

## TIẾP CẬN HỆ THỐNG ĐỐT RÁC THẢI RẮN TRONG THIẾT BỊ KIỂU CỘT NHỎI

Lê Xuân Hải <sup>(1)</sup>, Lê Anh Kiên <sup>(2)</sup>

(1) Trường Đại học Bách khoa, ĐHQG - HCM

(2) Đại học Sheffield, Anh

### 1. GIỚI THIỆU

Nghiên cứu quá trình đốt nhằm xử lý rác thải rắn như một nhóm vật thể gây ô nhiễm môi trường đồng thời nhằm tận thu nhiệt năng khi xem rác thải rắn như một loại nhiên liệu có khả năng tái tạo đã trở thành mối quan tâm thực sự ở nhiều quốc gia. Các nghiên cứu này đã và đang tìm cách làm sáng tỏ các hiện tượng nhiệt phân, cháy cung cấp năng lượng của nhiều loại rác thải rắn có các thuộc tính khác nhau ở những điều kiện nhất định.

Trên cơ sở khẳng định rằng **tiếp cận hệ thống** là một trong những phương pháp luận quan trọng nhất được sử dụng trong việc nhận thức thiên nhiên và xã hội [1, 15] bài báo này trình bày sự vận dụng một số tác vụ tiếp cận hệ thống để nghiên cứu quá trình đốt nhiệt phân rác thải rắn trong thiết bị đốt kiểu cột nhỏi.

### 2. TIẾP CẬN HỆ THỐNG CÁC ĐỐI TƯỢNG CÔNG NGHỆ

Phương pháp luận tiếp cận hệ thống được xây dựng trên nguyên tắc cơ bản: mọi đối tượng nghiên cứu đều là các hệ thống, trong đó hệ thống được thừa nhận như một khái niệm khởi thủy không định nghĩa. Tuy nhiên, một cách đơn giản nhưng khái quát và khá chặt chẽ có thể hiểu hệ thống bởi mệnh đề sau đây [1,15]:

Hệ thống S nằm trong môi trường E là tập hợp các phần tử si tương tác với nhau tạo thành cấu trúc nội tại của S và tương tác với E tạo thành quan hệ với môi trường bên ngoài.

Như vậy mỗi đối tượng nghiên cứu đều phải được nhìn nhận như một tập hợp các phần tử, các quan hệ với đầy đủ các thuộc tính cơ bản của hệ thống như thuộc tính vận động, thuộc tính phân hoạch và tích hợp được, thuộc tính lưỡng nguyên, ...

Tiếp cận hệ thống được đặc trưng bởi sự triển khai quá trình nghiên cứu hoặc thao tác trên các đối tượng theo một lược đồ logic liên kết chặt chẽ các khối công việc : a) phát hiện các vấn đề cần giải quyết ; b) xác định các mục tiêu cần đạt được ; c) nhận dạng các rào cản ; d) xác định các tác vụ tiếp cận hệ thống cần thực hiện ; e) thực hiện các tác vụ đã được xác định ; g) thẩm định kết quả thực hiện ; h) hiệu chỉnh nội dung các khối công việc nếu kết quả thực hiện không đạt yêu cầu. Với lược đồ logic này kết luận cuối cùng luôn mang tính khách quan: hoặc khẳng định tiếp cận hệ thống đã thành công cho phép giải quyết hiệu quả các vấn đề đã đặt ra, hoặc khẳng định vấn đề đặt ra đã không giải quyết được và đòi hỏi phải có sự nhìn nhận lại một cách sâu sắc hơn, chuẩn xác hơn.

Trong các khối công việc d), e) có ba nhóm tác vụ mang tính chiến lược bao gồm: phân tích hệ thống, tổng hợp hệ thống và điều khiển hệ thống. Các tác vụ này luôn luôn gắn kết với các phương tiện biểu đạt hệ thống như các mô hình ngữ văn, mô hình đồ họa, mô hình vật thể, mô hình toán, mô hình số hóa và cũng không tách khỏi mục tiêu thường trực của tiếp cận hệ thống: tối ưu hóa. Phân nghiên cứu quá trình đốt nhiệt phân rác thải rắn được trình bày dưới đây là kết quả thực hiện một số nội dung cơ bản của tác vụ phân tích hệ thống áp dụng cho thiết bị đốt kiểu cột nhỏi.

### 3. ÁP DỤNG PHƯƠNG PHÁP PHÂN TÍCH HỆ THỐNG NGHE CỨU QUÁ TRÌNH CHÁY CỦA TẬP HỢP HẠT RÁC THẢI RẮN TRONG THIẾT BỊ ĐỐT KIỂU CỘT NHỒI

#### 3.1. Phân hoạch và tích hợp hệ thống

Đối tượng công nghệ được nghiên cứu là thiết bị đốt nhiệt phân hai cấp kiểu vĩ lò tĩnh hoặc di chuyển. Dựa trên nguyên tắc tất cả các hệ thống đều có thể phân hoạch thành nhiều phần nhỏ, mỗi phần nhỏ sau khi phân hoạch cũng là một hệ thống, không gian thiết bị (lớp 5) được phân hoạch thành các cột nhồi hình trụ (hoặc lăng trụ) có hai vùng cơ bản là vùng sơ cấp (còn gọi là buồng sơ cấp) và vùng thứ cấp (buồng thứ cấp). Các phần tử rác thải rắn (pha phân tán) được nhồi thành các cột nhồi trong khoảng không gian của vùng sơ cấp. Khí cấp vào để đốt, sản phẩm khí nhiệt phân, khí cháy (pha liên tục) chuyển động hướng theo trục cột nhồi từ dưới lên trên. Tiến hành phân hoạch vùng sơ cấp theo không gian thành những vùng nhỏ hơn có thể tích hữu hạn (control volume hoặc finite volume) trong đó chứa đồng thời cả pha liên tục và pha phân tán. Phần không gian này là một hệ thống mới được gọi là quần thể các hạt đa phân tán trong môi trường liên tục (lớp 4).

