

NGHIÊN CỨU ẢNH HƯỞNG CỦA CÁC NHIỄU NGẪU NHIÊN ĐỐI VỚI HỆ THỐNG KẾT TINH THU HỒI AXIT AMIDOSULFONIC

Lê Xuân Hải

Trường Đại học Bách khoa, ĐHQG-HCM

(Bài nhận ngày 10 tháng 05 năm 2011, hoàn chỉnh sửa chữa ngày 01 tháng 11 năm 2011)

TÓM TẮT: Bài báo này giới thiệu một phương pháp mô phỏng các ảnh hưởng tiêu cực do các nhiễu loạn ngẫu nhiên gây ra trong quá trình hoạt động của các hệ thống thiết bị công nghệ hóa học. Các kết quả nghiên cứu thu được trong quá trình kết tủa các hạt dị thể đa phân tán từ pha lỏng chứa axit amidosulfonic đã chỉ ra rằng các biến động nhiễu ở các đại lượng đầu vào như suất lượng, độ quá bão hòa, ... đã gây ra sự suy giảm nghiêm trọng hiệu quả thu hồi pha kết tinh. Do vậy, ngăn chặn ảnh hưởng của các nhiễu loạn ngẫu nhiên là một mục tiêu rất quan trọng cần được quan tâm đúng mức trong các hệ thống thiết bị làm việc với hệ dị thể đa phân tán.

Từ khóa:

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Một hệ thống thiết bị công nghệ hoạt động với sự có mặt của một thành phần tồn tại ở dạng đa phân tán (các hạt rắn, các tế bào vi sinh, các giọt lỏng, các bọt khí), dù ở quy mô nghiên cứu thí nghiệm hay quy mô hiện trường cũng thường xuyên chịu những tác động không tránh khỏi của các hiện tượng ngẫu nhiên. Xét theo bản chất các ngẫu nhiên này có thể chia thành các nhóm khác nhau trong đó có ba nhóm thường gặp sau đây. Nhóm ngẫu nhiên thứ nhất tồn tại như một thuộc tính tất yếu của hệ thống công nghệ ví dụ như thời gian lưu của các phần tử tham gia vào dòng lưu chất của quá trình công nghệ hoặc kích thước hạt huyền phù của pha rắn được tách ra từ pha lỏng. Đặc tính ngẫu nhiên của các đại lượng thời gian lưu hoặc kích thước hạt được biểu đạt thông qua các hàm phân bố có bản chất hoàn toàn tương đồng với các hàm phân bố xác suất. Hàm phân bố thời gian lưu cũng như hàm phân bố kích

thước hạt phụ thuộc rất nhiều vào cấu trúc, quy mô của hệ thống thiết bị. Nhóm ngẫu nhiên thứ hai được đặc trưng bởi sự thay đổi những tính chất hóa lý sinh của các phần tử tham gia phản ứng ví dụ như hoạt tính của các xúc tác sinh hóa học, tốc độ sinh trưởng và thoái hóa của vi sinh vật, ... Nhóm ngẫu nhiên thứ ba là những nhiễu loạn làm dao động các thông số của chế độ công nghệ như nhiệt độ, áp suất, nồng độ các cấu tử, suất lượng các dòng vật chất cũng như các dòng năng lượng, ... Dưới tác động của các yếu tố ngẫu nhiên hầu hết các quá trình dị thể đa phân tán đều bị ảnh hưởng theo chiều hướng làm suy giảm các chỉ tiêu đặc trưng cho hiệu quả của quá trình đang xét.

Trong báo cáo này trình bày các kết quả nghiên cứu một phương thức đánh giá tác động của các yếu tố ngẫu nhiên thuộc nhóm thứ nhất và nhóm thứ ba đến chất lượng, hiệu quả của một hệ thống thiết bị thu hồi axit amidosulfonic

(ASA) được kết tủa trong quá trình kết tinh từ dung dịch.

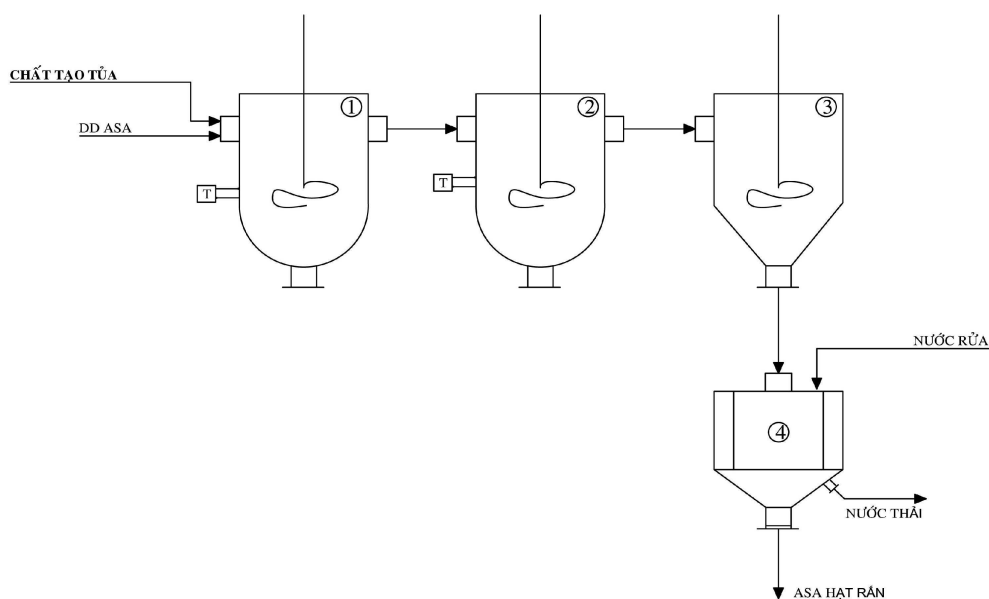
2. ĐỐI TƯỢNG VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Đối tượng

