

Q là lượng khí thải trên một đơn vị thời gian (m_N^3/s);

T_s là nhiệt độ khí thải (°C);

T_A là nhiệt độ môi trường (°C, mặc định 15°C).

7.3.4. Các thông số phân tán

Các phương trình đường cong Pasquill–Gifford được dùng để tính toán các thông số phân tán. Mô hình này sử dụng các phương trình tính gần đúng đã trình bày ở bảng 7.8 và 7.9. Các công thức tương tự cũng được dùng trong mô hình ISC. Các phương trình gần đúng này là hàm của khoảng cách theo hướng gió từ nguồn và tính toán khoảng cách theo trục y là σ_y , theo trục x là σ_x . Các khoảng cách này phụ thuộc vào cấp ổn định của khí quyển, được quan sát và xác định định kì. Tất cả 11 cấp ổn định của khí quyển có thể coi như là các điều kiện khí tượng. Cấp ổn định của khí quyển trong các công thức gần đúng chỉ được xếp theo 6 cấp (từ A ÷ F)

BẢNG 7.7. MỐI QUAN HỆ GIỮA TÍNH ỔN ĐỊNH KHÍ QUYỂN QUAN SÁT ĐƯỢC VÀ CHỈ SỐ PHƯƠNG TRÌNH GẦN ĐÚNG

CẤP ỔN ĐỊNH KHÍ QUYỂN	A	A-B	B	B-C	C	C-D	Dd	Dn	E	F	G
PHƯƠNG TRÌNH GẦN ĐÚNG	A		B		C		D		E	F	

Chú ý: Cấp ổn định không khí Dd và Dn thực chất là hạng D trong thời gian ngày và đêm.

σ_y được tính theo công thức:

$$\sigma_y = 465,11628(x) \tan(\text{TH}) \quad (7.35)$$

$$\text{TH} = 0,017453293[c - d \ln(x)] \quad (7.36)$$

Khoảng cách theo hướng gió thổi, x, trong công thức 7.35 và 7.36 có đơn vị là km, hệ số c và d tra trong bảng 7.8.

σ_x được tính theo công thức:

$$\sigma_x = ax^b \quad (7.37)$$

Khoảng cách hướng gió thổi, x, đơn vị là km, các hệ số c và d tra trong bảng 7.9.

BẢNG 7.8. CÁC THÔNG SỐ DÙNG ĐỂ TÍNH TOÁN σ_y TỪ ĐƯỜNG CONG PASQUILL-GIFFORD

$$\sigma_y = 465,11628(x)\tan(\text{TH}), \text{ TH} = 0,017453293[c - \ln(x)]$$

Cấp Pasquill – Gifford	c	d
A	24,1670	2,5334
B	18,3330	1,8096
C	12,5000	1,0857
D	8,3330	0,72382
E	6,2500	0,54287
F	4,1667	0,36191

σ_y được tính bằng m, x là km và TH là radian

BẢNG 7.9. CÁC THÔNG SỐ DÙNG ĐỂ TÍNH TOÁN σ_z TỪ ĐƯỜNG CONG PASQUILL – GIFFORD

$$\sigma_x (m) = ax^b \text{ (x tính bằng km)}$$

CẤP ỔN ĐỊNH Pasquill	x (km)	a	B
A'	< 10	122,800	0,94470
	0,10–0,15	158,080	1,05420
	0,16–0,20	170,220	1,09320
	0,21–0,25	179,520	1,12620
	0,26–0,30	217,410	1,26440
	0,31–0,40	258,890	1,40940
	0,41–0,50	346,750	1,72830
	0,51–3,11	453,850	2,11660
	> 3,11	**	**
B'	< 20	90,673	0,93198
	0,21–0,40	98,483	0,98332
	> 0,40	109,300	1,09710
C'	tất cả	61,141	0,91465
D	< 30	34,459	0,86974
	0,31– 1,00	32,093	0,81066
	1,01 – 3,00	32,093	0,64403
	3,01– 10,00	33,504	0,60486
	10,01– 30,00	36,650	0,56589
	> 30,00	44,053	0,51179

E	< ,10	24,260	0,83660
	0,10 – 0,30	23,331	0,81956
	0,31–1,00	21,628	0,75660
	1,01–2,00	21,628	0,63077
	2,01–4,00	22,534	0,57154
	4,01–10,00	24,703	0,50527
	10,01–20,00	26,970	0,46713
	20,01–40,00	35,420	0,37615
	> 40,00	47,618	0,29592
F	< ,20	15,209	0,81558
	0,21–0,70	14,457	0,78407
	0,71–1,00	13,953	0,68465
	1,01–2,00	13,953	0,63227
	2,01–3,00	14,823	0,54503
	3,01–7,00	16,187	0,46490
	7,01–15,00	17,836	0,41507
	15,01–30,00	22,651	0,32681
	30,01–60,00	27,074	0,27436
	> 60,00	34,219	0,21716

* Nếu σ_z lớn hơn 5000m thì chỉ nhận giá trị 5000

** σ_z là 5000m

7.3.5. Hiệu ứng hình nón của công trình

Khái niệm cơ bản

Mô hình ISC tính đến hiệu ứng hình nón bởi các công trình gần nguồn phát thải dựa vào phương pháp Huber–Snyder. Huber và Snyder đã đưa ra thử nghiệm của họ dưới những điều kiện tương đương cấp ổn định khí quyển trung bình (theo Pasquill là cấp ổn định C và D) được sử dụng đối với công trình có chiều cao gấp hai lần chiều rộng. Từ thử nghiệm này, họ đã tìm ra các thông số phân tán có thể áp dụng cho trường hợp có hình nón. Ở đây chúng ta sẽ thực hiện ống thông gió thử nghiệm với sự đa dạng về sắp xếp và quy mô của các công trình. Từ các kết quả này chúng ta có thể chứng tỏ rằng dựa vào mô hình ISC có thể xác định được sự phân bố nồng độ xung quanh.

(1) Phạm vi nghiên cứu

Trước hết tính toán vùng hình nón theo hướng gió thổi. Bộ phận này có liên quan mật thiết với mô hình ISC. Đối với chỉ số L lấy nhỏ hơn chiều cao hoặc chiều rộng của công trình thì các thông số phân tán nằm trong khoảng 3L đến 10L. Các điểm gần nguồn nhỏ hơn 3L không phải tính đến thông số khuếch tán. Nếu xa hơn hướng gió thổi 10L thì thông số phân tán được tính theo công thức gần đúng đường cong Pasquill–Gifford tương đối. Điều này là hiển nhiên, tuy vậy, cả hai phương pháp đều cho cùng một giá trị thông số phân tán như nhau ở trường hợp trên dưới 10L

(2) Tính σ_z

Phương pháp ước lượng σ_z như sau:

$$\sigma_z' = C_{z1} \cdot L + C_{z2}(x-3L) \quad 3L \leq x < 10 \quad (7.38)$$

$$\sigma_z' = \sigma_z [x + x_z] \quad 10L \leq x \quad (7.39)$$

Trong đó:

σ_z' là σ_z sau khi tính toán (m);

C_{z1} , C_{z2} là các thông số;

L là độ cao thấp nhất của công trình, H_b , hoặc chiều rộng, W_b (m);

$\sigma_z[x + x_z]$: σ_z từ nguồn điểm thực tế theo chiều gió thổi ở khoảng $x + x_z$ (m);

x_z là hướng gió thổi tính từ nguồn điểm thực tế (km).

$$x_z = \left[\frac{\sigma_z' [10L^{1/b}]}{a} \right] - 0,01L \quad (7.40)$$

$\sigma_z' [10L]$: σ_z ở 10L từ công thức 7.38 (m)

a, b là các thông số từ các phương trình gần đúng của đường cong Pasquill–Gifford

Mô hình ISC hiệu chỉnh các thông số C_{z1} và C_{z2} trong công thức 7.38 dựa vào các giá trị thử nghiệm của σ_z . Trên thực tế thì việc xác định C_{z1} và C_{z2} qua tính toán σ_z cho từng trường hợp bố trí và kích thước của công trình khác nhau, kết hợp tính toán theo phương pháp bình phương tối thiểu.

(3) Tính toán σ_y

Việc tính toán σ_y dựa vào tỉ lệ chiều cao và chiều rộng của công trình (W_b/H_b). Công thức tính σ_y giống công thức tính σ_z . Tuy nhiên, σ_y phụ thuộc

vào chiều rộng của công trình và hướng gió. Do đó, chiều rộng của công trình trên mặt bằng là hình chiếu vuông góc với hướng gió, W_b' , được chỉ trong hình 7.9.

Khi $1 \leq W_b'/H_b \leq 5$

$$\sigma_y' = C_{y1} \cdot W_b' + C_{y2}(x - 3H_b) \quad 3H_b \leq x < 10H_b \quad (7.41)$$

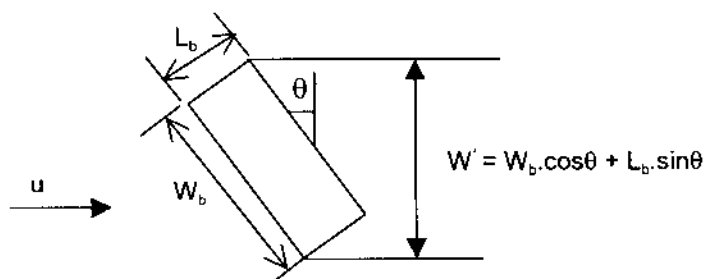
$$\sigma_y' = \sigma_y[x + x_y] \quad 10H_b \leq x \quad (7.42)$$

Mối quan hệ giữa công thức 7.41 và 7.42 giống mối quan hệ giữa công thức 7.38 và 7.39. Nếu chiều rộng công trình quá lớn ($W_b'/H_b > 5$) thì trước khi tính W_b' được thay bằng H_b . Ngược lại, nếu chiều rộng công trình hẹp nhưng cao ($W_b'/H_b < 1$) thì H_b trong công thức 7.41 được thay bằng W_b' trước khi tính toán.

