

**NGHIÊN CỨU KHẢ NĂNG DỊCH CHUYỂN MỘT SỐ NGUYÊN TỐ
Cu, Mn, Cr, As TRONG NƯỚC THẢI TẠI KHU CÔNG NGHIỆP
AN PHÚ, TỈNH PHÚ YÊN**

**Phần 3. MÔ HÌNH HÓA SỰ LAN TRUYỀN KIM LOẠI NẶNG Cu, Mn, Cr, As
TRONG NGUỒN NƯỚC THẢI CỦA KHU CÔNG NGHIỆP AN PHÚ**

Đến tòa soạn 23 - 5 - 2013

Nguyễn Ngọc Tuấn

Viện Nghiên cứu Hạt nhân Đà Lạt

Trương Minh Trí

Trường Đại học Xây dựng miền Trung

SUMMARY

**THIRD PART: MODELING THE TRANSPORT OF HEAVY METALS Cu, Mn, Cr
AND As IN WASTEWATER OF AN PHU INDUSTRIAL ZONE**

To show the transport of heavy metals As, Cr, Cu, Mn in waste water of An Phu industrial zone, a mathematical model was developed using Matlab software. The model was tested and verified by the experimental data, and then was used to predict a tendency of the contaminants effluence. The simulation results showed that the transport of heavy metals was clearly. Based on this, the concentrations of As, Cr, Cu, Mn were forecasted at different distances far from the effluent source.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Gần mười năm hình thành và đi vào hoạt động, khu công nghiệp An Phú đã có những đóng góp đáng ghi nhận vào sự phát triển kinh tế-xã hội của tỉnh Phú Yên. Tuy nhiên, trong quá trình sản xuất kinh doanh của các doanh nghiệp hoạt động trong khu công nghiệp, đã thải ra một lượng nước thải khá lớn. Do chưa có

trạm xử lý thải tập trung, tại các doanh nghiệp tuy có trạm xử lý thải nội bộ nhưng chưa đạt chất lượng theo yêu cầu nên phần lớn nước thải đưa vào môi trường, gây nên ô nhiễm.

Trong hai công trình trước [1, 2] và trong báo cáo tổng kết đề tài: “Ứng dụng phương pháp kích hoạt neutron và các phương pháp phân tích hóa lý hiện

đại, đánh giá tình trạng môi trường ở 3 khu công nghiệp của tỉnh Phú Yên và đề xuất giải pháp khắc phục, phòng ngừa”[3], chúng tôi đã nghiên cứu phương pháp xác định 04 nguyên tố Cu, Mn, Cr, As và đánh giá hàm lượng của chúng trong nước thải của Khu công nghiệp An Phú.

Trong công trình này, chúng tôi công bố kết quả tính toán (có sử dụng phần mềm Matlab) về sự lan truyền ô nhiễm các kim loại Cu, Mn, Cr, As trong nước thải tại khu công nghiệp An Phú, tỉnh Phú Yên và được kiểm chứng bằng thực nghiệm. .

2. MÔ HÌNH MATLAB

2.1. Phương trình cơ bản [4, 5, 6]

Mô hình hóa ô nhiễm nước 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 mô hình mô tả quá trình chuyển dời và pha loãng các chất độc hại trong khoảng thời gian tương đối ngắn.

Sự lan truyền chất ô nhiễm trong dòng nước được mô tả một cách đầy đủ nhất bằng phương trình khuếch tán rối 03 chiều của chất:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right] - V \frac{\partial C}{\partial x} - KC \quad (1)$$

Trong đó:

C – 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.

* Vận tốc được giải từ phương trình dòng chảy 2 chiều nước nông

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial hU}{\partial x} + \frac{\partial hV}{\partial y} = q_s \quad (2)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial U}{\partial y} + F_x - M_x + g \frac{\partial \eta}{\partial x} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + U \frac{\partial V}{\partial x} + V \frac{\partial V}{\partial y} + F_y - M_y + g \frac{\partial \eta}{\partial y} = 0 \quad (4)$$

$$v(x, y, z) = \frac{U}{\left[\frac{z_0}{h} - 1 + \ln \left(\frac{h}{z_0} \right) \right]} \ln \left(\frac{z}{z_0} \right) \quad (5)$$

$$v(x, y, z) = \frac{V}{\left[\frac{z_0}{h} - 1 + \ln \left(\frac{h}{z_0} \right) \right]} \ln \left(\frac{z}{z_0} \right) \quad (6)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial (w - \omega_s)C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(A_c \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(A_c \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_c \frac{\partial C}{\partial z} \right) + S \quad (7)$$