ASA có công thức hóa học NH_2HSO_3 là hóa chất được sử dụng với nhiều mục đích khác nhau, trong đó có việc sử dụng để rửa làm sạch các bề mặt kim loại (kể cả bề mặt bên trong của các hệ thống thiết bị lớn, phức tạp).

Đối tượng nghiên cứu là hệ hai thiết bị khuấy nối tiếp (hình 1) thuộc công đoạn kết tinh thu hồi sản phẩm ASA. Dưới tác động của tác nhân

tạo quá bão hòa nhờ tác động thay đổi pH, ASA kết tủa thành pha rắn đa phân tán trong các thiết bị 1 và 2. Các hạt ASA được tách khỏi dòng nước thải nhờ thiết bị ly tâm 4 và được rửa sạch trước khi đưa vào xử lý ở các công đoạn tiếp theo. Do tác động của nhiều yếu tố, các thông số đặc trưng cho chế độ công nghệ kết tinh (suất lượng dòng pha lỏng chứa ASA, độ quá bão hòa, ...) dao động theo thời gian như những quá trình ngẫu nhiên. Điều đó dẫn đến nồng độ ASA trong nước thải sau ly tâm tách pha tinh thể, thành phần kích thước hạt ASA và cả nồng độ ASA thất thoát theo nước rửa cũng bị dao động theo.



Hình 1. Sơ đồ hệ thống thiết bị trong quy trình kết tinh thu hồi ASA

1, 2 – Thiết bị kết tinh ASA; 3 – Bồn chứa huyền phù ASA trước khi ly tâm tách pha;
4 – Thiết bị ly tâm tách ASA rắn; T – Hệ thống kiểm soát nhiệt độ.

2.2. Phương pháp nghiên cứu

+ Phương pháp khai thác phương trình cân bằng tính chất quần thể hạt đa phân tán để thiết

lập hệ phương trình vi phân biểu diễn quá trình kết tủa ASA.

+ Phương pháp mô phỏng quá trình ngẫu nhiên (suất lượng đầu vào, độ quá bão hòa, ...)

với các bước: a) xác định các đặc trưng ngẫu nhiên của các dòng đầu vào; b) tạo các hiện ảnh của đại lượng ngẫu nhiên có phân bố đều trong giới hạn [0,1]; c) xây dựng thuật toán tạo ra các hiện ảnh của quá trình ngẫu nhiên đang được nghiên cứu.

+ Phương pháp phân tích xử lý thống kê dữ liệu mô phỏng trên đầu ra của hệ thống thiết bị

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Mô tả toán học của quá trình kết tủa thu hồi ASA

Quá trình kết tinh ASA trong hệ hai thiết bị khuấy trộn nối tiếp được thực hiện trong một hệ dị thể gồm pha đa phân tán là các hạt rắn

$$\frac{\partial f(X,t)}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left[f(X,t) \frac{\partial x_i}{\partial t} \right] - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{x_{ij}} \frac{\partial f(X,t)}{\partial x_j} \right] = q_d \quad (1)$$

trong đó $f(X,t)$ là hàm mật độ phân bố hạt (HPB) của pha đa phân tán theo n đại lượng x_i tạo thành vector X và theo thời gian t .

Đối với quá trình kết tinh ASA đang xét, X là vector chứa một phần tử x_1 duy nhất là thể tích hạt r . Hàm mật độ $f(X,t)$ trở thành hàm phân bố hạt theo kích thước $f(r,t)$ được định nghĩa bởi biểu thức :

$$f(r,t)dr = dN; \quad (2)$$

với dN – số hạt có kích thước từ r đến $r + dr$ có trong một đơn vị thể tích huyền phù tồn tại trong thiết bị kết tủa. Trong phương trình cân bằng (1) thành phần $\frac{\partial x_i}{\partial t}$ chính là tốc độ lớn lên η của hạt ASA; thành phần $D_{x_{ij}}$ chính là hệ số thăng giáng thể tích hạt D_r ; thành phần q_d biểu đạt sự biến thiên HPB hạt $f(r,t)$ theo tốc độ tạo mầm I_z , tốc độ cấp hạt ASA vào q_{in} và tốc độ lấy hạt ASA ra q_{out} tại một thiết bị kết tủa.