Khi $W_b'/H_b > 5$ thì:

$$\sigma_y' = C_{y1} \cdot H_b + C_{y2}(x - 3H_b) \quad 3H_b \leq x < 10H_b \quad (7.43)$$

$$\sigma_y' = \sigma_y[x + x_y] \quad 10H_b \leq x \quad (7.44)$$



Hình 7.9. Chiều rộng hình chiếu được tìm từ góc giữa hướng gió và công trình

Khi $W_b'/H_b < 1$ thì

$$\sigma_y' = C_{y1} \cdot W_b' + C_{y2}(x - 3W_b') \quad 3W_b' \leq x < 10W_b' \quad (7.45)$$

$$\sigma_y' = \sigma_y[x + x_y] \quad 10W_b' \leq x \quad (7.46)$$

Các thí nghiệm về hướng gió cũng mang đến một cải tiến khác đối với mô hình trong việc xác định C_{y1} và C_{y2} . Kiểu kiến trúc công trình với ($1 \leq W_b'/H_b \leq 5$) được xem là phổ biến nhất. Hai công trình thiết kế phổ biến là: Toà nhà đứng độc lập và toà nhà nằm trong khu tổ hợp công trình:

Toà nhà đứng độc lập: Dựa vào hướng gió thổi để xây dựng cột khối với hướng gió thổi thẳng vào mặt chính công trình. Cách thiết kế này khá đơn giản đối với công trình đơn khối hoặc với nhà máy xây dựng theo dạng dãy nhà.

Toà nhà nằm trong khu tổ hợp công trình: Dựa vào gió để xây dựng cột khói với hướng gió chạy song song với mặt chính công trình. Cách thiết kế này phù hợp với kiểu nhà máy có nhiều công trình rải rác không tập trung quanh nguồn thải.

(4) Các lưu ý khác

Các thí nghiệm ống thông gió mang đến cách xác định khác σ_y và σ_z . Mô hình METILIS không giống như mô hình ISC, công trình liền kề ảnh hưởng đến luồng khói và tốc độ gió. Mô hình sử dụng phương pháp nguồn thực để tính toán các công trình khi gió thổi vuông góc với công trình.

Các bước tính toán

Tính toán đối với công trình có hiệu ứng hình nón gồm các bước sau:

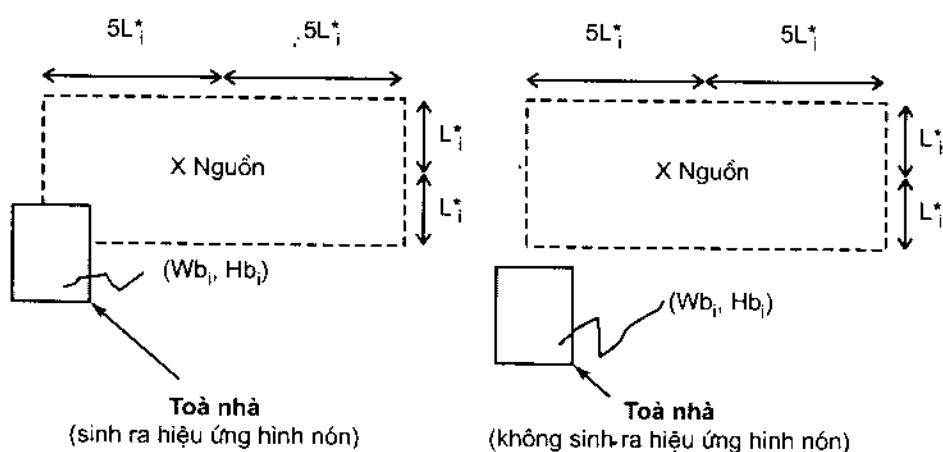
(1) Chọn các công trình gần nguồn thải và thực hiện theo bước (1) và (2). Nếu nhiều hơn một công trình thì thực hiện theo các bước (2) và (3) đối với tất cả các công trình.

(2) Sau khi chuyển các công trình thành hình chữ nhật ta xác định được chiều cao, H_b và chiều rộng, W_b của mỗi công trình (từ 1 đến i)

(3) Nếu phần nào đó của công trình nhìn thấy từ nguồn thải nằm trong vùng phân ranh giới bằng $5L^*$ theo hướng gió thổi và L^* theo hướng gió thổi ngang, L^* là từng phần của H_b và W_b (xem hình 7.10).

(4) Đối với chụp hình nón thì việc tính toán độ cao ống khói GEP nên chọn công trình có ống khói GEP có cao lớn nhất.

$$\text{Độ cao ống thải GSP} = H_b + 1,5 \min (H_b, W_b) \quad (7.47)$$



Hình 7.10. Phương pháp xác định mức độ ảnh hưởng của hiệu ứng hình nón

(5) Sử dụng công thức 7.48 để tính độ cao của ống thải khi gió thổi vào công trình theo đường chéo (hình 7.9)

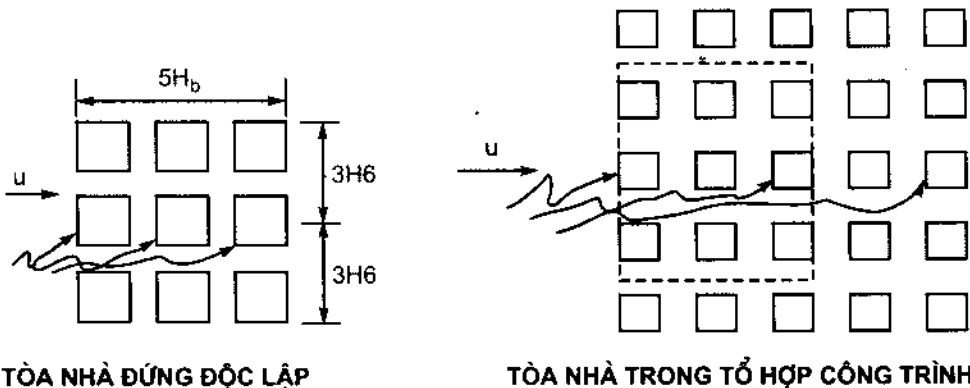
$$\text{Độ cao ống khói GEP} = H_b + 1.5 \min (H_b, W_b) \quad (7.48)$$

Trong đó: W'_b là độ cao bảo vệ công trình, lưu ý trục hướng gió

$$W'_b = W_b \cdot \cos\theta + L_b \cdot \sin\theta \quad (7.49)$$

(7) So sánh độ cao hiệu dụng của vệt khói và độ cao ống khói GEP. Nếu độ cao hiệu dụng của vệt khói mà lớn hơn độ cao ống khói GEP thì việc tính toán chụp hình nón có thể bỏ qua.

(8) Nếu một nhóm toà nhà mà trong đó toà nhà có ống khói dạng chụp hình nón nằm trong vùng tính toán là toà nhà đứng độc lập hoặc toà nhà nằm trong nhóm công trình. Coi H_b là độ cao của chụp hình nón, nếu khu vực đặt khu công trình mà nhỏ hơn $5H_b$ tính theo chiều gió thổi và nhỏ hơn $3H_b$ theo chiều gió tạt ngang thì phải chuyển sang xét trường hợp toà nhà đứng độc lập. Tuy nhiên, đối với nguồn thải xét theo hướng gió thổi hoặc hướng gió đang thổi của nhóm công trình (xem hình 7.11)



Hình 7.11. Mô hình toà nhà đứng độc lập và toà nhà trong tổ hợp công trình

Phương pháp tính hiệu ứng hình nón

Dưới đây là cách tính toán các thông số ở công thức 7.38 và 7.46, công thức tính toán hiệu ứng hình nón của sự phát tán.

(1) Cách tính C_{z1}

Không cần quan tâm đến công trình đứng độc lập hay thành một tổ hợp công trình thì C_{z1} vẫn được tính theo phương trình bậc nhất phụ thuộc vào kích thước độ cao vệt khói hiệu dụng, H_c (h_c/H_c). Các hệ số a , b là hàm của tỉ số chiều rộng và chiều cao của công trình (W_b/H_b).

$$C_{z1} = a.H_c + b \quad (7.50)$$

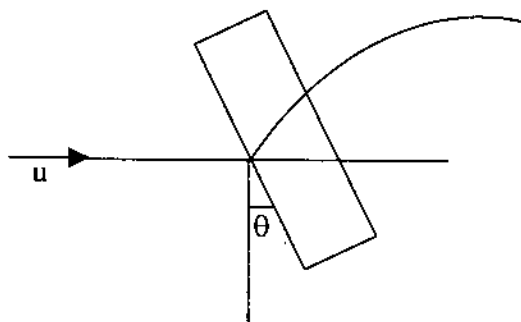
$$a = -0,00125 \left(\frac{W_b}{H_b} \right)^2 + 0,02 \left(\frac{W_b}{H_b} \right) - 0,329 \quad \frac{W_b}{H_b} \leq 5$$

$$a = -0,26 \quad \frac{W_b}{H_b} > 5$$

$$b = -0,0045 \left(\frac{W_b}{H_b} \right)^2 + 0,051 \left(\frac{W_b}{H_b} \right) + 0,645 \quad \frac{W_b}{H_b} \leq 5$$

$$b = 0,788$$

Nếu hướng gió thổi không tạo với công trình một góc vuông thì đại lượng $C_{z1(\theta)}$ được tính thông qua các công thức sử dụng θ , là góc tạo bởi công trình và hướng gió thổi ($0^\circ < \theta \leq 45^\circ$) $C_{z1(\theta)}$ được tính bằng công thức 7.50.