Trong đó:

- D - độ sâu
- z_0 - cao trình mà ở đó vận tốc bằng 0;
- C - nồng độ chất bẩn;
- u, v và w - vận tốc trung bình của dòng chảy theo phương x, y và z;
- Ω_s - độ thô thủy lực;
- S - số hạng nguồn;
- t - thời gian;
- g - gia tốc trọng trường;
- η - cao trình mặt nước;
- z_b - cao độ đáy;
- h - chiều sâu nước ($h = \eta - z_b$);
- ρ - khối lượng riêng của nước;
- q_s - lưu lượng nguồn và các thành phần vận tốc của nó;
- F_x, F_y - ngoại lực trên các phương x, y;
- ω - vận tốc theo phương đứng trong hệ tọa độ sigma;
- U, V - 2 thành phần vận tốc trung bình chiều sâu theo phương x và y tương ứng;
- A_c, K_c - các hệ số khuếch tán rối trên các phương ngang và phương đứng;

2.2. Phương pháp giải

Trong trường dòng chảy với thành phần vận tốc $w = v = 0$ và $u = \text{const}$, bỏ qua khuếch tán theo phương trục x, lời giải

chính xác cho phương trình (7) có tên là mô hình Gauss, cho nguồn điểm liên tục, với công suất M đặt tại tọa độ ($x = 0, y = 0, z = H$) là:

$$C(x, y, z) = \frac{M}{2\pi U \sigma_y \sigma_z} \text{EXP} \left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} \right) \text{EXP} \left[-\frac{(z - H + w_s x / U)^2}{2\sigma_z^2} \right] \quad (*)$$

Trong đó σ_y và σ_z là các hệ số khuếch tán và chỉ biến thiên trên trục x:

$$\sigma_y^2 = \frac{2A_c}{U} x, \quad \sigma_z^2 = \frac{2K_c}{U} x$$

2.3. Mô phỏng lan truyền

Độ cao điểm nguồn phát thải và các vị trí lấy mẫu so với gốc O của hệ trục xyz: chọn giá trị này đủ lớn để không ảnh hưởng đến độ cản trở của địa hình, ở đây chúng tôi chọn độ cao $H(m) = 50,2$; do vị trí lấy mẫu cách mặt nước 0,2 m, vì vậy độ cao của mẫu được lấy ở vị trí theo trục tung là 50m, gốc tọa độ O được xem ở vị trí đáy thấp nhất của dòng xả thải. Trong thực tế khi chạy mô hình, nếu chọn độ cao H ở các giá trị khác nhau, thì kết quả hàm lượng chất phát thải vẫn không thay đổi.

Trong bài báo này, nguồn phát thải được xem xét toàn khu công nghiệp ra đến Hồ Bầu Sen vì bên trong khu công nghiệp đến Hồ Bầu Sen bao gồm các cống thải đều là các cống xi măng. Sự lan truyền theo mô hình được tính khi nước thải chảy tràn ra khỏi khu vực Hồ Bầu Sen. Vì vậy, khoảng cách được xác định sự lan truyền được tính từ khoảng cách 140m điểm cuối của cống xả thải.

+ Khoảng cách lớn nhất được xây dựng trên mô hình Matlab theo phương X cần khảo sát (phương ngang theo chiều dòng chảy): $X_{max}(m) = 1000$.

+ Vận tốc trung bình của dòng chảy theo phương x (được đo trực tiếp): $U(m/s) = 1$.

+ Hệ số khuếch tán rối theo phương ngang (phương y): $A_c(m^2/s) = 5$ và theo phương đứng (phương z): $K_c(m^2/s) = 0,5$

+ Vận tốc rơi tới hạn trung bình của nhóm hạt chất thải: $w_s(m/s) = 0$

+ Các đường đồng mức có đơn vị mg/m^3 (hay ppb).