Tiếp tục phân hoạch quần thể các hạt đa phân tán thành các phần nhỏ hơn. Chọn một phần nhỏ mới tạo thành chỉ gồm một phần tử rắn duy nhất và phần không gian bao quanh hạt rắn. Đến đây hệ trở thành hệ dị thể một hạt (lớp 3). Trong hệ dị thể một hạt này xét phân hoạch nhỏ hơn chỉ gồm hoàn toàn pha rắn hoặc hoàn toàn pha khí sẽ thu được hệ thống mới là hệ đồng thể vi mô (lớp 2). Tiếp tục phân hoạch hệ đồng thể vi mô này sẽ thu được các hệ có kích cỡ các phân tử hoặc cụm phân tử (lớp 1).

Xuất phát từ lớp thứ nhất, thực hiện tích hợp các hệ thống sẽ thu được các hệ thống ở lớp hai, tương tự sẽ thu được hệ thống ở lớp ba, lớp bốn, và lớp năm. Các hệ thống từ lớp một đến lớp bốn được xếp vào hệ hóa lý. Lớp năm (là hệ đơn nguyên thiết bị) được xem là hệ cơ sở cho việc hình thành lớp đầu tiên của một hệ thống mới ở cấp lớn hơn. Tích hợp tiếp tục sẽ tạo ra tổ hợp các thiết bị hoặc cụm thiết bị xử lý chất thải rắn hoặc nhà máy xử lý chất thải rắn bằng phương pháp đốt nhiệt phân kết hợp phát điện.

#### 3.2. Xây dựng mô hình toán học cho quá trình đốt chất thải rắn trong thiết bị dạng cột nhồi

##### 3.2.1 Phân tích định tính cấu trúc hệ thống

Ở lớp thứ ba của cấu trúc hệ thống cột nhồi ( hệ dị thể một hạt  $S^{3,i}$  ) pha liên tục  $S^{3,i}_s$  bao quanh một phần tử rác thải rắn (trong trường hợp này được coi là một hạt nhiên liệu rắn hay một hạt vật liệu rắn - pha phân tán  $S^{3,i}_g$  ). Nhiệt lượng  $Q$  từ quá trình cháy của lớp vật liệu bên trên truyền vận tới các pha  $S^{3,i}_g$  ,  $S^{3,i}_s$  làm cho nội năng  $U_g$  ,  $U_s$  của pha khí  $S^{3,i}_g$  và hạt vật liệu rắn  $S^{3,i}_s$  tăng lên. Lượng nhiệt  $Q$  truyền vận vào hệ  $S^{3,i}$  phụ thuộc vào cường độ năng lượng phát xạ  $I_s$  của lớp vật liệu cháy bên trên, khả năng hấp thụ bức xạ  $e_s$  của vật chất trong pha liên tục và pha phân tán.

Trong quá trình tăng nội năng của hệ, các phân tử nước thuộc cấu trúc của  $S^{3,i}_s$  bắt đầu di chuyển từ bên trong ra bên ngoài bề mặt, khuếch tán qua lớp phim khí ở bề mặt phân chia pha và đi vào pha liên tục  $S^{3,i}_g$  với động lực khuếch tán hơi ẩm là độ chênh lệch áp suất hơi bão hòa trên bề mặt  $\Delta P_{H_2O}$ . Tốc độ khuếch tán còn phụ thuộc vào cấu trúc vật liệu, kích thước hình học cũng như diện tích bề mặt của pha phân tán. Các phân tử khí trong pha liên tục di chuyển ra khỏi hệ  $S^{3,i}$  đang xét và đi vào hệ  $S^{3,i+1}$  liền kề.

Đồng thời với quá trình thoát hơi ẩm tự do và hơi ẩm liên kết ra khỏi bề mặt hạt nhiên liệu rắn, các nguyên tử C, H, O,... tại các nút mạng tinh thể trong cấu tạo của vật liệu sẽ trở nên linh động hơn, làm cho các liên kết giữa carbon và carbon, carbon và hydro, carbon và ôxy hoặc các gốc tự do khác nếu có trở nên yếu đi. Khi hạt chất thải rắn nhận một năng lượng đủ lớn, các liên kết trong phần tử hạt rắn sẽ bị đứt gãy, dẫn đến kết quả sẽ tạo thành các chất hữu cơ, mà chủ yếu là các hydrocarbon và aldehyt. Lượng và thành phần chất hữu cơ được tạo thành tùy thuộc vào

hiệt độ và thành phần cấu tạo bên trong của hạt vật liệu rắn trong hệ  $S^{3,i}$ . Các chất hữu cơ được tạo thành sẽ thoát ra khỏi hạt nhiên liệu rắn, đi vào trong pha khí.