Hình 7.12. Minh họa cho hướng gió không vuông góc với toà nhà

Nếu $h_c > H_b$ thì :

$$C_{z1(\theta)} = C_{z1(\theta^*)} \quad (7.51)$$

Nếu $h_c \leq H_b$ thì :

$$C_{z1(\theta)} = C_{z1(\theta^*)} (1 - 0,01 \theta) \quad \text{đối với công trình độc lập} \quad (7.52)$$

$$C_{z1(\theta)} = C_{z1(\theta^*)} (1 - 0,003 \theta) \quad \text{đối với nhóm công trình}$$

(2) Cách tính C_{z2}

Công thức tính C_{z1} và C_{z2} không giống nhau mặc dù chúng đều là đại lượng chỉ nồng độ chất ô nhiễm trong không khí. Đối với mỗi loại công trình sử dụng công thức tính khác nhau.

Đối với công trình độc lập

$$C_{z2} = 0,052 \quad (7.53)$$

Đối với tổ hợp công trình

$$C_{z2} = a.H_c + b \quad (7.54)$$

$$a = 0,039$$

$$b = 0,0137 \left(\frac{W_b}{H_b} \right) - 0,0085 \quad 1 \leq \frac{W_b}{H_b} \leq 5$$

$$b = 0,0038 \quad \frac{W_b}{H_b} < 1$$

$$b = 0,059 \quad \frac{W_b}{H_b} > 5$$

Nếu hướng gió thổi không tạo với công trình một góc vuông thì C_{z2} được tính theo $C_{z2(\theta)}$, tương tự như với C_{z1} . $C_{z2(\theta)}$ được tính dựa vào công thức sử dụng θ , là góc tạo bởi công trình và hướng gió thổi ($0^\circ < \theta \leq 45^\circ$), $C_{z1(\theta)}$ được tính bằng công thức 7.54.

Đối với công trình độc lập, nếu $h_c > H_b$ thì:

$$C_{z2(\theta)} = C_{z2(\theta^*)} (1 - 0,0136\theta) \quad \frac{W_b}{H_b} > 1,0 \quad (7.55)$$

$$C_{z2(\theta)} = C_{z2(\theta^*)} \quad \frac{W_b}{H_b} \leq 1,0$$

Đối với tổ hợp công trình, nếu $h_c > H_b$ thì:

$$C_{z2(\theta)} = C_{z2(\theta^*)} \quad (7.56)$$

Đối với công trình độc lập, nếu $h_c \leq H_b$ thì:

$$C_{z2(\theta)} = C_{z2(\theta^*)} (1 - 0,0072\theta) \quad \frac{W_b}{H_b} > 1,0 \quad (7.57)$$

$$C_{z2(\theta)} = C_{z2(\theta^*)} \quad \frac{W_b}{H_b} \leq 1,0$$

Đối với tổ hợp công trình, nếu $h_c \leq H_b$ thì:

$$C_{z2(\theta)} = C_{z2(\theta^*)} (1 - 0,0098\theta) \quad (7.58)$$

(3) Cách tính C_{y1}

Đại lượng này biểu thị chiều rộng, W_b của công trình, muốn tính giá trị này phải dựa vào hướng gió ở công thức 7.49.

Tương tự như C_{z1} , C_{y1} được xem như phương trình bậc nhất với độ cao luồng khối hiệu dụng c , d được tính theo không thứ nguyên, H_c (h_c/H_b). Các hệ số c , d được tính theo tỉ số của chiều rộng và chiều cao (W_b/H_b).

$$C_{y1} = c.H_c + d \quad (7.59)$$

$$c = -0,0170 \left(\frac{W_b}{H_b} \right)^2 + 0,173 \left(\frac{W_b'}{H_b} \right) - 0,80 \quad \frac{W_b'}{H_b} \leq 5$$

$$c = -0,36 \quad \frac{W_b'}{H_b} > 5$$

$$d = 0,0464 \left(\frac{W_b}{H_b} \right)^2 - 0,461 \left(\frac{W_b'}{H_b} \right) + 1,93 \quad \frac{W_b'}{H_b} \leq 5$$

$$d = 0,791 \quad \frac{W_b'}{H_b} > 5$$

Khi hướng gió thổi không tạo với công trình một góc vuông thì $C_{y1(\theta)}$ được tính dựa vào một trong số các công thức sử dụng θ , là góc tạo bởi công trình và trục hướng gió thổi ($0^\circ < \theta \leq 45^\circ$) và $C_{y1(\theta)}$ được tính bằng công thức 7.59.

Nếu $h_c > H_c$ thì:

$$C_{y1(\theta)} = C_{y1(\theta^*)} \quad (7.60)$$

Nếu $h_c \leq H_c$ thì:

$$C_{y1(\theta)} = C_{y1(\theta^*)} (1 - 0,015\theta) \quad \text{đối với công trình độc lập} \quad (7.61)$$

$$C_{y1(\theta)} = C_{y1(\theta^*)} (1 - 0,0069\theta) \quad \text{đối với tổ hợp công trình}$$

(4) Cách tính C_{y2}

C_{y2} được tính theo phương pháp dưới đây:

Đối với công trình độc lập

$$C_{y2} = 4,29 \times 10^{-4} \cdot N^2 - 7,86 \times 10^{-3} \cdot N + 0,073 \quad 1 \leq N \leq 7$$

$$C_{y2} = 0,039 \quad (7.62)$$

Đối với tổ hợp công trình

$$C_{y2} = 0,039 \quad (7.63)$$

Nếu hướng gió thổi không tạo với công trình một góc vuông, thì C_{y2} được tính theo $C_{y2(\theta)}$, tương tự như với C_{z2} . $C_{z2(\theta)}$ được tính dựa vào công thức sử dụng θ , góc tạo bởi công trình và trục hướng gió thổi ($0^\circ < \theta \leq 45^\circ$), $C_{x1(\theta)}$ được tính bằng công thức 7.63.

Nếu $h_e > H_e$ thì:

$$C_{y2(\theta)} = C_{y2(\theta^*)} \quad \text{đối với công trình đứng độc lập} \quad (7.64)$$

$$C_{y2(\theta)} = C_{y2(\theta^*)} (1 + 0,0149\theta) \quad \text{đối với công trình đứng trong tổ hợp công trình}$$

Nếu $h_e \leq H_e$ thì:

$$C_{y2(\theta)} = C_{y2(\theta^*)} \quad \text{đối với công trình đứng độc lập} \quad (7.65)$$

$$C_{y2(\theta)} = C_{y2(\theta^*)} (1 + 0,019\theta) \quad \text{đối với công trình đứng trong tổ hợp công trình}$$

(5) Cách tính các hệ số hiệu chỉnh tốc độ gió

Tốc độ gió thay đổi xung quanh khu công trình đặc biệt là ở phía sau công trình, phụ thuộc vào cách bố trí công trình và các yếu tố ngoại vi. Tốc độ gió phụ thuộc vào chiều cao của ống khói. Khi nguồn thải thấp hơn các toà nhà xung quanh thì tốc độ gió bị ảnh hưởng đặc biệt bởi cách bố trí công trình. Tốc độ gió được hiệu chỉnh bởi hệ số α vì trong tính toán có sử dụng tốc độ gió ở độ cao thực tế của ống khói. Chú ý, cũng giống mô hình ISC, nếu kết quả hiệu chỉnh tốc độ gió nhỏ hơn 1m/s thì trong quá trình tính toán phải lấy giá trị 1m/s.

$$u' = \alpha u_0' \quad (7.66)$$

Trong đó: u' là tốc độ gió sau khi hiệu chỉnh (m/s)

α là hệ số hiệu chỉnh

Nếu $h_e > H_b$ thì:

$$\begin{aligned} \alpha &= 0,76 & \frac{W_b}{H_b} < 1 \\ \alpha &= 0,8 - 0,039 \left(\frac{W_b}{H_b} \right) & 1 \leq \frac{W_b}{H_b} \leq 5 \\ \alpha &= 0,61 & \frac{W_b}{H_b} > 5 \end{aligned} \quad (7.67)$$

Nếu $h_c \leq H_b$ thì:

$$\begin{aligned}\alpha_{(1)} &= 0,66 & \frac{W_b}{H_b} < 1 \\ \alpha_{(1)} &= 0,72 - 0,056 \left(\frac{W_b}{H_b} \right) & 1 \leq \frac{W_b}{H_b} \leq 5 \quad (7.68) \\ \alpha_{(1)} &= 0,44 & \frac{W_b}{H_b} > 5 \\ \alpha_{(N)} &= \alpha_{(1)} - 0,076(N-1)\end{aligned}$$

Nếu $h_c \leq H_b$ (đối với toà nhà nằm trong nhóm công trình)

$$\begin{aligned}\alpha &= 0,72 & \frac{W_b}{H_b} < 1 \\ \alpha &= 0,913 - 0,194 \left(\frac{W_b}{H_b} \right) & 1 \leq \frac{W_b}{H_b} \leq 3 \quad (7.69) \\ \alpha &= 0,33 & \frac{W_b}{H_b} > 3\end{aligned}$$

Nếu hướng gió thổi tạo với công trình một góc vuông, α , từ công thức 7.67 đến 7.69, được điều chỉnh bằng cách sử dụng góc θ , là góc tạo bởi giữa công trình và trục toạ độ hướng gió thổi.