ASA và pha liên tục là môi trường dung dịch chứa các hạt ASA đang cùng chuyển động hỗn loạn. Để có thể mô tả đầy đủ diễn biến của quá trình đa phân tán phức tạp này đòi hỏi phải xây dựng được mô hình toán học biểu đạt sự sinh ra và không ngừng biến đổi kích thước của một quần thể rất nhiều hạt ASA kích thước khác nhau. Đây là một bài toán mô hình hóa khá nan giải. Trong nghiên cứu này giải pháp được lựa chọn nhằm vượt qua rào cản mô hình hóa là khai thác một quan hệ toán học tổng quát có tầm quan trọng hàng đầu đối với các hệ có cấu trúc dị thể đa phân tán. Đó là phương trình cân bằng tính chất quần thể hạt đa phân tán được viết dưới dạng [1] :

Khi đó phương trình biến thiên hàm phân bố hạt trong thiết bị kết tủa (được truy xuất từ phương trình cân bằng tính chất quần thể hạt đa phân tán) sẽ có dạng:

$$\frac{\partial f^{(i)}}{\partial t} + \frac{\partial (f^{(i)} \cdot \eta^{(i)})}{\partial r} - \frac{\partial (D_r \cdot \frac{\partial f^{(i)}}{\partial r})}{\partial r} = I_z^{(i)} \cdot \delta(r - r_z) + q_{in}^{(i)} \cdot f^{(i-1)} - q_{out}^{(i)} \cdot f^{(i)} \quad (3)$$

trong đó $(i) = 1,2$ là số thứ tự của thiết bị kết tủa tương ứng.

Sử dụng đại lượng moment bậc j (ký hiệu là $M_j^{(i)}$) được xác định bằng cách lấy tích phân theo r từ 0 đến ∞ về phải của biểu thức: $dM_j^{(i)} = r^j f^{(i)}(r)dr$, (4)

từ phương trình vi phân đạo hàm riêng (3) thu được hệ phương trình vi phân thường đối với các moment bậc j của hàm phân bố hạt theo kích thước $f(r)$:

$$d(M_0^{(i)})/dt = I_z^{(i)} + (\tau_{in}^{(i)})^{-1} \cdot M_0^{(i-1)} - (\tau_{out}^{(i)})^{-1} \cdot M_0^{(i)} \quad (5)$$

$$d(M_1^{(i)})/dt = M_0^{(i)} \cdot \eta^{(i)} + (\tau_{in}^{(i)})^{-1} \cdot M_1^{(i-1)} - (\tau_{out}^{(i)})^{-1} \cdot M_1^{(i)} \quad (6)$$

$$d(M_2^{(i)})/dt = 2M_1^{(i)} \cdot \eta^{(i)} + 2D_r \cdot M_0^{(i)} + (\tau_{in}^{(i)})^{-1} \cdot M_2^{(i-1)} - (\tau_{out}^{(i)})^{-1} \cdot M_2^{(i)} \quad (7)$$

trong đó $\tau_{in}^{(i)} = v_{in}^{(i)}/V^{(i)}$, $\tau_{out}^{(i)} = v_{out}^{(i)}/V^{(i)}$; $v_{in}^{(i)}$, $v_{out}^{(i)}$ – suất lượng dòng đầu vào và đầu ra tương ứng của thiết bị kết tủa thứ i ; $V^{(i)}$ – thể tích thiết bị kết tủa.

Từ các moment M_0 , M_1 , M_2 dễ dàng tính ra tổng số hạt rắn ASA có trong một đơn vị thể tích, thể tích hạt trung bình và phương sai của nhóm hạt thu được.

Áp dụng phương trình cân bằng tính chất quần thể hạt đa phân tán (1) cho pha lỏng trong thiết bị kết tủa dễ dàng truy xuất được phương trình biến thiên nồng độ ASA ($C^{(i)}_{ASA}$) trong từng thiết bị kết tủa:

$$d(C^{(i)}_{ASA})/dt = (\tau_{in}^{(i)})^{-1} \cdot C^{(i-1)}_{ASA} - (\tau_{out}^{(i)})^{-1} \cdot C^{(i)}_{ASA} - \rho^o_{ASA} \cdot M_0^{(i)} \cdot \eta^{(i)} \quad (8)$$

trong đó ρ^o_{ASA} – khối lượng riêng của ASA rắn (g/cm^3).