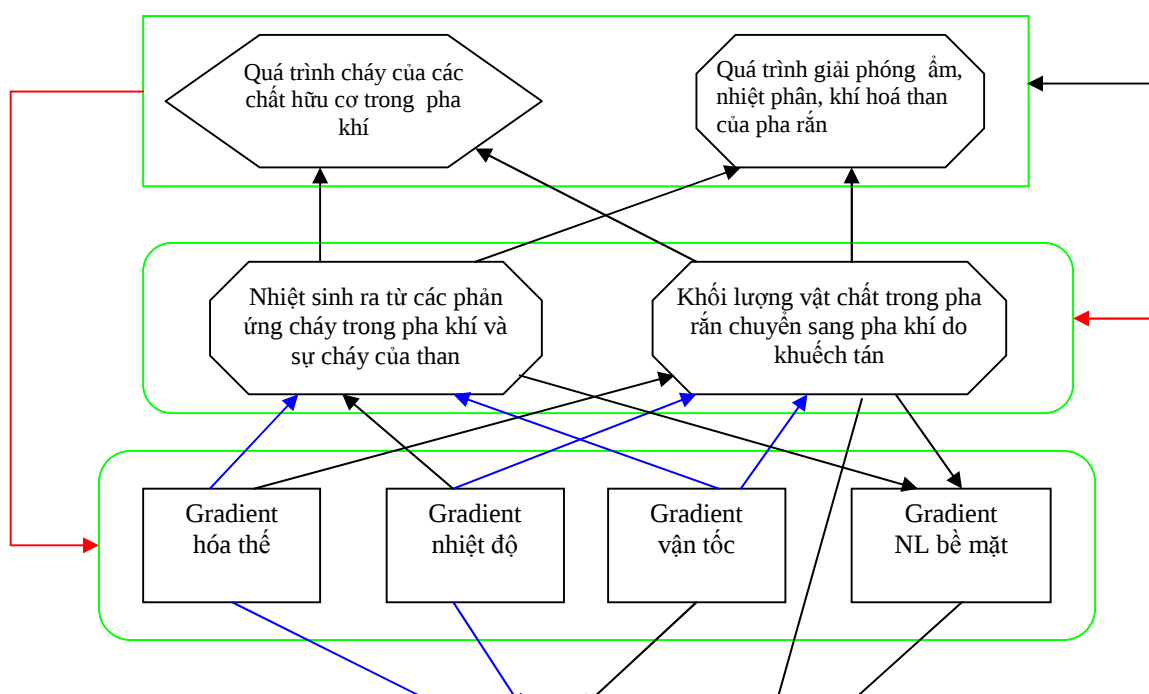
Khi các liên kết ban đầu của vật liệu bị đứt gãy, kích thước hạt nhiên liệu rắn  $S^{3,i}$  sẽ giảm dần đồng thời các liên kết mới cũng được tạo thành, tạo ra sản phẩm mới ở thể rắn là bitum và than. Tốc độ tạo thành than và bitum cũng phụ thuộc vào nhiệt độ và thành phần cấu tạo của vật liệu rắn.

Lúc này, ôxy tự do từ trong pha khí bao quanh bên ngoài hạt rắn khuếch tán đến bề mặt của hạt vật liệu rắn, sẽ tiếp xúc với các nguyên tử carbon của phần tử than, bitum và tạo ra phản ứng cháy (phản ứng ôxy hoá khử), sinh ra năng lượng. Tốc độ cháy của than được kiểm soát bởi sự khuếch tán của lớp phim khí hỗn hợp và tốc độ phản ứng.

Tương ứng với các quá trình xảy ra trong pha rắn, trong pha khí bao quanh một hạt vật liệu rắn cũng xảy ra các quá trình tương ứng. Khi hạt vật liệu rắn giải phóng hơi ẩm, phần tử hơi nước khuếch tán từ trong hạt vật liệu ra bên ngoài pha khí bao quanh làm cho mật độ của phần tử hơi nước tăng lên tại một thời điểm tức thời. Phần tử hơi ẩm ngay lập tức bị lôi cuốn bởi pha khí đi từ dưới lên làm giảm mật độ hơi ẩm trong vùng thể tích hữu hạn bao quanh hạt rắn. Khi các chất hữu cơ trong pha rắn được tạo thành và khuếch tán ra khỏi lớp bề mặt của hạt vật liệu rắn, các phần tử chất hữu cơ sẽ tiếp xúc với ôxy và bắt cháy, sinh năng lượng. Sản phẩm cháy và các chất hữu cơ bay hơi chưa cháy, ôxy và các phần tử khí khác sẽ chuyển động sang những thể tích hữu hạn khác ở bên cạnh và bên trên. Năng lượng sinh ra từ các phản ứng cháy sẽ trao đổi nhiệt trực tiếp với pha khí và truyền nhiệt ngược lại đến pha rắn bằng bức xạ. Phân tích định tính cấu trúc ở lớp ba được thể hiện qua mô hình đồ họa trong hình 1.

Lớp thứ tư trong cấu trúc phân tầng quan tâm đến phần thể tích hữu hạn của pha liên tục chứa một quần thể các hạt đa phân tán ( hệ  $S^{4,i}$ ). Mô tả quan trọng nhất đối với hệ đa phân tán ở lớp bốn sẽ là phương trình cân bằng tính chất của quần thể hạt đa phân tán (thường được gọi tắt là phương trình cân bằng hạt) phản ánh sự biến đổi hàm mật độ phân bố hạt trong quá trình cháy.