+ Để xác định lượng phát thải tại khu vực nguồn xả thải đối với As, Cr, Cu, Mn, chúng tôi đã xác định lưu lượng thải của khu công nghiệp là $232 m^3/ngày$, sau đó tiến hành phân tích thực nghiệm xác định hàm lượng các chất thải tại 11 điểm nút xả thải bên trong Khu công nghiệp An Phú. Trên cơ sở đó, giải phương trình (*), để xác định lượng phát thải $M(mg/s)$ chất đang xét tại nguồn điểm liên tục của toàn khu vực xả thải.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

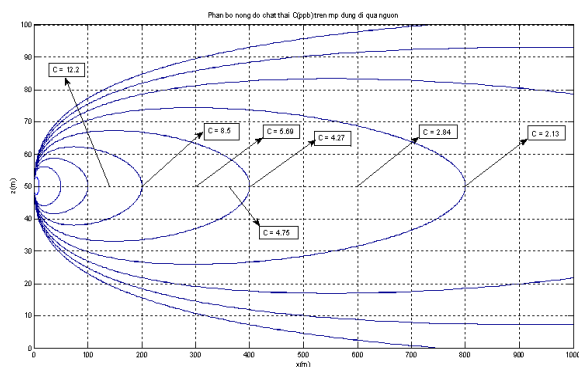
Bảng 1. Kết quả xác định hàm lượng các chất thải tại 11 điểm nút xả thải bên trong (Khu công nghiệp An Phú)

Hàm lượng (ppb)			
As (ppb)	As (ppb)	As (ppb)	As (ppb)
$14,2 \pm 1,2$	$14,2 \pm 1,2$	$14,2 \pm 1,2$	$14,2 \pm 1,2$
$18,2 \pm 1,1$	$18,2 \pm 1,1$	$18,2 \pm 1,1$	$18,2 \pm 1,1$
$16,3 \pm 1,4$	$16,3 \pm 1,4$	$16,3 \pm 1,4$	$16,3 \pm 1,4$
$14,3 \pm 1,2$	$14,3 \pm 1,2$	$14,3 \pm 1,2$	$14,3 \pm 1,2$
$14,7 \pm 1,3$	$14,7 \pm 1,3$	$14,7 \pm 1,3$	$14,7 \pm 1,3$
$14,6 \pm 1,3$	$14,6 \pm 1,3$	$14,6 \pm 1,3$	$14,6 \pm 1,3$
$11,3 \pm 0,9$	$11,3 \pm 0,9$	$11,3 \pm 0,9$	$11,3 \pm 0,9$
$13,3 \pm 1,0$	$13,3 \pm 1,0$	$13,3 \pm 1,0$	$13,3 \pm 1,0$
$13,6 \pm 1,0$	$13,6 \pm 1,0$	$13,6 \pm 1,0$	$13,6 \pm 1,0$
$12,9 \pm 0,9$	$12,9 \pm 0,9$	$12,9 \pm 0,9$	$12,9 \pm 0,9$
$13,1 \pm 0,8$	$13,1 \pm 0,8$	$13,1 \pm 0,8$	$13,1 \pm 0,8$

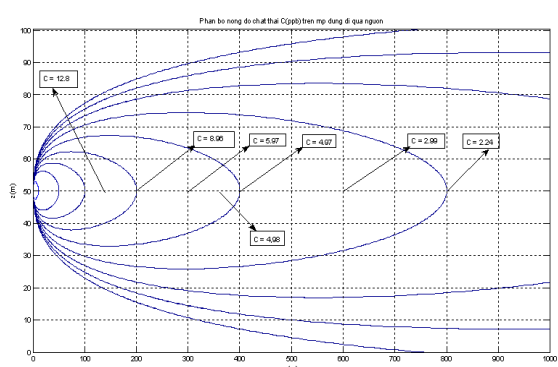
Việc giải phương trình (*) cho ta thấy lượng phát thải $M(mg/s)$ chất đang xét tại nguồn điểm liên tục của toàn khu vực xả thải tương ứng theo thứ tự với As = 33957(mg/s); Cr = 35613(mg/s); Cu = 283786(mg/s) và Mn = 1690018(mg/s).