Từ các kết quả nghiên cứu thực nghiệm [4] đã thu được các quan hệ biểu diễn động học quá trình tạo hạt:

$$\eta = 0,5 \cdot 10^{-10} \cdot S_C^{0,25} \cdot \varepsilon^{-0,72} \cdot \exp(-1,9 \cdot 10^6/RT) \quad , \quad [cm^3/s] \quad (9)$$

$$I_z = 62,6 \cdot S_C^{0,76} + 0,3 \cdot 10^{-6} \cdot M_0^{0,65} \cdot M_1^{0,83} \cdot \varepsilon^{0,49} \quad , \quad [1/(cm^3 \cdot s)] \quad (10)$$

trong đó: S_c – độ quá bão hòa ASA (% khối lượng), ε – cường độ khuấy trộn riêng (w/m^3), T – nhiệt độ trong thiết bị (K), R – hằng số khí lý tưởng.

Lưu ý rằng hệ số thăng giáng kích thước hạt D_r là một thông số đặc biệt có ý nghĩa trong việc phản ánh tác động tới HPB kích thước hạt (đại lượng đặc trưng cho nhóm ngẫu nhiên thứ nhất) do nguyên nhân thay đổi kích thước thiết bị từ quy mô phòng thí nghiệm đến quy mô hiện trường nên D_r đã được xác định từ các dữ liệu thu được từ hiện trường:

$$D_r = 0,03 \cdot \varepsilon^{-0,74} \cdot S_C^{0,17} \quad , \quad [cm^3 \cdot cm^3/s] \quad (11)$$

Hệ các phương trình vi phân (5)-(8) cùng với các biểu thức (9) - (11) đã mô tả quá trình kết tinh hạt ASA.

Tích phân hệ phương trình vi phân (5) – (8) với các thông số đầu vào như $C^{(0)}_{ASA}$, $v_{in}^{(0)}$, $T^{(i)}$, $S_C^{(i)}$, $\varepsilon^{(i)}$ cố định cho phép thu được các dữ liệu mô phỏng sự hoạt động của hai thiết bị kết tinh thu hồi ASA làm việc trong điều kiện tương ứng với trạng thái làm việc không bị tác động của các nhiễu ngẫu nhiên.

3.2. Xây dựng thuật toán mô phỏng các quá trình ngẫu nhiên tác động ở đầu vào của hệ thiết bị kết tinh ASA

Thực tế chỉ ra rằng các thuật toán mô phỏng các quá trình ngẫu nhiên thường rất cồng kềnh. Để giảm thiểu mức độ phức tạp đó trong nghiên cứu này các quá trình ngẫu nhiên được giả thiết là các quá trình ngẫu nhiên dừng và được xây dựng bằng cách tích hợp các giá trị hiện ảnh của một đại lượng ngẫu nhiên có phân bố đều với các thông số ngẫu nhiên đặc trưng cho quá trình ngẫu nhiên đang xét [2,3,5].

Xét một quá trình ngẫu nhiên dừng $Z_A(t)$ có kỳ vọng toán học $m_z(t)$, phương sai $\sigma_z^2(t)$, hàm

tương quan $k_z(t_i, t_j)$, trong đó t là biến thời gian. Do $Z_A(t)$ là quá trình ngẫu nhiên dừng, kỳ vọng toán học $m_z(t)$, phương sai $\sigma_z^2(t)$ không phụ thuộc thời gian, hàm tự tương quan $k_z(t_i, t_j)$ không phụ thuộc vào các giá trị của t_i, t_j mà chỉ phụ thuộc vào hiệu số $\tau = t_j - t_i$. Khi đó $m_z(t) = m_z$; $\sigma_z^2(t) = \sigma_z^2$ và $k_z(t_i, t_j) = k_z(\tau)$. Nhiệm vụ cần được giải quyết ở đây là tạo ra các giá trị t_1, t_2, \dots, t_n của quá trình ngẫu nhiên đang xét.

Biểu diễn các giá trị của quá trình NN đang xét dưới dạng [3,4]:

$$\begin{aligned} Z(t_1) &= b_1 \cdot Z_1 + b_2 \cdot Z_2 + \dots + b_n \cdot Z_n \\ Z(t_2) &= b_1 \cdot Z_2 + b_2 \cdot Z_3 + \dots + b_n \cdot Z_{n+1} \\ &..... \\ Z(t_n) &= b_1 \cdot Z_n + b_2 \cdot Z_{n+1} + \dots + b_n \cdot Z_{2n-1} \end{aligned} \quad (12)$$

trong đó $Z(t)$ là quá trình NN quy tâm $Z(t) = Z_A(t) - m_z$, Z_i là các giá trị của đại lượng ngẫu nhiên có phân bố chuẩn không tương quan đã chuẩn hóa Z có kỳ vọng toán học (gọi tắt là kỳ vọng) bằng không và phương sai $\sigma^2 = 1$.