Như vậy sự phân tích định tính quá trình đốt nhiệt phân trong cột nhồi ở các phân hoạch ứng với các hệ  $S^{4,i}$  và  $S^{3,i}$  đã định danh các đại lượng, các quan hệ giữa các đại lượng cần phải truy xuất để kiến tạo nên mô tả toán học của đối tượng đang xét.



**Hình 1.** Phân tích định tính cấu trúc quá trình đốt nhiệt phân một phần tử rắn

### 3.2.2 Định dạng các phương trình tạo thành cấu trúc toán học của mô hình

Kết quả phân tích định tính cấu trúc hệ  $S^{4,i}$  cho thấy các quan hệ toán học giữa các đại lượng đặc trưng cho quá trình đốt nhiệt phân sẽ được xây dựng trên cơ sở phương trình cân bằng tính chất quần thể hạt đa phân tán. Ở dạng tổng quát phương trình này có dạng [1]:

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

trong đó  $f(X,t)$  là hàm mật độ phân bố các hạt đa phân tán theo các thông số xi đặc trưng cho tính chất của hạt.

Với hệ thiết bị cột nhồi đang nghiên cứu ( $n = 4$ ;  $x_1, x_2, x_3$  là ba tọa độ không gian  $(x,y,z)$ ;  $x_4$  là khối lượng pi của một phần tử rác thải) sự phân bố  $f(ri, t)$  được biểu đạt cùng với các giả thiết sau đây: 1)- trong  $S^{4,i}$  không có sự tạo thành hoặc biến mất đột biến các phần tử đa phân tán (dẫn đến hàm  $q_d = 0$ ); 2)- trong  $S^{4,i}$  không có sự khuếch tán phân bố hạt theo pi (dẫn đến hệ số khuếch tán mở rộng  $D_{ri} = 0$ ); 3) - tồn tại một cơ chế không tạo ra các dòng hạt đi vào và đi ra khỏi không gian giới hạn hệ  $S^{4,i}$  dẫn đến triệt tiêu các thành phần có chỉ số  $i = 1, 2, 3$  thuộc số hạng thứ hai trong vế trái của phương trình (1).

### Các phương trình bảo toàn vật chất

Bằng cách biến đổi về các moment của hàm mật độ phân bố  $f(ri, t)$  phương trình (1) sẽ trở thành phương trình bảo toàn vật chất pha phân tán:

$$\frac{\partial(\epsilon_s \rho_s)}{\partial t} = -S_m \quad (2); \quad S_m = \sum_{\tau=1}^i \beta_{(s,r)} \cdot M \cdot \tilde{I}_{(s,r)} \quad (3)$$

trong đó:  $\rho_s$  là khối lượng riêng của pha phân tán trong thể tích  $\Omega$  của  $S^{4,i}$ ;  $1-\epsilon_s$  là độ xốp

của khối nguyên liệu;  $S_m = \sum_{\tau=1}^i \beta_{(s,r)} \cdot M \cdot \tilde{I}_{(s,r)}$  là tốc độ tiêu huỷ vật chất của pha rắn do các phản ứng hoá học xảy ra trong thể tích  $\Omega$  của hệ  $S^{4,i}$ .

Với pha liên tục phương trình bảo toàn vật chất suy từ (1) có dạng:

$$\frac{\partial(1-\varepsilon_s)\rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot ((1-\varepsilon_s)\rho_f \mathbf{v}_f) = S_m \quad (4)$$

trong đó :  $\mathbf{v}_f$  là vận tốc bề mặt của pha liên tục;  $\rho_f$  là khối lượng riêng của pha liên tục trong thể tích hữu hạn  $\Omega$ .

Vận dụng phương trình (1) cho các cấu tử có trong thành phần pha khí sẽ truy xuất được phương trình bảo toàn cấu tử cho pha liên tục :

$$\frac{\partial((1-\varepsilon_s)\rho_f Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot ((1-\varepsilon_s)\rho_f \mathbf{v}_f Y_i) = \nabla \cdot (D_{a,eff} (1-\varepsilon_s)\rho_f \nabla Y_i) + S_i \quad (5)$$

“i” đại diện các cấu tử ( $i = \text{CO}, \text{CO}_2, \text{H}_2, \text{CH}_4, \text{C}_x\text{H}_y, \text{H}_2\text{O}, \text{O}_2$ , khí nhựa đường);  $D_i$  là hệ số khuếch tán của phân tử “i” [14];  $S_i$  là thành phần đặc trưng cho động học sinh hoặc tiêu huỷ cấu tử “i” trong pha liên tục;  $D_{a,eff}$  là hệ số khuếch tán rối [12, 13],

$$D_{a, eff} = D_i + 0.5 \nu_{fdp} \quad (6)$$

#### **Phương trình bảo toàn moment**

Phương trình bảo toàn moment trong pha liên tục có dạng :

$$\frac{\partial}{\partial t} (1-\varepsilon_s)\rho_f \mathbf{v}_f + \nabla \cdot ((1-\varepsilon_s)\rho_f \mathbf{v}_f \mathbf{v}_f) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_f + \sum (1-\varepsilon_s)\rho_f \mathbf{g} \quad (7)$$

với tổng các lực bề mặt trên thể tích hữu hạn theo phương x, y, z:

$$\frac{\partial(-p + \tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} ; \quad \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial(-p + \tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} ; \quad \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial(-p + \tau_{zz})}{\partial z}$$