Quá trình mô phỏng các kết quả thực nghiệm này theo phần mềm Matlab trên các hình 1, 2, 3 và 4 về sự lan truyền As, Cr, Cu, Mn trong nước thải theo chiều

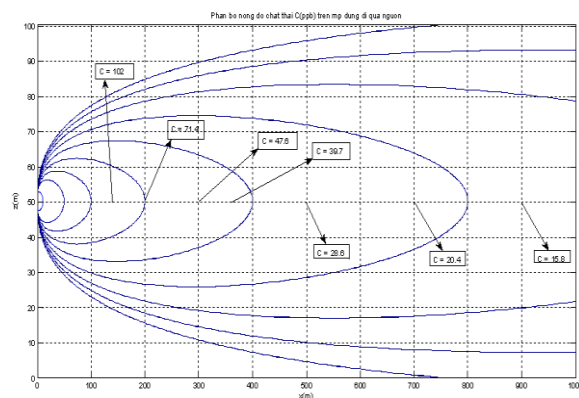
dòng chảy cho thấy sự dịch chuyển hàm lượng của 4 nguyên tố thể hiện rõ trên từng vị trí đường đồng mức theo phương ngang chiều dòng chảy (x).



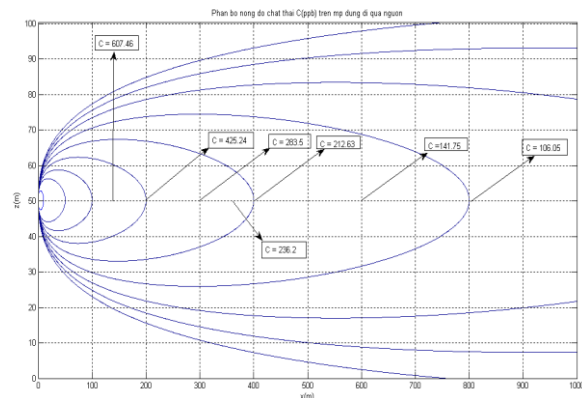
Hình 1. Mô hình lan truyền As



Hình 2. Mô hình lan truyền Cr



Hình 3. Mô hình lan truyền Cu



Hình 4. Mô hình lan truyền Mn

Kết quả mô phỏng theo các mô hình 1 - 4 cũng cho thấy sự phân bố nồng độ chất thải trên mặt phẳng đứng đi qua nguồn phát thải với các đường đồng mức có đơn vị ppb.

Để kiểm tra tính tương thích và tính khả dụng của mô hình Matlab, khi ứng dụng mô hình trong nghiên cứu khả năng lan truyền các chất ô nhiễm và phỏng đoán diễn thế ô nhiễm, cũng như dự báo được

mức hàm lượng gây ô nhiễm của các chất gây ô nhiễm quan tâm, một mô hình thí nghiệm đã được thiết lập. Theo đó, kết quả dự báo hàm lượng các nguyên tố khi mô phỏng bằng phần mềm Matlab (bảng 2) cho thấy khá phù hợp với các giá trị hàm lượng các nguyên tố nhận được khi tiến hành phân tích các mẫu được thu thập tại các vị trí lấy mẫu khác nhau (bảng 3).

Bảng 2. Khoảng cách lấy mẫu và hàm lượng các nguyên tố As, Cr, Cu, Mn được tính trên phần mềm Matlab.

Khoảng cách tính từ khu vực xả thải (m)	Hàm lượng (ppb)			
	As	Cr	Cu	Mn
140	12,2	12,8	102	607
200	8,5	8,9	71,4	425
300	5,7	5,9	48	284
360	4,8	4,9	40	236

Bảng 3. Khoảng cách lấy mẫu và hàm lượng các nguyên tố As, Cr, Cu, Mn được xác định bằng phương pháp phân tích quang phổ hấp thụ nguyên tử.

Khoảng cách tính từ khu vực xả thải (m)	Hàm lượng (ppb)			
	As	Cr	Cu	Mn
140	12,3 ±1,0	13,1 ±1,1	105 ±5,8	610 ±17,8
160	12,0 ±1,0	12,0 ±1,0	92 ±8,0	580 ±16,2
180	10,8 ±0,9	10,8 ±0,9	88 ±8,0	540 ±16,0
200	9,2 ±0,8	9,4 ±0,8	78 ±6,8	510 ±16,0
220	8,5 ±0,8	9,0 ±0,8	74 ±6,4	480 ±15,8
240	7,3 ±0,7	8,3 ±0,8	69 ±5,5	420 ±15,3
260	7,1 ±0,6	7,6 ±0,6	63 ±5,5	400 ±15,2
280	6,6 ±0,6	6,9 ±0,6	58 ±4,3	350 ±14,6
300	6,3 ±0,5	6,7 ±0,6	53 ±4,3	310 ±14,3
320	6,2 ±0,5	6,2 ±0,5	50 ±4,1	280 ±14,1
360	5,2 ±0,6	5,5 ±0,5	44 ±4,0	240 ±13,6

Cụ thể xét trong khu vực khảo sát sự dịch chuyển As, Cr, Cu, Mn thì sai số giữa kết quả phân tích mẫu thực tế (bảng 3) và

theo mô phỏng bằng phần mềm (bảng 2) với $As \leq 9,7\%$; với $Cr \leq 10,9\%$; với $Cu \leq 10,2\%$ và với $Mn \leq 16,6\%$.