Các hệ số b_k trong hệ (12) được tính từ hệ phương trình:

$$k_z(t_k - t_i) = (b_1 \cdot b_k + b_2 \cdot b_{k+1} + \dots + b_{n-k+1} \cdot b_n) \cdot \sigma^2 \quad (13)$$

Với các giá trị $Z(t_i)$ thu được có thể xác định các hiện ảnh $Z_A(t_i)$ tương ứng theo biểu thức:

$$Z_A(t_i) = Z(t_i) \cdot \sigma_z + m_z \quad (14)$$

Sử dụng các bộ phát dãy số ngẫu nhiên có phân bố đều trong khoảng $[0,1]$ để dàng thu được các giá trị ngẫu nhiên nằm trong khoảng $[0,1]$. Dãy số ngẫu nhiên này có kỳ vọng bằng $1/2$ và có phương sai bằng $1/12$. Thiết lập đại lượng ngẫu nhiên P có các giá trị p_j là tổng của

12 giá trị lấy từ dãy số ngẫu nhiên phân bố đều trong khoảng $[0,1]$. Tính toán các giá trị kỳ vọng m_p và phương sai σ_p thu được:

$$m_p = 6 \quad \text{và} \quad \sigma_p = 1 \quad (15)$$

Đại lượng ngẫu nhiên Z được xây dựng bằng cách chuẩn hóa đại lượng ngẫu nhiên P theo công thức:

$$Z_j = (p_j - m_p) / \sigma_p = p_j - 6 \quad (16)$$

Như vậy quá trình mô phỏng tạo ra các hiện ảnh $Z_A(t_i)$ của quá trình ngẫu nhiên $Z_A(t)$ được thực hiện như sau:

- 1) - Từ các giá trị hiện ảnh thực của $Z_A(t)$ xác định kỳ vọng m_z , phương sai σ_z , các giá trị của hàm tương quan $k_z(t_k - t_i)$.
- 2) - Xác định các hệ số b_k bằng cách giải hệ phương trình (13).
- 3) - Xác định các giá trị của đại lượng ngẫu nhiên Z từ các giá trị của dãy số ngẫu nhiên phân bố đều trong khoảng $[0,1]$ và đại lượng ngẫu nhiên P theo công thức (16).
- 4) - Tính toán xác định các giá trị mô phỏng $Z_A(t_i)$ từ các giá trị của đại lượng ngẫu nhiên Z nhờ hệ phương trình (12) và biểu thức (14).

Thuật toán trên không quá phức tạp, rất thuận lợi khi áp dụng để truy xuất các hiện ảnh của các quá trình ngẫu nhiên dừng thường gặp trong các quá trình xử lý chất thải. Đối với các tác động ngẫu nhiên không dừng (kỳ vọng và phương sai đều biến thiên theo thời gian) việc mô phỏng trở nên phức tạp hơn nhiều. Tuy nhiên với thuật toán đã được trình bày có thể tạo ra một tập hợp các hiện ảnh của các quá trình ngẫu nhiên dừng có kỳ vọng, phương sai,

hàm tự tương quan khác nhau. Tập các hiện ảnh thu được cũng có giá trị biểu đạt quá trình ngẫu nhiên không dừng tác động lên hệ thống xử lý chất thải đang được nghiên cứu.

Các kết quả nhận dạng các hệ số b_k và tính toán các giá trị hiện ảnh của các quá trình ngẫu nhiên suất lượng dòng ASA ở đầu vào, độ quá bão hòa trong thiết bị kết tinh thứ nhất được trình bày trong mục 3.3 dưới đây.

3.3. Mô phỏng quá trình kết tủa ASA

Quá trình kết tinh ASA được khảo sát trong điều kiện các thông số công nghệ chịu tác động của các nhiễu ngẫu nhiên. Hai thông số được

lựa chọn trình bày trong nghiên cứu này là suất lượng dòng trên đầu vào và độ quá bão hòa ở thiết bị kết tinh thứ nhất (các đại lượng $v_{in}^{(1)}$, $S_c^{(1)}$ tương ứng). Hai đại lượng này được xét như hai quá trình ngẫu nhiên có các đặc trưng thống kê như hàm trung bình m_v, m_s ; phương sai σ_v, σ_s ; hàm tự tương quan $k_v(\tau), k_s(\tau)$ tương ứng. Với các đặc trưng thống kê này quá trình ngẫu nhiên $v_{in}^{(1)}, S_c^{(1)}$ được nhận dạng theo thuật toán đã trình bày trong mục 3.2. Các thông số b_k được tính toán từ hệ phương trình (13) trên cơ sở các giá trị $k_v(\tau), k_s(\tau)$ được trình bày trong bảng 1.