#### **Các phương trình bảo toàn năng lượng**

Từ phương trình (1) viết cho hàm mật độ phân bố theo các thông số đặc trưng cho năng lượng của các pha tiếp tục truy xuất được phương trình cân bằng nhiệt của pha phân tán :

$$\varepsilon_s \rho_s C_{p,s} \frac{\partial T_s}{\partial t} = \nabla \cdot (k_s \nabla T_s) + S_{s,Q} \quad (8)$$

và phương trình cân bằng nhiệt của pha liên tục :

$$\frac{\partial((1-\varepsilon_s)\rho_f h_f)}{\partial t} + \nabla \cdot ((1-\varepsilon_s)\rho_f \mathbf{v}_f h_f) = \nabla \cdot (k_f \nabla T_f) + S_{g,Q} \quad (9)$$

trong đó :  $k_f$  là hệ số khuếch tán nhiệt độ trong pha khí,  $\text{m}^2/\text{s}$ ;  $S_{g,Q}$  là năng lượng sinh ra do phản ứng hoá học trong thể tích  $\Omega$ ;  $T_f$  là nhiệt độ của pha khí trong thể tích  $\Omega$ .

Hệ các phương trình bảo toàn (1)–(9) đã tạo thành cấu trúc cơ bản trong mô tả toán học của quá trình đốt nhiệt phân tiến hành trong các cột nhồi.

#### **3.2.3. Nhận dạng các tham số của mô hình toán học**

Nhiều đại lượng xuất hiện trong hệ phương trình (1)–(9) được nhận dạng nhờ nghiên cứu các quá trình thuộc các hệ  $S1,i, S2,i, S3,i$ . Tác vụ nhận dạng các tham số của mô hình toán được thực hiện hoặc trên cơ sở nghiên cứu thực nghiệm trên mô hình vật thể, hoặc trên cơ sở dữ liệu tri thức đã có, hoặc trên cơ sở kết hợp giữa nghiên cứu lý thuyết và nghiên cứu thực nghiệm. Việc nhận dạng các tham số của mô hình đốt nhiệt phân rác thải rắn trong trường hợp đang xét được thực hiện trên cơ sở các dữ liệu tri thức đã có về các quá trình truyền nhiệt, chuyển khối, tương tác hóa học diễn ra trong các phân hoạch  $S1,i, S2,i, S3,i$ .

**Nhiệt hóa học và nhiệt bức xạ:** Năng lượng sinh ra do phản ứng hoá học  $S_{s,Q}$  và  $S_{g,Q}$  được nhận dạng nhờ các tính toán hiệu ứng nhiệt của các phản ứng nhiệt phân, phản ứng cháy của các cấu tử thành phần.

Lượng nhiệt bức xạ trao đổi giữa các pha được xác định từ phương trình :

$$(-1)^{i-1} \frac{dI_j^i}{dx_j} = -k_a (I_j^i - \frac{1}{4} E_b) \quad (10)$$

Ở đây, “I” đại diện cho cường độ bức xạ đối với tia tới ( $i = 1$ ) hoặc tia phản xạ ( $i = 2$ ); “j” là biến không gian;  $E_b$  là độ lớn năng lượng bức xạ vật đen tuyệt đối;  $k_a$  hệ số hấp thụ bức xạ của vật liệu :  $k_a = -[\ln(1-\epsilon_s)]/l_s$  (11)

### Truyền nhiệt và chuyển khối giữa hai pha

Hệ số truyền nhiệt đối lưu được tính theo chuẩn số Nusselt:

$$Nu = \frac{\alpha_1 l_s}{K_g} = 2.0 + 1.1 Re^{0.6} Pr^{1/3} \quad (12)$$

Tương tự, hệ số truyền khối được tính toán thông qua chuẩn số Sherwood Sh :

$$Sh = \frac{k_c l_s}{D} = 2.0 + 1.1 Re^{0.6} Sc^{1/3} \quad (13)$$

$k_c$  là hệ số tốc độ truyền khối, m/s ;  $\rho_f$  là khối lượng riêng của khí, kg/m<sup>3</sup> ;  $l_s$  là kích thước hình học đặc trưng của hạt vật liệu rắn, m ;  $\nu_f$  là độ nhớt động học của pha khí, m<sup>2</sup>/s ; D là hệ số khuếch tán hỗn hợp, m<sup>2</sup>/s ;  $K_g$  là hệ số dẫn nhiệt của pha khí, W/m.K ;  $C_p$  là nhiệt dung riêng, J/kg.K

Re là chuẩn số Reynolds,  $Re = \rho_f v_f l_s / \mu_f$  (14)

Sc là chuẩn số Schmidt,  $Sc = \mu_f / (\rho_f D)$  (15)

Pr là chuẩn số Prandtl,  $Pr = C_{pf} \mu_f / K_g$  (16)

Sự khuếch tán của lớp phim khí được xem là tương tự với dòng khí đi trong khối vật liệu theo hệ số Colburn J [2, 3]:

$$(1 - \epsilon_s) J = k \left( \frac{0.765}{Re^{0.82}} + \frac{0.365}{Re^{0.368}} \right) \quad (17)$$

$1 - \epsilon_s$  là độ xốp của khối nguyên liệu

### Các tương tác hóa học khi đốt nhiệt phân các phần tử rác thải rắn

Theo nghiên cứu của Wu et al., Yu et al. [4, 5], tốc độ cháy carbon kiểm soát tốc độ phản ứng và phụ thuộc bậc nhất với nồng độ oxy:

$$r_{char} = K_{char} \cdot m_{char} \cdot p_{s,O} \quad (18)$$

$$K_{char} = k_3 \exp(-E_c / RT_s) \quad (19)$$

$r_{char}$  là tốc độ phản ứng, s<sup>-1</sup>;  $m_{char}$  là khối lượng của than còn lại, kg;  $p_{s,O_2}$  là áp suất riêng phần tại bề mặt chất rắn, Pa.