Nếu $h_c > H_b$ thì:

$$\alpha_{(\theta)} = \left[1 + 0,013\theta - 2,2 \times 10^{-4} \theta^2 \right] \cdot \alpha_{(0^\circ)} \quad W_b > H_b \quad (7.70)$$

$$\alpha_{(\theta)} = \alpha_{(0^\circ)} \quad W_b \leq H_b$$

Nếu $W_b \leq H_b$ và $W_b > H_b$ thì ta có:

$$\alpha_{(\theta)} = \left[1 + 0,053\theta - 8,3 \times 10^{-4} \theta^2 \right] \cdot \alpha_{(0^\circ)} \text{ đối với toà nhà độc lập} \quad (7.71)$$

$$\alpha_{(\theta)} = \left[1 + 0,099\theta - 1,98 \times 10^{-3} \theta^2 \right] \cdot \alpha_{(0^\circ)} \text{ đối với toà nhà trong}$$

tổ hợp công trình

Nếu $h_c \leq H_b$ và $W_b \leq H_b$

$$\alpha_{(\theta)} = \alpha_{(0^\circ)} \quad (7.72)$$

(6) Cách hiệu chỉnh chiều cao ống khói

Khi các toà nhà nằm gần một nguồn thải nào đó thì độ cao luồng khói sẽ bị ảnh hưởng bởi toà nhà đó. Sự hiệu chỉnh dưới đây xuất phát từ chiều cao thực tế của ống khói.

$$\text{Nếu } h_s \leq 0,5H_b, \quad h_c = 0 \quad (7.73)$$

$$\text{Nếu } 0,5 H_b < h_s \leq 1H_b, \quad h_c = 0,5h_s \quad (7.74)$$

$$\text{Nếu } H_b < h_s < 2,5H_b, \quad \frac{W_b}{H_b} \leq 1$$

$$h_c = 0,56h_s \text{ đối với toà nhà độc lập} \quad (7.75)$$

$$h_c = 0,67h_s \text{ đối với toà nhà nằm trong tổ hợp công trình}$$

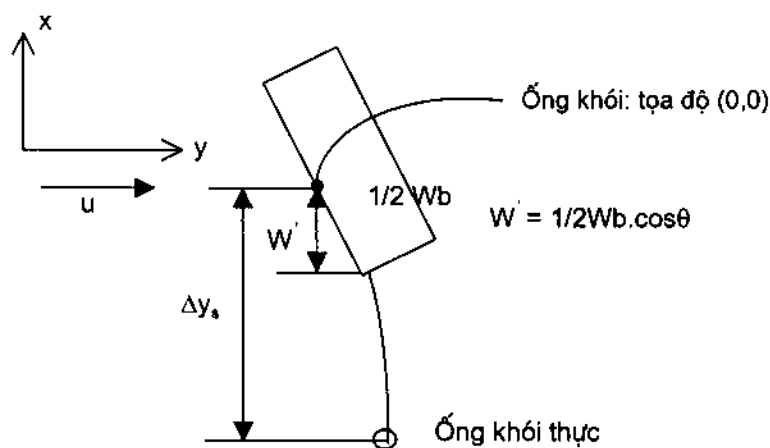
$$\text{Nếu } H_b < h_s < 2,5H_b, \quad \frac{W_b}{H_b} > 1$$

$$h_c = 0,44h_s \quad (7.76)$$

(7) Cách xác định vị trí ống khói

Khi gió thổi vào toà nhà theo một đường chéo thì sử dụng mô hình cột khói theo hướng gió thổi ngang. Nếu độ cao nguồn thải thấp hơn toà nhà thì tác động sẽ lớn hơn và ngược lại.

Mô hình dưới đây biểu thị cho sự thay đổi ống khói đối với thay đổi hướng gió.



Hình 7.13. Thay đổi vị trí ống khói do thay đổi hướng gió

Đối với toà nhà đứng độc lập:

– Nếu $\frac{W_b}{H_b} \leq 1,0$ thì:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta y_s}{W'} &= 2,0 & \frac{h_s}{H_b} &\leq 1,0 \\ \frac{\Delta y_s}{W'} &= -4,0 \left(\frac{h_s}{H_s} \right) + 6,0 & 1,0 < \frac{h_s}{H_b} &\leq 1,0 \\ \frac{\Delta y_s}{W'} &= 0,0 & \frac{h_s}{H_b} &> 1,5 \end{aligned} \quad (7.77)$$

– Nếu $\frac{W_b}{H_b} > 1,0$

$$\begin{aligned} \frac{\Delta y_s}{W'} &= 2,0 & \frac{h_s}{H_b} &\leq 1,0 \\ \frac{\Delta y_s}{W'} &= -3,0 \left(\frac{h_s}{H_s} \right) + 5,0 & 1,0 < \frac{h_s}{H_b} &\leq 1,67 \\ \frac{\Delta y_s}{W'} &= 0,0 \end{aligned} \quad (7.78)$$

Đối với toà nhà nằm trong tổ hợp công trình:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta y_s}{W'} &= 2,5 & \frac{h_s}{H_b} &\leq 1,0 \\ \frac{\Delta y_s}{W'} &= -3,0 \left(\frac{h_s}{H_s} \right) + 5,5 & 1,0 < \frac{h_s}{H_b} &\leq 1,83 \\ \frac{\Delta y_s}{W'} &= 0,0 & \frac{h_s}{H_b} &> 1,83 \end{aligned} \quad (7.79)$$

$$W' = \left(\frac{1}{2} W_b \right) \cos \theta \quad (7.80)$$

7.3.6. Một số lưu ý khác

Tính toán trong trường hợp điều kiện khí hậu ổn định

Trong mô hình ISC không tính đến trường hợp lặng gió hay trường hợp gió yếu (dưới 1m/s). Nhưng mô hình METILIS có tính đến trường hợp này

sử dụng các hệ số khuếch tán đường cong Tuner và các công thức tính độ phụt cho trong giáo trình MITI. Trong trường hợp lặng gió bỏ qua hiệu ứng hình nón. Công thức 7.81 của Briggs được dùng để tính độ phụt khối trong trường hợp lặng gió.

$$\Delta h = 1,4 Q_H^{1/4} \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^{-3/8} \quad (7.81)$$

Trong đó:

Δh là độ nâng cao của vệt khói (m)

$\frac{d\theta}{dz}$ là gradient nhiệt độ ($^{\circ}\text{C}$)

Ban ngày: $0,003^{\circ}\text{C}$ (độ ổn định khí quyển A-DD)

Ban đêm: $0,010^{\circ}\text{C}$ (độ ổn định khí quyển DN-G)

Giới hạn của quá trình tính toán

Việc tính toán trong giáo trình này được thực hiện dựa trên sự quan sát các điều kiện khí tượng trên từng giờ. Các điều kiện đầu vào ống khói đưa vào trong tính toán cũng được điều chỉnh đến giá trị tính theo giờ sao cho phù hợp với các điều kiện khí hậu.

Mặt khác, giá trị tối hạn của hướng gió thử nghiệm chạy trong nghiên cứu về mô hình phát thải là 3 phút. Giá trị tối hạn của đường cong Pasquill-Gifford cũng chỉ kéo dài vài phút. Để ước lượng kết quả tính toán là giá trị đo được trên từng giờ, đôi khi việc hiệu chỉnh lại là cần thiết. Tuy nhiên, lại không có phương pháp hiệu chỉnh thích hợp và phải dựa vào kinh nghiệm. Đối với mô hình ISC thì đánh giá giá trị tính toán không kèm theo chú thích về thời gian hiệu chỉnh.

Thông thường sử dụng phương pháp hiệu chỉnh thời gian thường xuyên nhằm tăng giá trị của σ_y . Một phương pháp khác được đề cập đến đó là phương pháp mà chỉ dùng khi tính toán giá trị trung bình hàng năm với ống thông gió thử nghiệm. Sau khi tính được giá trị trung bình chúng ta mới được phép làm tròn, tuy vậy, thật đáng tiếc là phương pháp này lại không được thừa nhận.

Việc tính toán giá trị trung bình hàng năm

Tiêu chuẩn Môi trường đưa ra các giá trị trung bình hàng năm đối với các hợp chất ví dụ benzen. Các giá trị này là kết quả của các điểm gián đoạn trên đường tròn (16 điểm) thường mô tả hướng gió theo điều kiện khí hậu đầu vào. Nhằm tránh được hiện tượng gián đoạn đối với phương thức tính trung bình trong thời gian dài bằng cách thay thế việc dùng một trục gió cố định cho mỗi điểm quay đại diện, một chương trình tiền xử lý khí tượng cho các giá trị ngẫu nhiên phân bố đồng đều theo hướng gió thổi trong khoảng thời gian như nhau trên một thời đoạn tính toán.

Sự khác biệt với mô hình ISC

Dưới đây là những điểm khác căn bản so với mô hình ISC:

- Chỉ áp dụng đối với nguồn điểm. Mô hình ISC xem xét nguồn đường, nguồn thải cao và số lượng nguồn khác nhau, trong đó nguồn đường và nguồn thải cao được tính toán đầy đủ, phép tính xấp xỉ nguồn điểm được áp dụng cho một số nguồn.