Bảng 1. Các hệ số b_k trong thuật toán mô phỏng các quá trình ngẫu nhiên $v_{in}^{(1)}, S_c^{(1)}$

τ (phút)	$k_v(\tau)$	$b_{k,v}$	$k_s(\tau)$	$b_{k,s}$
0	0.19	0.192	0.95	0.47
10	0.16	0.16	0.74	0.3
20	0.13	0.116	0.66	0.33
30	0.12	0.11	0.58	0.31
40	0.11	0.11	0.51	0.26
50	0.1	0.11	0.45	0.24
60	0.09	0.114	0.4	0.22
70	0.08	0.118	0.35	0.26
80	0.07	0.14	0.3	0.29
90	0.06	0.2	0.15	0.35

Các thông số đặc trưng cho chất lượng kết tinh tách ASA là nồng độ ASA trong dòng nước thải trên đầu ra ($C_{ASA}^{(2)}$) và kích thước trung bình của các hạt ASA ($r_{tb}^{(2)} = M_1^{(2)}/M_0^{(2)}$) sau thiết bị kết tinh thứ hai cũng là các quá trình ngẫu nhiên với các đặc trưng thống kê tương tự.

Mô phỏng quá trình kết tinh ASA trong điều kiện các thông số công nghệ $v_{in}^{(1)}, S_c^{(1)}$ chịu tác động của các nhiễu ngẫu nhiên được thực hiện theo thuật toán lập sau đây:

1)- Tại thời điểm t_1 , trước khi bắt đầu tích phân hệ phương trình (5) – (8) tiến hành tính toán giá trị đầu tiên của các quá trình ngẫu nhiên $v_{in}^{(1)}(t_1)$ – suất lượng dòng vào và $S_c^{(1)}(t_1)$

- độ quá bão hòa theo thuật toán mô phỏng đã trình bày trong mục 3.2 và theo các dữ liệu trình bày trong bảng 1.

2)- Với giá trị $v_{in}^{(1)}(t_1)$, $S_c^{(1)}(t_1)$ và các điều kiện đầu đã cho, thực hiện tích phân hệ phương trình vi phân (5) – (8) bằng phương pháp Runge – Kutta. Kết quả của quá trình tích phân cho phép thu được các giá trị của các thông số $M_0^{(2)}$, $M_1^{(2)}$, $M_2^{(2)}$, $C_{ASA}^{(2)}$... tại thời điểm t_2 .

3)- Tại thời điểm t_2 tiếp tục tính các giá trị mới của các quá trình ngẫu nhiên $v_{in}^{(1)}(t_2)$, $S_c^{(1)}(t_2)$ tức là thực hiện lặp lại bước 1 cho thời điểm t_2 .

4)- Tiếp tục tích phân hệ phương trình vi phân (5) – (8) để truy xuất các giá trị của các thông số $M_0^{(2)}$, $M_1^{(2)}$, $M_2^{(2)}$, $C_{ASA}^{(2)}$... tại thời điểm t_3 (Lặp lại bước 2 cho thời điểm t_3).

Quá trình lặp được thực hiện với số lần lặp tùy ý. Các dữ liệu $M_0^{(2)}$, $M_1^{(2)}$, $M_2^{(2)}$, $C_{ASA}^{(2)}$... thu được sau khi dừng quá trình lặp được xử lý thống kê để xác định các đặc trưng thống kê của các đại lượng ngẫu nhiên trên đầu ra: giá trị trung bình, phương sai

Hai thiết bị kết tinh ASA có dung tích làm việc 5 m^3 . Các giá trị trung bình của suất lượng dòng ASA ở đầu vào $m v_{in}^{(1)}$ nằm trong khoảng từ $1,05 \text{ m}^3\text{h}^{-1}$ đến $2,25 \text{ m}^3\text{h}^{-1}$. Phương sai

$\sigma^2 v_{in}^{(1)}$ được khảo sát trong giới hạn [0 - 9.10^2]. Tương tự, các giá trị trung bình của độ quá bão hòa trong thiết bị kết tinh thứ nhất $m^* s_c^{(1)}$ và phương sai $\sigma^2 s_c^{(1)}$ được khảo sát trong các giới hạn [10,6 – 18,6 (% kl)] , [0 – 3,0] tương ứng.

Thực hiện mô phỏng theo thuật toán trình bày ở phần trên và tính toán được các giá trị trung bình đối với nồng độ ASA trong dòng thải ($m_{CASA}^{(2)}$), kích thước các hạt ASA rắn (mr_{tb}) sau ly tâm (bảng 2 và bảng 3).

Từ các kết quả mô phỏng (được trình bày trong bảng 2 và bảng 3) có thể đi tới các nhận định sau:

1. Khi độ quá bão hòa ASA trong pha lỏng $S_c^{(1)}$ ở thiết bị thứ nhất dao động ngẫu nhiên (với phương sai $\sigma_s > 0$) giá trị kích thước trung bình của các hạt ASA trong dòng ra (thải) sau thiết bị kết tinh thứ hai bị giảm đi còn nồng độ ASA trong dòng thải lại tăng lên (bảng 3) theo mức độ tăng của biên độ dao động giá trị độ quá bão hòa trong pha nước thải (theo mức độ tăng σ_s).