Tốc độ bắt cháy của các chất hữu cơ trong pha khí như sau:

Để đơn giản, hơi dầu nhựa đường khi nhiệt phân có thể được xem như có công thức:  $CH_{1.84}O_{0.96}$ , với khối lượng phân tử là 95g/mol [6]. Dầu hơi nhựa đường cháy sinh ra CO và H<sub>2</sub>O theo phản ứng như sau:



Phương trình động học của quá trình cháy của dầu hơi nhựa đường có thể lấy theo công thức của Bryden và Ragland [7]:

$$r_{tar} = 2.9 \times 10^5 T_e \left\{ \exp \left( -\frac{9650}{T_e} \right) C_{CH_{1.84}O_{0.96}}^{0.5} C_{O_2} \right\} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} T_e &= \alpha T_f + (1 - \alpha) T_s, & T_f &\leq T_s \\ T_e &= T_f, & T_f &> T_s \end{aligned} \quad (22)$$

trong đó:  $\alpha$  hệ số trọng lượng,  $\alpha = 0.5$ ;  $r_{tar}$  tốc độ phản ứng trên đơn vị thể tích;  $T_e$  nhiệt độ trung bình tại mỗi phản ứng;  $T_f$  nhiệt độ của khí;  $CH_4$  và  $CO_2$  là nồng độ của các cấu tử

$CH_4$  bị oxy hóa thành  $H_2O$  và  $CO$ , sau đó  $CO$  bị chuyển hóa thành  $CO_2$ :



Tốc độ phản ứng theo nghiên cứu của Desroches-Ducarne et. al. [8]:

$$r_{CH_4} = k_{CH_4} C_{CH_4}^{0.7} C_{O_2}^{0.8} \quad (24)$$

$$k_{CH_4} = 1.6 \times 10^{10} \exp(-24157/T_f) \quad (25)$$



Tốc độ chuyển hóa  $CO$  thành  $CO_2$  theo Hautman et. al. [9]:

$$r_{CO} = k_{CO} C_{CO} C_{O_2}^{0.5} C_{H_2O}^{0.5} \quad (27)$$

$$k_{CO} = 3.25 \times 10^7 \exp(-15098/T_f) \quad (28)$$



$$r = k_{H_2} C_{H_2} C_{O_2}^{0.5} \quad (30)$$

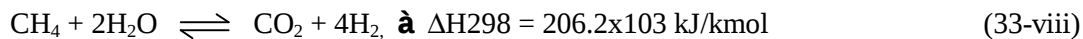


$$r = k_{xi} \left( C_{CH_4} \cdot C_{H_2O} - \frac{C_{CO} \cdot C_{H_2}^3}{K_{e_{xi}}} \right) \quad (32)$$

Ở đây,  $K_e$ : Hằng số cân bằng của phản ứng (vii)

$$K_e = \frac{C_{CO-e} \cdot C_{H_2-e}^3}{C_{CH_4-e} \cdot C_{H_2O-e}} \quad (33)$$

$C_{i-e}$ : Thành phần cân bằng của phản ứng (vii)

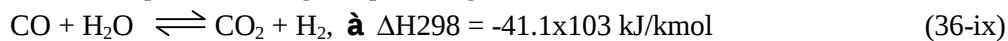


$$r = k_{xii} \left( C_{CH_4} \cdot C_{H_2O}^2 - \frac{C_{CO_2} \cdot C_{H_2}^4}{K_{e_{xii}}} \right) \quad (34)$$

$K_e$ : Hằng số cân bằng của phản ứng (viii)

$$K_e = \frac{C_{CO_2-e} \cdot C_{H_2-e}^4}{C_{CH_4-e} \cdot C_{H_2O-e}^2} \quad (35)$$

$C_{i-e}$ : Thành phần cân bằng của phản ứng



$$r = k_{xiii} \left( C_{CO} \cdot C_{H_2O} - \frac{C_{CO_2} \cdot C_{H_2}}{K_{e_{xiii}}} \right) \quad (37)$$

$K_e$ : Hằng số cân bằng của phản ứng (ix)

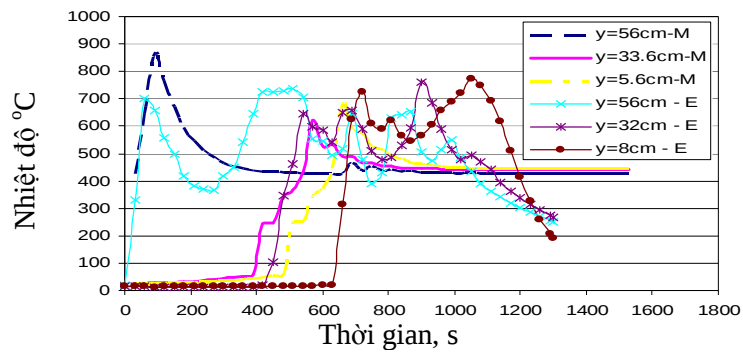
$$K_e = \frac{C_{CO_2-e} \cdot C_{H_2-e}}{C_{CO-e} \cdot C_{H_2O-e}} \quad (38)$$