- Kiểu mục tiêu vùng không được xác định: Mô hình ISC phân loại theo vùng nông thôn và thành thị. Đặc biệt, đối với vùng nông thôn thì các thông số phân tán tách rời đường cong Pasquill–Gifford và đường cong Brigg đối với vùng đô thị.

- Sử dụng phương trình CONCAWE đối với các nguồn gây tác động lớn: Mô hình ISC dùng một loạt các phương trình Brigg theo cấp ổn định và điều kiện phát thải (nhiệt độ và tốc độ phát thải).

- Tính toán trong điều kiện khí quyển ổn định.

Mô hình ISC không có chương trình tính toán đối với trường hợp vận tốc gió nhỏ hơn 1 m/s.

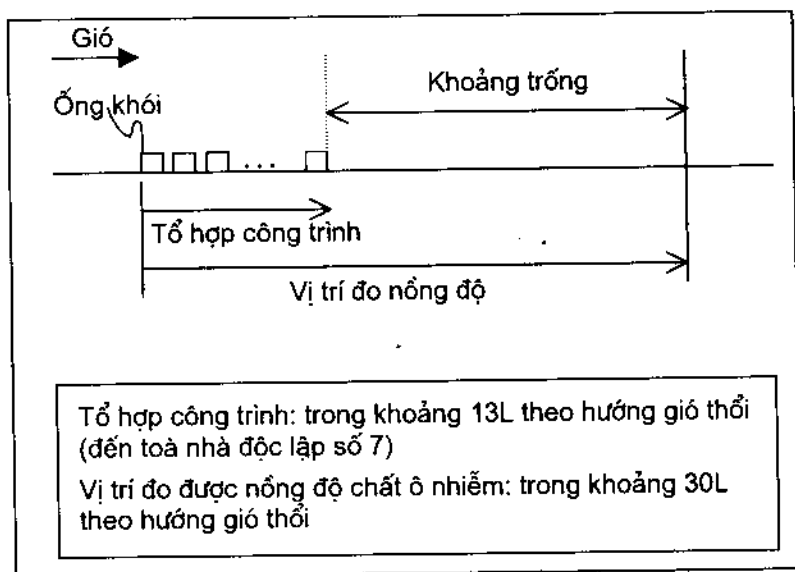
7.3.7. Các điều kiện ứng dụng mô hình METILIS

Phạm vi ứng dụng

Mô hình METILIS đã giới thiệu được làm mô hình mẫu sau khi thu được kết quả khả quan từ việc tính toán các hệ số theo ống thông gió thử nghiệm chỉ trong vòng 3 phút.

(1) Phạm vi tính toán

Ống thông gió thử nghiệm được bố trí nhằm thu được dữ liệu cơ bản để xây dựng mô hình phát thải. Hình 7.14 cho biết vị trí công trình và vị trí nồng độ đo được theo hướng gió thử nghiệm. Vị trí xa nhất mà nồng độ đo được là 30L.



Hình 7.14. Tổ hợp công trình và phép đo nồng độ chất ô nhiễm trong ống thông gió thử nghiệm

(2) Độ cao ống khói

Khi xây dựng mô hình, chỉ lấy số liệu ống thông gió thoả mãn $0,5 < Z_s/H_b \leq 1,5$, trong đó, Z_s là đại lượng biểu diễn độ cao ống khói, H_b là chiều cao công trình. Có thể xây dựng mô hình với các giá trị nằm trong khoảng $1,5 < Z_s/H_b \leq 2,5$, mô hình này không có chụp hình nón, bởi vậy phải ứng dụng mô hình ISC, chiều cao ống khói trong mô hình được mô tả tóm tắt như sau:

Nếu $Z_s/H_b > 2,5$ thì áp dụng mô hình ISC

Nếu $Z_s/H_b \leq 2,5$ thì dùng mô hình METILIS :

(3) Chiều rộng toà nhà

Khi xây dựng mô hình, chỉ lấy số liệu theo hướng gió thoả mãn $1,0 \leq W_b/H_b \leq 5,0$, trong đó W_b là đại lượng chỉ chiều rộng công trình.

(4) Tóm tắt phạm vi ứng dụng mô hình

**BẢNG 7.10. TÓM TẮT PHẠM VI ỨNG DỤNG MÔ HÌNH METILIS THEO
ỐNG THÔNG GIÓ THỬ NGHIỆM**

Thông gió	Phạm vi mô hình
Phạm vi tính toán	$3L \leq X \leq 30L$
Vị trí toà nhà nằm trong tổ hợp công trình	$X \leq 13L$
Chiều cao ống khói	$0 \leq Z_s/H_b \leq 2,5$
Chiều rộng toà nhà	$1,0 \leq W_b/H_b \leq 5,0$

(1) Vùng tính toán tối đa

Vùng rộng nhất đo ở phạm vi theo ống thông gió thử nghiệm, 30 L là vùng tính toán tối đa, tuy nhiên khoảng cách luồng khói tạt theo hướng gió thổi từ ống khói, phạm vi phát tán của chất ô nhiễm tăng đáng kể có thể lớn hơn kích thước công trình trong đó chất ô nhiễm bị phát tán ở dạng hạt thô. Vị trí của toà nhà thì ảnh hưởng đến khả năng dự báo. Vì thế mô hình cho phép ứng dụng trong khu vực rộng hơn 30L và vị trí toà nhà trong tổ hợp công trình có kích thước hơn 13 L.

Với những lập luận tương tự, mô hình METILIS có thể ứng dụng với các toà nhà nhiều phòng hoặc nhà máy thì xử lí như với tổ hợp công trình.

Tuy nhiên, có rất ít những nghiên cứu để xác định chính xác khoảng cách tính theo hướng gió thổi mà có thể ứng dụng mô hình METILIS và khoảng cách chính xác của công trình là bao nhiêu thì đạt được kết quả tin cậy. Đây là mục tiêu phấn đấu cho các công trình nghiên cứu trong tương lai.

(2) Như đã giải thích ở trên, mô hình được xây dựng chỉ khi thoả mãn điều kiện $0,5 < Z_s/H_b < 1,5$ tính theo hướng gió, nếu nằm ngoài điều kiện này thì phải dùng giá trị ngoại suy. Phạm vi đối với công trình tương lai dựa trên cơ sở của việc ứng dụng ngoài điều kiện kiểm tra này.

Ví dụ 7.2. Sử dụng chương trình tính toán METILIS

Các yêu cầu của hệ thống

Phần mềm này có những yêu cầu về máy tính như sau:

Windows 98SE, Window NT40 hoặc cao hơn

Màu hơn 65536 màu

Ổ cứng hơn 20 MB

Ram lớn hơn 128 MB

Có ổ CD-ROM

Chuột

Chạy phần mềm

Khởi động Window, khởi động chương trình METILIS phiên bản 2.0

Cửa sổ Window được chia làm 3 vùng:

- + Các mục cơ sở dữ liệu ngay ở phần đỉnh của bảng nhập số liệu tính toán;
- + Các nút lệnh từ Enter đến Delete nằm ở góc dưới của cửa sổ;
- + Nội dung dữ liệu nằm ở giữa cửa sổ.

Nội dung dữ liệu thay đổi theo các ô lựa chọn dữ liệu.

Quy trình thao tác chính

Quy trình vận hành chính gồm:

Nhập dữ liệu đầu vào.

Lựa chọn các điều kiện tính toán

Chạy chương trình

Kết quả đầu ra.

Sau đây là tổng quát 4 bước:

Bước 1: Nhập các điều kiện tính toán sử dụng các ô giữa các chất và điểm tính toán

Trước tiên nhập số liệu ứng với từng ô và chọn nút điều khiển thích hợp ở dưới đáy của cửa sổ. Bảng 7.11 liệt kê tên của các ô và các thông số đầu vào chính.

BẢNG 7.11. TÊN CÁC Ô VÀ CÁC THÔNG SỐ ĐẦU VÀO CHÍNH

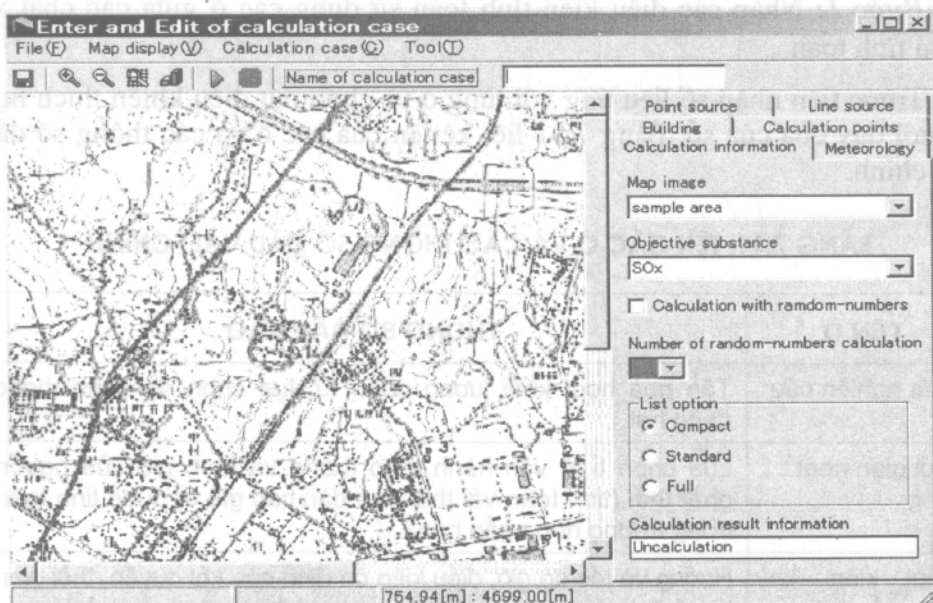
TÊN Ô	THÔNG SỐ ĐẦU VÀO
Chất nghiên cứu	Tên hoá học, khối lượng phân tử, lựa chọn dạng khí hoặc dạng hạt.
Thời gian hoạt động	Lựa chọn tỉ lệ vận hành theo tháng và theo giờ của nguồn phát thải (tính toán với thời hạn dài; các giá trị được tính toán trong trường hợp ngắn hạn).
Điều kiện khí hậu ngắn hạn	Hướng và tốc độ gió, điều kiện ổn định của khí quyển, thời gian tính toán, nhiệt độ...(tính toán trong trường hợp ngắn hạn).
Bản đồ	Xác định đường dẫn bản đồ (sử dụng đuôi jpg hoặc bmp).