Bảng 2. Ảnh hưởng của biến động ngẫu nhiên suất lượng dòng vào đối với hiệu quả kết tinh

Phương sai suất lượng dòng vào $\sigma^2 v_{in}^{(1)}$	Giá trị trung bình tại đầu ra	Giá trị trung bình của suất lượng dòng vào $m v_{in}^{(1)}$ (m^3h^{-1})				
		1,05	1,35	1,65	1,95	2,25
0	$m_{CASA}^{(2)}$ (% kl)	2,63	4,34	6,0	7,5	8,21
	mr_{tb} (mm)	0,24	0,21	0,19	0,16	0,11
$2,25.10^{-2}$	$m_{CASA}^{(2)}$ (% kl)	3,16	5,4	7,24	8,68	9,61

	mr_{tb} (mm)	0,20	0,19	0,16	0,13	0,09
9.10 ⁻²	m _{CASA} ⁽²⁾ (% kl)	3,82	6,45	8,55	10,13	11,10
	mr_{tb} (mm)	0,18	0,16	0,15	0,11	0,07

Bảng 3. Ảnh hưởng của biến động ngẫu nhiên độ quá bão hòa đối với hiệu quả kết tinh

Phương sai độ quá bão hòa $\sigma^2 S_c^{(1)}$	Giá trị trung bình tại đầu ra	Giá trị trung bình của độ quá bão hòa trong thiết bị kết tinh thứ nhất mS _c ⁽¹⁾ (% kl)				
		10,6	12,6	14,6	16,6	18,6
0	m _{CASA} ⁽²⁾ (% kl)	13,02	8,75	6,0	5,0	4,75
	mr_{tb} (mm)	0,26	0,22	0,19	0,17	0,15
0,7	m _{CASA} ⁽²⁾ (% kl)	14,7	10,75	8,0	7,15	6,5
	mr_{tb} (mm)	0,25	0,21	0,17	0,15	0,13
3,0	m _{CASA} ⁽²⁾ (% kl)	16,05	12,15	10,0	8,75	8,3
	mr_{tb} (mm)	0,23	0,18	0,16	0,13	0,11

Khi phương sai độ quá bão hòa $\sigma^2 S_c^{(1)} = 3,0$ giá trị kích thước trung bình **mr_{tb}⁽²⁾** trong dòng ra giảm đi khoảng 11.5 % (ứng với giá trị trung bình ms_c⁽¹⁾ = 10,6 % kl) và 26,6 % (ứng với ms_c⁽¹⁾ = 18,6 % kl) còn nồng độ ASA m_{CASA}⁽²⁾ trong dòng thải lại tăng lên khoảng 25 % (ứng với ms_c⁽¹⁾ = 10,6 % kl) và 74,7 % (ứng với ms_c⁽¹⁾ = 18,6 % kl).

2. Tương tự như vậy, mức độ biến động ngẫu nhiên của suất lượng dòng vào càng lớn (phương sai σ_v , càng lớn) thì giá trị kích thước trung bình của các hạt ASA trong dòng thải sau thiết bị kết tinh thứ hai cũng giảm đi và nồng độ ASA trong dòng thải cũng tăng lên. Khi phương sai suất lượng dòng vào $\sigma^2 v_{in}^{(1)} = 9.10^{-2}$ giá trị kích thước trung bình **mr_{tb}⁽²⁾** trong dòng ra giảm đi khoảng 25 % (ứng với giá trị trung bình mv_{in}⁽¹⁾ = 1,05 m³h⁻¹) và 36,3 % (ứng

với mv_{in}⁽¹⁾ = 2,25 m³h⁻¹) còn nồng độ ASA m_{CASA}⁽²⁾ trong dòng thải lại tăng lên khoảng 35 % (ứng với mv_{in}⁽¹⁾ = 2.25 m³h⁻¹) và 45,2 % (ứng với mv_{in}⁽¹⁾ = 1,05 m³h⁻¹).

Những tác động nêu trên đều dẫn đến sự suy giảm hiệu quả kết tinh thu hồi ASA. Nguyên nhân gây ra hiện tượng suy giảm này chính là các yếu tố ngẫu nhiên đang xét đã làm biến động thời gian lưu của các phần tử pha lỏng cùng với sự biến động độ quá bão hòa làm thay đổi tương quan giữa tốc độ tạo mầm (sinh ra các hạt mới), tốc độ lớn lên của các hạt ASA theo chiều hướng làm cho tỷ lệ pha rắn giảm đi cùng với việc tạo ra phân bố hạt lệch về phía có kích thước nhỏ hơn. Hiệu ứng không mong muốn đó kéo theo lượng ASA ra theo dòng đầu ra của thiết bị kết tinh tăng lên và các hạt ASA có kích thước nhỏ (vốn dễ bị hòa tan hơn) góp phần làm tăng lượng ASA trong thành phần nước thải sau công đoạn rửa sản phẩm kết tinh.