Ci-e: thành phần cân bằng của phản ứng [10, 11]

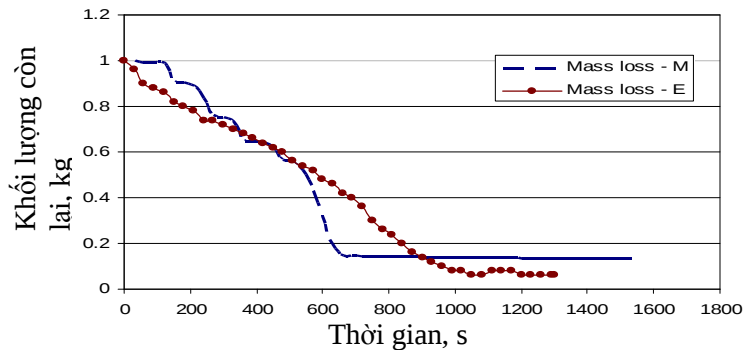
Hệ các phương trình vi phân (2)-(9) cùng với các quan hệ (10)-(38) đã tạo thành mô tả toán học của thiết bị đốt nhiệt phân kiểu cột nhồi.

### **3.2.4 Mô phỏng quá trình trên mô hình đã được thiết lập**

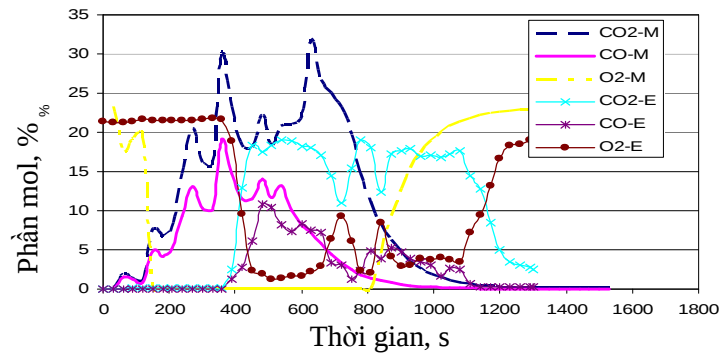
Sau khi tiến hành nhận dạng các thông số của mô hình, việc vận hành mô hình toán cho phép tiến hành những mô phỏng đầu tiên đối với quá trình đang được nghiên cứu. Về mặt toán học đó chính là tích phân hệ các phương trình mô tả toán học thu được theo thuật toán đã được xây dựng cho phương pháp thể tích hữu hạn. Kết quả vận hành mô hình trong trường hợp ví dụ cụ thể dạt =2,6mm, lượng không khí cấp G=468kg/m<sup>2</sup>h, ρđồng=56,8kg/m<sup>3</sup> được thể hiện trong hình 2, 3, và 4 như sau:



**Hình 2.** Mô phỏng trạng thái nhiệt độ theo chiều cao cột nhồi M – kết quả mô phỏng; E – kết quả thực nghiệm



**Hình 3.** Mô phỏng độ giảm khối lượng chất rắn theo thời gian M – kết quả mô phỏng; E – kết quả thực nghiệm



**Hình 4.** Mô phỏng sự biến thiên nồng độ các cấu tử khí theo thời gian M – kết quả mô phỏng; E – kết quả thực nghiệm

#### 4. THẢO LUẬN

Các kết quả được trình bày trên các hình 2, 3, 4 cho thấy mô hình toán (2)-(9) + (10)-(38) đã biểu đạt khá thành công quá trình đốt nhiệt phân diễn ra trong thiết bị kiểu cột nhồi.

Quá trình tự cháy lan dần từ trên mặt (ở độ cao 56 cm) xuống các lớp vật liệu bên dưới (độ cao 33,6 cm và 5,6 cm) được thể hiện rất rõ và rất tương đồng giữa các đường nhiệt độ mô phỏng

(M) với các đường thực nghiệm (E). Sau khoảng 10 phút lớp vật liệu dưới cùng đã bị nhiệt phân và trong khoảng 10 phút tiếp theo nhiệt độ được duy trì đều hơn trong toàn không gian cột cùng với quá trình tiếp tục khí hóa các sản phẩm nhiệt phân.

Các diễn biến nói trên cũng thấy rõ trên các đường biến thiên khối lượng pha rắn theo thời gian (hình 3) với sự tương đồng khá tốt giữa mô phỏng và thực nghiệm.

Các kết quả mô phỏng theo nồng độ các cấu tử  $\text{CO}_2$ , CO,  $\text{O}_2$  cũng cho thấy những diễn biến cơ bản của quá trình. Hàm lượng  $\text{O}_2$  lúc đầu khá cao do mới chỉ có những lớp mỏng trên mặt cột tham gia cháy phân hủy. Sau đó hàm lượng  $\text{O}_2$  trong pha khí giảm mạnh do cường độ cháy phân hủy rác thải tăng mạnh trong toàn thể tích cột. Ở giai đoạn cuối các quá trình hóa học kết thúc từ từ, nhu cầu tiêu thụ oxy giảm đi dẫn đến sự tăng trở lại của thông số này. Sự biến thiên nồng độ các cấu tử  $\text{CO}_2$ , CO xảy ra theo chiều hướng ngược lại (hình 4).