Trên cơ sở mô phỏng, có thể dự đoán được hàm lượng As, Cr, Cu, Mn ở các khoảng cách khác nhau khi ở xa khu vực xả thải (theo hình 1, 2, 3, 4):

- Ở vị trí cách khu vực thải $x = 400\text{m}$ theo chiều dòng thải, thì hàm lượng As là 4,3 ppb; ở vị trí cách khu vực thải $x = 800\text{m}$ theo chiều dòng thải, thì hàm lượng As là 2,1 ppb.

- Ở vị trí cách khu vực thải $x = 400\text{m}$ theo chiều dòng thải, thì hàm lượng Cr là 5,0 ppb; ở vị trí cách khu vực thải $x = 600\text{m}$ theo chiều dòng thải, thì hàm lượng Cr là 3,0 ppb.

- Ở vị trí cách khu vực thải $x = 500\text{m}$ theo chiều dòng thải, thì hàm lượng Cu là 28,6 ppb; ở vị trí cách khu vực thải $x = 700\text{m}$ theo chiều dòng thải, thì hàm lượng Cu là 20,4 ppb.

- Ở vị trí cách khu vực thải $x = 400\text{m}$ theo chiều dòng thải, thì hàm lượng Mn là 212 ppb; ở vị trí cách khu vực thải $x = 600\text{m}$ theo chiều dòng thải, thì hàm lượng Mn là 142 ppb. Kết quả mô phỏng còn có thể dự đoán được khả năng lan truyền ô nhiễm; cụ thể là: Khi công suất phát thải toàn khu công nghiệp An Phú tăng hơn 4 lần so với hiện nay, thì môi trường nước thải có dấu hiệu bị ô nhiễm As (0,05 ppm – QCVN 40:2011/BTNMT), khi đó tại vị trí cách nguồn thải 140m, As có hàm lượng 0,05 ppm; Khi công suất phát thải toàn khu công nghiệp An Phú tăng gấp ≈ 19 lần so với hiện nay, thì môi trường nước thải có dấu hiệu bị ô nhiễm Cr (Cr tổng: 0,25

ppm – QCVN 40:2011/BTNMT); Khi công suất phát thải toàn khu công nghiệp An Phú tăng gấp 19,6 lần so với hiện nay, thì môi trường nước thải có dấu hiệu bị ô nhiễm Cu, khi đó tại vị trí cách nguồn thải 140m thì Cu có hàm lượng 2 ppm. Riêng đối với Mn: đã có dấu hiệu ô nhiễm vượt ngưỡng nước thải loại A khi thoát ra môi trường (0,607 ppm), Tuy nhiên, theo kết quả thực nghiệm và tính toán trên mô hình Matlab, khi xa nguồn thải 200m thì hàm lượng Mn thấp hơn tiêu chuẩn loại A (theo QCVN 40:2011/BTNMT).

4. KẾT LUẬN

Kết quả sử dụng phần mềm Matlab giải bài toán lan truyền ô nhiễm đối với 4 nguyên tố (As, Cr, Cu, Mn) trong khu vực xả thải dọc kênh dẫn của khu công nghiệp An Phú ở tỉnh Phú Yên khá phù hợp so với kết quả thực nghiệm.

Từ kết quả mô phỏng trên phần mềm Matlab có thể dự báo được tốc độ di chuyển cũng như khả năng gây ô nhiễm của bốn nguyên tố trên khi công suất phát thải của các khu công nghiệp tăng lên.

Có thể mở rộng phần mềm Matlab để mô hình hóa quá trình dịch chuyển các nguyên tố khác có khả năng gây ô nhiễm môi trường tại khu công nghiệp An Phú nói riêng và các khu công nghiệp nói chung.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Nguyễn Ngọc Tuấn. Trương Minh Trí. (xem tiếp tr.25)