Từ kinh nghiệm thực tế cũng như từ sự biểu đạt trong mô hình toán (5) – (8) có thể thấy rằng còn hàng loạt các thông số khác (như nhiệt độ T, cường độ khuấy trộn riêng ε , ...) nếu bị tác động của các nhiễu ngẫu nhiên cũng sẽ ảnh hưởng xấu tới hiệu quả kết tinh thu hồi ASA. Bằng phương pháp đã trình bày trong nghiên cứu này có thể mô phỏng đánh giá mức độ tác động và ảnh hưởng của các yếu tố ngẫu nhiên. Trên cơ sở đó có thể xác định các giải pháp phù hợp cho phép nâng cao hiệu quả của hệ thống kết tinh thu hồi pha rắn đa phân tán nhờ ngăn chặn một cách hợp lý các tác động ngẫu nhiên có ảnh hưởng xấu tới hoạt động của hệ thống.

4. KẾT LUẬN

Hệ xử lý thu hồi ASA bằng con đường tạo ra pha kết tinh rắn đa phân tán là một hệ thống phức tạp. Giải pháp hữu hiệu để thiết lập được mô tả về mặt toán học của hệ dị thể đa phân tán này là khai thác toàn diện phương trình cân bằng tính chất quần thể đa phân tán để từ đó truy xuất phương trình biến thiên hàm phân bố hạt theo kích thước, các phương trình vi phân theo biến thời gian đối với các moment của hàm phân bố hạt theo kích thước, hàm nồng độ các cấu tử đại diện, hàm nhiệt độ, ...

Kết hợp đồng thời hệ các phương trình thu được với thuật toán mô phỏng xác định các giá

trị hiện ảnh của các quá trình ngẫu nhiên tác động trên đầu vào của hệ thiết bị kết tinh thu hồi cho phép mô phỏng và đánh giá hoạt động của hệ thống gần với những điều kiện thực của hiện trường hơn so với những mô phỏng dựa trên việc chấp nhận các đại lượng đầu vào là các đại lượng thực định (không ngẫu nhiên).

Với những nghiên cứu trên hệ thiết bị kết tinh ASA đã chứng tỏ các dao động mang đặc trưng ngẫu nhiên của các thông số suất lượng dòng đầu vào và độ quá bão hòa của ASA đã làm giảm hiệu quả xử lý tách ASA ra khỏi pha lỏng (nồng độ ASA trong nước thải đầu ra tăng lên, kích thước trung bình các hạt ASA giảm đi dẫn đến lượng ASA thoát ra theo dòng nước rửa cũng tăng). Biên độ dao động của các dao động ngẫu nhiên càng lớn hiệu quả thu hồi càng giảm mặc dù các giá trị trung bình $m_{V_{in}}$, m_{S_c} ... vẫn được duy trì bằng các giá trị quy định cho chế độ vận hành hệ thống.

Các kết quả mô phỏng thu được trên cơ sở thuật toán trình bày trong báo cáo này là cơ sở quan trọng cho phép xác định các giải pháp ngăn chặn một cách hợp lý các tác động nhiễu loạn, góp phần nâng cao hiệu quả của các hệ thống thiết bị công nghệ hóa học, đặc biệt là các hệ thống xử lý với các quá trình dị thể đa phân tán.

**STUDYING THE INFLUENCE OF STOCHASTIC DISTURBANCES ON THE
CRYSTALLIZATION OF AMIDOSULFONIC ACID**

Le Xuan Hai

University of Technology, VNU-HCM

ABSTRACT: *This paper introduces a method that simulates the negative impact that the stochastic disturbances may have on the desired operation for the reactors in chemical engineering. The results obtained in our research, with emphasis on the precipitation of poly-dispersive heterogeneous particles from liquid phase containing amidosulfonic acid, indicate that chaotic changes of input parameters such as volumetric flow rate $V_{in}^{(1)}$, oversaturation S_c , ... caused to seriously reduce effect of the crystallization process. Therefore suppressing the influence of stochastic disturbances on a process is the important objective for an equipment system operating with poly-dispersive heterogeneous phases.*

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. V.V. Kafarov , I.N. Dorokhov , Le Xuan Hai. *Equation of the balance of ensemble properties for the description of poly-dispersive system with distribution of particles according to the state coordinates.* Reports for USSR's Academy of Science, v.289, N° 1, p. 163-168. (1986).
- [2]. A.N. Shiryaev. *Probability.* Springer-Verlag, New York, (1996), tr. 623
- [3]. H. Cramer, M.R. Leadbetter. *Stationary and Related Stochastic Processes.* John Wiley, New York – London –Sydney, (1967), tr. 224.
- [4]. Le Xuan Hai, *The Doctor of Science Thesis – The principles of mathematical modeling for heterogeneous systems with poly-dispersive structure,* MCTI - Moscow (1986), tr. 382
- [5]. Nguyễn Duy Tiến, Đặng Hùng Thắng. *Các mô hình xác suất và ứng dụng – Phần II: Quá trình dừng và ứng dụng,* NXB ĐHQG Hà nội, (2001), tr. 120.