Như vậy mô hình toán (2)-(9) + (10)-(38) có thể sử dụng để tiếp tục mô phỏng, tiếp tục nghiên cứu đánh giá ảnh hưởng của hàng loạt các yếu tố khác nhau cùng tác động lên quá trình đốt nhiệt phân rác thải rắn.

Tuy nhiên từ góc độ thực hiện thẩm định và hiệu chỉnh của phương pháp luận tiếp cận hệ thống, xét về mặt định lượng sự phù hợp giữa các đường mô phỏng (M) và các đường thực nghiệm (E) phản ánh diễn biến nồng độ các cấu tử trong pha liên tục chưa đạt được kết quả như mong đợi (hình 4). Điều này cho phép đi tới các kết luận sau : **1)-** các giả thiết đưa ra khi thiết lập hệ phương trình (2)-(9) từ phương trình bảo toàn tổng quát (1) là quá "ngặt", do đây *cần hiệu chỉnh để các giả thiết gần với thực tiễn hơn* ; **2)-** nhận dạng các tham số của mô hình (2)-(9) chỉ từ nguồn dữ liệu (10)-(38) chưa hoàn toàn phù hợp với quá trình đốt nhiệt phân một loại vật liệu thực, do vậy để nâng cao mức độ tương thích của mô hình (2)-(9) *cần có các tác vụ hiệu chỉnh bằng cách tiến hành nhận dạng các tham số qua các nghiên cứu thực nghiệm bổ sung*; **3)-** đo đạc xác định thành phần khí thải rất khó đạt được độ chính xác cao, do đây *cần phải trang bị các thiết bị đo hiện đại hơn, tin cậy hơn*.

Các kết quả nghiên cứu tiếp theo trên cơ sở hiệu chỉnh các tác vụ phân tích hệ thống đã nêu ra ở trên sẽ được công bố trong các bài báo sau. Với những kết quả đã được trình bày, bài báo này đã giới thiệu một lược đồ vận dụng tiếp cận hệ thống với tư cách một phương pháp luận hữu hiệu, đủ mạnh để nghiên cứu quá trình cháy của tập hợp các phân tử chất thải rắn trong thiết bị đốt kiểu cột nhồi, một quá trình đa phân tán điển hình, khá phức tạp, nói riêng và để nghiên cứu các hệ thống công nghệ nói chung.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Kafarov V.V., Dorokhov I.N., Le Xuan Hai. *Equation of the balance of ensemble properties for the description of polydisperse system with distribution of practices according to the state coordinates*. Reports for USSR's Academy of Science, v.289, N<sup>o</sup> 1, .p. 163-168, (1986).
- [2]. Grammelis, P., et al., *Effects of biomass co-firing with coal on ash properties. Part II: Leaching, toxicity and radiological behaviour*. Fuel The 2005 World of Coal Ash Conference, 85(16): p. 2316-2322, (2006).
- [3]. Upadhyay, P.N.D.a.S.N., Ind Eng Chem Process Design Dev, 16: p. p. 157, (1976).
- [4]. Yu, Y.H., et al., *Kinetic studies of dehydration, pyrolysis and combustion of paper sludge*. Energy, 27(5): p. 457-469, (2002).
- [5]. Wu, C.-H., et al., *Thermal treatment of coated printing and writing paper in MSW: pyrolysis kinetics*. Fuel, 76(12): p. 1151-1157, (1997).
- [6]. Corella, J., et al., *Steam gasification of cellulosic wastes in a fluidized bed with downstream vessels*. Industrial and Engineering Chemistry Research, 30(10): p. 2252-2262, (1991).
- [7]. Bryden, K.M. and K.W. Ragland, *Numerical modeling of a deep, fixed bed combustor*. Energy and Fuels, 10(2): p. 269-275, (1996).
- [8]. Desroches-Ducarne, E., et al., *Modelling of gaseous pollutants emissions in circulating fluidized bed combustion of municipal refuse*. Fuel, 7(13): p. 1399-1410, (1998)
- [9]. A.N. Hautman, F.L.D., K.P. Schlug and I.A. Glassman, Combust Sci Technol, pp. 219, (1981).
- [10]. Blasi, C.D., *Dynamic behaviour of stratified downdraft gasifiers*. Chemical Engineering Science, 55(15): p. 2931-2944, (2000).
- [11]. Peters, B. and C. Bruch, *A flexible and stable numerical method for simulating the thermal decomposition of wood particles*. Chemosphere, 42(5-7): p. 481-490, (2001).
- [12]. R, G., *On the propagation of a reaction front in a packed bed: thermal conversion of municipal solid waste and biomass*. (PhD Thesis, University of Twente, Enschede, The Netherlands), (1995).
- [13]. Yang, Y.B., et al., *Effects of fuel devolatilisation on the combustion of wood chips and incineration of simulated municipal solid wastes in a packed bed\**. Fuel, 82(18): p. 2205-2221, (2003).
- [14]. Massman, W.J., *A review of the molecular diffusivities of H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, CO, O<sub>3</sub>, SO<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>O, NO, and NO<sub>2</sub> in air, O<sub>2</sub> and N<sub>2</sub> near STP*. Atmospheric Environment, 32(6): p. 1111-1127, (1998).
- [15]. Le Xuan Hai, Vo Viet Hai, *The support decision-making expert system in the control-operation of the process enineering system*. New trends in technology towards sustainable development. RSCE – 2005 , p. 42-45.