TÊN Ô	THÔNG SỐ ĐẦU VÀO
Điểm phát thải	Chiều cao ống khói, lượng khí phát thải, nhiệt độ khí thải, đường kính ống khói, kích thước hạt và các thông tin khác về đặc trưng của nguồn phát thải.
Đường phát thải	Lượng khí thải, chiều rộng của đường và các thông tin khác về đặc điểm của đường phát thải.
Các công trình xây dựng	Chiều cao và các thông tin khác về đặc trưng của các toà nhà.
Điểm tính toán	Xác định phạm vi tính toán, khoảng cách chia lưới, chọn các điểm tính toán tùy ý.

Sau khi nhập xong số liệu đầu vào, bắt đầu tính toán. Nháy chuột vào Calculation Case (trường hợp tính toán). Trình tự là lựa chọn điều kiện tính toán, chạy chương trình và cho ra kết quả. Những bước này được miêu tả dưới đây.

Bước 2: Lựa chọn điều kiện tính toán và trường hợp tính toán.

Trong cửa sổ các trường hợp tính toán nút Enter/Edit các điều kiện tính toán được cài đặt, sẽ được mở sau khi nhấn ô trường hợp tính toán. Xác định các điều kiện tính toán bằng cách chọn các ô – từ thông tin tính toán tới điểm tính toán – nằm ở phía bên phải.



Hình 7.15. Các điều kiện tính toán trong cửa sổ cho các trường hợp

BẢNG 7.12. TÊN CÁC Ô VÀ CÁC THÔNG SỐ ĐẦU VÀO

TÊN	THÔNG SỐ ĐẦU VÀO
Thông tin tính toán	Lựa chọn bản đồ, chất nghiên cứu
Khí tượng	Lựa chọn điều kiện ngắn hạn, dài hạn và sử dụng các số liệu khí tượng
Điểm phát thải	Lựa chọn điểm phát thải, chọn sử dụng số liệu, sử dụng / không sử dụng
Đường phát thải	Lựa chọn đường phát thải, chọn số liệu sử dụng, sử dụng / không sử dụng
Công trình xây dựng	Lựa chọn các toà nhà, chọn số liệu sử dụng, sử dụng / không sử dụng
Điểm tính toán	Lựa chọn điểm tính toán

Bước 3: Nhấn chạy cửa sổ tính toán và trường hợp tính toán để thực hiện chương trình

Tính toán sự phát tán, nháy vào phím Run Caculation dưới Caculation Case trong thanh menu của cửa sổ trường hợp tính toán Enter/Edit. Các kết quả tính toán sẽ xuất hiện khi quá trình tính toán hoàn thành.

Bước 4: Nháy vào nút hiển thị kết quả trong cửa sổ Caculation case (trường hợp tính toán) để kết quả được đưa ra trong thanh menu của cửa sổ Caculation case (trường hợp tính toán), bạn có thể in kết quả phân tán nồng độ, nồng độ theo mặt cắt ngang, hoặc danh sách kết quả tính toán.

Tạo cơ sở dữ liệu

Dữ liệu tính toán phát tán sử dụng trong mô hình METILIS phiên bản 2.0 được lưu trong phần dữ liệu ở phần đỉnh của cửa sổ chính của chương trình. Trước tiên nhập số liệu, những số liệu này dùng để tính toán phát tán với những điều kiện khác nhau.

Có chín loại số liệu được nhập vào mô hình (bao gồm cả trường hợp tính toán). Các số liệu này được trình bày ở bảng 7.13.

BẢNG 7.13. DANH SÁCH SỐ LIỆU NHẬP VÀO

Số liệu chất nghiên cứu	Số liệu thời gian hoạt động
Số liệu khí tượng ngắn hạn	Số liệu về bản đồ
Số liệu nguồn phát thải	Số liệu đường phát thải
Số liệu về các toà nhà	Số liệu điểm tính toán

Số liệu chất nghiên cứu

Trong phần số liệu nghiên cứu sử dụng tính toán bao gồm tên chất, khối lượng nguyên tử, tính chất của chất nghiên cứu và hệ số hiệu chỉnh tốc độ.

Nháy chuột vào ô chất đã nghiên cứu trong cửa sổ chính sẽ hiển thị danh sách tên và số liệu khối lượng nguyên tử.

Sau khi nhập tên và khối lượng nguyên tử của chất nghiên cứu thì nhấn nút OK. Đơn vị khối lượng nguyên tử được sử dụng chuyển từ khí (m^3N) và chất rắn (mg).

Đối với chất, chọn chất dạng khí hoặc dạng hạt. Nếu chọn chất dạng hạt thì nhấn vào ô điều chỉnh hệ số tốc độ. Hệ số điều chỉnh tốc độ được sử dụng theo phương pháp lắng trọng lực giống như các chất phát sinh từ trạng thái hạt. Hệ số điều chỉnh tốc độ bằng 1 khi hạt có dạng hình cầu. Mỗi lần dữ liệu được nhập vào thì ấn phím OK.

Dữ liệu được nhớ sẽ hiển thị trong danh sách cơ sở dữ liệu.

Số liệu về thời gian hoạt động

Tính toán thời đoạn dài yêu cầu phải có thời gian hoạt động của nguồn phát thải (cố định điểm phát thải hoặc di chuyển đường phát thải) theo giờ và tháng. Trong bước này, thời gian hoạt động theo giờ và tháng được nhập vào. Hoạt động theo giờ đủ để di chuyển đường phát thải mà sự phát thải thay đổi theo tháng là rất nhỏ có thể bỏ qua.

Nháy chuột vào Operation Pattern tab trên cửa sổ chính sẽ hiển thị danh sách số liệu hoạt động đã được ghi trước đó.

Ví dụ số liệu đầu vào trong trường hợp ngắn hạn

THỨ TỰ ĐẦU VÀO	TÊN CÁC TRƯỜNG HỢP TÍNH TOÁN	GIÁ TRỊ SỐ LIỆU	CHÚ Ý
1) Các chất nghiên cứu	Tên chất nghiên cứu	Benzen	
	Khối lượng nguyên tử	78	
	Đặc điểm của chất	Khí	Mặc định
2) Thời gian vận hành	Xác định thời gian	Vận hành cả ngày	Giả sử là ngắn hạn và ban đầu là vận hành 100%
3) Điều kiện khí tượng ngắn hạn	Xác định tên điều kiện khí tượng ngắn hạn	Neutral SE	
	Chiều cao của thiết bị đo gió	10	Mặc định
	Hệ số hiệu chỉnh thời gian	0,2	Mặc định
	Thời đoạn ước tính	60	Lựa chọn
	Số liệu khí tượng	Nhiệt độ	20
		Tốc độ gió (m/s)	3,5
		Độ ổn định khí tượng	DD
		Hướng gió	Tây nam
Điều kiện khí tượng dài hạn			Mặc định 16 hướng
4) Bản đồ	Tên bản đồ	Bản đồ 1	
	Tên bản đồ nền	Bản đồ 1	
	Mặc định chiều dài bất kì	1000	Tỉ lệ bản đồ
	Độ phân giải (bpi)	96	Số liệu đầu vào là không cần thiết
	Thu nhỏ bản đồ theo tỉ lệ [1/]	20000	
	Toạ độ ban đầu	Đông tây 0, Bắc nam 0	

5) Nguồn điểm phát thải	Tên nhóm nguồn phát thải		Văn phòng A	
	Bản đồ sử dụng		Bản đồ 1a	Lựa chọn
	Chất nghiên cứu		Benzen	Lựa chọn
	Đơn vị phát thải		g/h	Lựa chọn
	Nguồn điểm phát thải 1	Thông tin cơ bản	Tên nguồn phát thải	Ống khói 1
			Toạ độ (Đông & Tây)	2530
			Toạ độ (Bắc & Nam)	2180
			Chiều cao ống khói	15
			Lượng khí phát thải	60
			Độ cao so với mặt biển	
			Thời gian tính toán	Cả ngày
		Thông tin chi tiết	Khói quần	
			Khói khuếch tán rộng	
			Lượng khí (m ³ N/h)	5
			Nhiệt độ khí	80
	Nguồn điểm phát thải 2	Thông tin cơ bản	Tên nguồn phát thải	Ống khói 2
			Toạ độ (Đông & Tây)	2620
			Toạ độ (Bắc & Nam)	2580
			Chiều cao ống khói	15
			Lượng khí phát thải	120
			Độ cao so với mặt biển	
			Thời gian tính toán	Cả ngày
		Thông tin chi tiết	Khói quần	
			Khói khuếch tán rộng	
			Lượng khí (m ³ N/h)	5
			Nhiệt độ khí	80

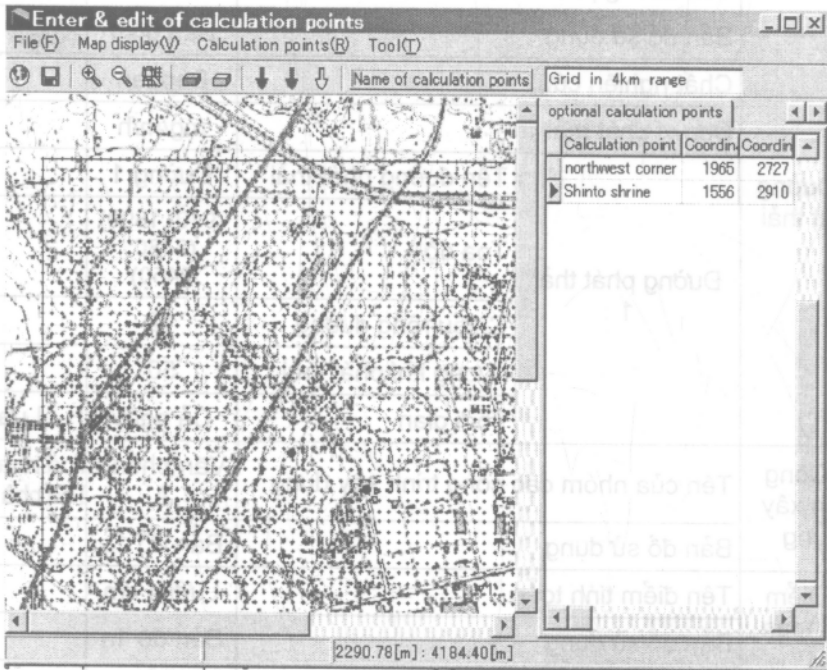
	Nguồn điểm phát thải 3	Thông tin cơ bản	Tên nguồn phát thải	Ống khói 1	
			Toạ độ (Đ & T)	1970	Điều chỉnh giá trị đầu vào
			Toạ độ (B & N)	2660	
			Chiều cao ống khói	20	
			Lượng khí thải	120	
			Độ cao so với mặt biển	x	Không chọn
			Thời gian	Cả ngày	Lựa chọn
		Thông tin chi tiết	Khói quần	√	Lựa chọn
			Khói khuếch tán rộng	√	Lựa chọn
			Đường kính ống khói (m)	0,4	
			Lượng khí thải (m³N/h)	10	
			Nhiệt độ khí	80	

6) Đường phát thải	Tên đường phát thải		Main road	
	Bản đồ sử dụng		Bản đồ 1	
	Chất nghiên cứu		Benzen	
	Đơn vị phát thải		mg/m/h	
	Đường phát thải 1	Tên đường phát thải	Đường 1	
		Toạ độ	(910; 1890) (3480; 2450)	
		Chiều rộng đường	12	
		Lượng khí phát thải	50	
		Thời gian	Cả ngày	Lựa chọn

7) Công trình xây dựng	Tên của nhóm các công trình xây dựng	Văn phòng A	Toà nhà lớn 30 m Toà nhà nhỏ 10 m
	Bản đồ sử dụng	Bản đồ 1a	

8) Điểm tính toán	Tên điểm tính toán	Lưới 4 km	
	Bản đồ sử dụng	Bản đồ 1a	
	Khoảng cách mắt lưới theo trục X (m)	200	
	Khoảng cách mắt lưới theo trục Y (m)	200	

	Chiều dài theo hướng Đông –Tây (m)		4200	
	Chiều dài theo hướng Bắc –Nam (m)		4200	
	Số mắt lưới theo hướng Đông –Tây		80	
	Số mắt lưới theo hướng Bắc –Nam		80	
	Độ cao của điểm tính toán (m)		1,5	
	Điểm tính toán 1	Tên điểm tính toán	Calculate 1	Nhập vào sơ đồ
		Đông –Tây [m]	Khoảng 1940	
		Bắc –Nam [m]	Khoảng 2710	
	Điểm tính toán 2	Tên điểm tính toán	Calculate 2	Nhập vào sơ đồ
		Đông –Tây [m]	Khoảng 1540	
		Bắc –Nam [m]	Khoảng 2890	



Hình 7.16. Mắt lưới và điểm tính toán

Ví dụ số liệu đầu vào trong trường hợp dài hạn

THỨ TỰ ĐẦU VÀO	TÊN CÁC TRƯỜNG HỢP TÍNH TOÁN	SỐ LIỆU ĐẦU VÀO	GHI CHÚ	
1) Chất nghiên cứu	Chất hoá học	Benzen	Giống như trong trường hợp ngắn hạn	
	Khối lượng nguyên tử	78		
Khí tượng ngắn hạn				
(2) Thời gian hoạt động	Xác định thời gian hoạt động		Ít hoạt động vào ban đêm	
	Thời gian hoạt động 1	Khoảng thời gian	Từ 0 h đến 8 h (tháng 8)	0:00 – 7:59 (40%)
		Tốc độ hoạt động	40%	8:00 – 16:59 100%
	Thời gian hoạt động 2	Khoảng thời gian	Từ 17 h đến 24 h (tháng 8)	17:00 – 23:59 40%
		Tốc độ hoạt động	40%	
(3) Bản đồ nền	Tên bản đồ nền		Bản đồ 1a	Giống như trường hợp ngắn hạn
(4) Nguồn điểm phát thải	Tên nguồn điểm phát thải		Văn phòng A tháng 8	
(5) Nguồn đường phát thải	Tên nguồn đường phát thải		Main road	Giống như trường hợp ngắn hạn
(6) Công trình xây dựng	Tên nhóm công trình xây dựng		Toà nhà văn phòng A	
(7) Điểm tính toán	Tên các điểm tính toán		Lưới phạm vi 4 km	
	Số mắt lưới		Đông – Tây	20
			Bắc – Nam	20

Trường hợp tính toán

TT ĐẦU VÀO	TÊN CÁC TRƯỜNG HỢP TÍNH TOÁN	SỐ LIỆU ĐẦU VÀO	GHI CHÚ
Tên trường hợp tính toán		Kiểm tra vào tháng 8	
8) Thông tin tính toán	Bản đồ nền	Bản đồ mẫu 1a	
	Chất nghiên cứu	Benzen	
	Số trường hợp tính toán ngẫu nhiên	Lựa chọn	
	Số trường hợp tính toán ngẫu nhiên	1	
	Lựa chọn danh sách	Chuẩn	
(9) Điều kiện khí hậu	Lựa chọn khí hậu	Sử dụng file khí hậu dài hạn	
	Sử dụng file khí hậu dài hạn	C:\meteorology_It_aug.in.csv	
	Sử dụng file khí tượng định kì đo mỗi giờ một lần	C:\timecode_aug.in.csv	
(10) Nguồn điểm phát thải	Nguồn điểm phát thải	Văn phòng A tháng 8	
(11) Nguồn đường phát thải	Nguồn đường phát thải	Main road	
	Tần suất lặp lại tối thiểu	7	
	Tần suất lặp lại tối đa	7	
	Tỉ lệ sai số trong trường hợp tính toán gián đoạn	0,03	
(12) Công trình xây dựng	Sử dụng số liệu công trình xây dựng	Lựa chọn	
	Tên công trình xây dựng	Toà nhà văn phòng A	
(13) Điểm tính toán	Điểm tính toán	Mất lưới phạm vi 4 km	

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. **Кафаров В.В.** Методы кибернетики в химии и химической технологии. Изд. "Химия", М., 1985, 448с.
2. **Кафаров В.В.** Принципы создания безотходных химических производств. Изд. "Химия", М., 1982, 288 с.
3. **Бояринов А. И. Кафаров В.В.** Методы оптимизации в химической технологии. Изд. "Химия", М., 1975, 576 с.
4. **Ахназарова С.Л., Кафаров В.В.** Оптимизации эксперимента в химии и химической технологии. Изд. "Высшая Школа" М., 1978, 320 с.
5. **Кафаров В.В., Перов В. Л., Мещалкин В. П.** Принципы математического моделирования химико технологических систем. Изд. "Химия" М., 1974, 344 с.
6. **Кафаров В.В., Винаров А. Ю., Гордеев Л. С.** Моделирование биохимических реакторов. Изд. "Лесная промышленность" М., 1979, 344с.
7. **Островский Г.М., Волин Ю.М.** Моделирование сложных химико-технологических схем. Изд. "Химия", М., 1975, 312 с.
8. **Кафаров В.В., Винаров А. Ю., Гордеев Л. С.** Моделирование и системный анализ биохимических производств. Изд. "Лесная промышленность" М., 1985, 280с.
9. **Комиссаров Ю.А., Глебов М. Б., Гордеев Л.С., Вент Д.П.** Химико- технологические процессы. Теория и эксперимент. Изд. "Химия" М., 1999, 360 с.
10. **Комиссаров Ю.А., Гордеев Л.С., Нгуен Суан Нгуен.** Анализ и синтез систем водообеспечение химических производств. Изд. "Химия" М., 2002, 496 с.
11. **Математические модели контроля загрязнения воды.** Изд. "Мир" М., 1981, 472 с.

12. **Вавилин В.А.** Нелинейные модели биологической очистки и процессов самоочищения в реках. Изд. "Наука" М., 1983, 160 с.
13. **Бейли Д. Ж., Олдис Д.** Основы биохимической инженерии. Часть 2. Изд. "Мир" .М, 1985, 592 с.
14. **Яровенко В. Л., Ровинский Л. А.** Моделирование и оптимизация микробиологических процессов спиртового производства. Изд. "Пищевая промышленность" М., 1978, 248 с.
15. **David M. Himmelblau.** Applied nonlinear programming. McGraw – Hill Book company, 1972.
16. **David M. Himmelblau.** Process analysis by statistical methods. John Willey and Sons Inc. New york – London – Sydney – Toronto, 1970.
17. **George Tchobanoglous, Franklin L. Burton.** Wastewater engineering. Treatment, disposal and reuse. Metcalf & Eddy, Inc. 1991, 1334p.
18. **Siebel M.A, Tran Ung Long.** Modelling the UASB reactor. International course on anaerobic wastewater treatment. Holland, 1991, 37pp.
19. **H. Scott Fogler.** Elements of chemical reaction engineering. Prentice – Hall International, Inc. 1992, 838p.
20. **Process compeetations in biotechnology.** Tata McGraw – Hill Publishing Company Limited. New Dehli, 1994, 514p.
21. **Gerard Kiely.** Environmental engineering. The McGraw – Hill companies, 1997, 979p.
22. Technical manual METI – LIS, Version 2.0, JEMAI, 2003.
23. **Nguyễn Minh Tuấn, Phạm Văn Thiêm.** Kỹ thuật hệ thống công nghệ hoá học. Tập I: Cơ sở mô hình hoá các quá trình công nghệ hoá học. NXB Khoa học và Kỹ thuật. Hà Nội, 1997, 264 trang.
24. **Trần Hiếu Nhuệ.** Thoát nước và xử lý nước thải công nghiệp. NXB Khoa học và Kỹ thuật. Hà Nội, 1998, 304 trang.
25. **Trần Văn Nhân, Ngô Thị Nga.** Giáo trình công nghệ xử lý nước thải. NXB Khoa học và Kỹ thuật. Hà Nội, 1999, 332 trang.

26. **Trịnh Xuân Lai.** Tính toán thiết kế các công trình xử lý nước thải. NXB Xây dựng. Hà Nội, 2000, 240 trang.
27. **Hoàng Kim Cơ, Trần Hữu Uyển, Lương Đức Phẩm, Lí Kim Bảng, Dương Đức Hồng.** Kỹ thuật môi trường. NXB Khoa học và Kỹ thuật. Hà Nội, 2001, 432 trang.
28. **Lương Đức Phẩm.** Công nghệ xử lý nước thải bằng biện pháp sinh học. NXB Giáo dục. Hà Nội, 2002, 340 trang.
29. **Hoàng Văn Huệ, Trần Đức Hạ.** Thoát nước. Tập II: Xử lý nước thải. NXB Khoa học và Kỹ thuật. Hà Nội, 2002, 583 trang.
30. **Tăng Văn Đoàn, Trần Đức Hạ.** Kỹ thuật môi trường. NXB Giáo dục. Hà Nội, 2002, 228 trang.
31. **Trịnh Thị Thanh, Trần Yêm, Đông Kim Loan.** Giáo trình công nghệ môi trường. NXB ĐHQG Hà Nội, 2003, 254 trang.
32. **Nguyễn Xuân Nguyên, Phạm Hồng Hải.** Lý thuyết và mô hình hoá quá trình xử lý nước thải bằng phương pháp sinh học. NXB Khoa học và Kỹ thuật. Hà Nội, 2003, 288 trang.
33. **Nguyễn Xuân Nguyên.** Công nghệ xử lý nước thải. NXB Khoa học và Kỹ thuật. Hà Nội, 2003, 324 trang.
34. **Nguyễn Xuân Nguyên, Trần Đức Hạ.** Chất lượng nước sông hồ và bảo vệ môi trường nước. NXB Khoa học và Kỹ thuật. Hà Nội, 2004, 200 trang.
35. **Nguyễn Xuân Nguyên, Phạm Hồng Hải.** Công nghệ xử lý nước thải bệnh viện. NXB Khoa học và Kỹ thuật. Hà Nội, 2004, 200 trang.
36. **Nguyễn Xuân Nguyên.** Công nghệ xử lý chất thải khí. NXB Khoa học và Kỹ thuật. Hà Nội, 2004, 244 trang.

MỤC LỤC

Lời nói đầu	3
Chương I. Phương pháp mô hình hoá toán học.....	5
1.1. Xây dựng mô hình toán học	7
1.2. Thuật toán hoá mô hình toán	10
1.3 Sự tương hợp của mô hình toán học với đối tượng thực	13
Chương II. Những mô hình cơ sở của quá trình xử lý nước thải ..	24
2.1 Nguyên tắc xây dựng mô hình toán học của quá trình xử lý nước thải.....	24
2.2. Mô hình động học sinh trưởng của vi sinh vật	28
2.3. Các mô hình cấu trúc dòng tiêu biểu trong thiết bị xử lý nước thải	36
2.4. Mô hình chuyển khối trong thiết bị phản ứng sinh học.....	66
Chương III. Mô hình hoá quá trình xử lý nước thải bằng phương pháp sinh học hiếu khí.....	94
3.1. Mô hình hoá toán học aeroten.....	97
3.2. Mô hình toán học của quá trình xử lý nước thải bằng biophin.....	127
3.3. Mô hình toán học của thiết bị phản ứng lên men hiếu khí	129
3.4. Mô hình toán học đầy đủ của thiết bị phản ứng sinh hoá.....	137
3.5. Xác định nồng độ vi sinh vật cố định trên chất mang	145
3.6. Thiết bị phản ứng sinh hoá airlift với đệm trôi nổi và vi sinh vật cố định trên đệm.....	148
3.7. Mô hình toán học của quá trình lắng.....	156
3.8. Mô hình toán học của quá trình làm sạch nước thải bằng phương pháp sinh học	162
3.9. Mô hình toán học của quá trình tạo bông.....	160
3.10. Tổ chức dòng trong aeroten của quá trình làm sạch nước thải bằng phương pháp sinh học	173

Chương IV. Mô hình hoá quá trình xử lý nước thải bằng phương pháp sinh học kỵ khí.....	181
4.1. Mở đầu	181
4.2. Xây dựng mô hình.....	181
4.3. Kiểm nghiệm mô hình.....	207
Chương V. Xây dựng mô hình toán học của các sơ đồ công nghệ tối ưu làm sạch nước thải.....	211
5.1. Hệ thống phân loại nước thải.....	211
5.2. Thuật toán lựa chọn phương pháp xử lý theo hệ thống phân loại nước thải.....	218
5.3. Chọn các phương pháp xử lý và sự sắp xếp tương hỗ của chúng trong sơ đồ công nghệ làm sạch nước thải.....	220
5.4. Định hình sơ đồ công nghệ xử lý	227
5.5. Tiêu chuẩn đánh giá sự lựa chọn sơ đồ xử lý tối ưu	231
5.6. Phương pháp đa mức tổng hợp các sơ đồ tối ưu xử lý nước thải bằng biện pháp sinh học	233
Chương VI. Giám sát sự ô nhiễm môi trường nước do nước thải	291
6.1. Đánh giá tình trạng của môi trường được giám sát	291
6.2. Mô hình hoá toán học sự lan truyền tạp chất trong môi trường nước	298
6.3. Dự báo trạng thái của các đối tượng nước	319
6.4. Đánh giá trạng thái của đối tượng được giám sát.....	327
6.5. Đánh giá chất lượng của quyết định chấp nhận.....	329
6.6. Nhận dạng nguồn xả gây ô nhiễm vào môi trường nước.....	332
6.7. Tính toán lượng xả giới hạn cho phép	350
Chương VII. Mô hình kiểm soát ô nhiễm không khí	352
7.1. Ảnh hưởng của các yếu tố khí tượng tới sự phân bố bụi và các chất độc hại	352
7.2. Tính toán nồng độ chất độc hại trong không khí.....	354
7.3. Mô hình METILIS.....	370

Chịu trách nhiệm xuất bản :

Chủ tịch HĐQT kiêm Tổng Giám đốc NGÔ TRẦN ÁI

Phó Tổng Giám đốc kiêm Tổng biên tập NGUYỄN QUÝ THAO

Biên tập nội dung :

TRƯƠNG ĐỨC KIÊN

Chế bản và sửa bản in :

TRƯƠNG ĐỨC KIÊN

Trình bày bìa :

MẠNH HÙNG

CƠ SỞ KHOA HỌC TRONG CÔNG NGHỆ BẢO VỆ MÔI TRƯỜNG

**Tập bốn: MÔ HÌNH HOÁ CÁC QUÁ TRÌNH THIẾT BỊ
CÔNG NGHỆ MÔI TRƯỜNG**

Mã số: 7K637H9 - NĐN

In 1.000 cuốn, khổ 16 x 24 cm, tại Công ty Cổ phần In và Dịch vụ Thừa Thiên Huế, 57 Bà Triệu - Huế; Số xuất bản: 268 - 2009/CXB/6-472/GD.
In xong và nộp lưu chiểu tháng 5 năm 2009.



VƯƠNG MIỆN KIM CƯƠNG
CHẤT LƯỢNG QUỐC TẾ



Giá: 88.000đ