

MÔ PHỎNG MỘT SỐ QUÁ TRÌNH PHONG HÓA DẦU TRONG MÔI TRƯỜNG BIỂN

**ThS. Nguyễn Quốc Trinh¹, TS. Nguyễn Minh Huấn²
 TS. Phùng Đăng Hiếu³, ThS. Nguyễn Quang Vinh⁴**

¹Trung tâm Dự báo Khí tượng Thủy văn Trung ương, Bộ Tài nguyên và Môi trường

²Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà Nội

³Viện Nghiên cứu Quản lý Biển và Hải đảo, Bộ Tài nguyên và Môi trường

⁴Đài Khí tượng Cao không, Bộ Tài nguyên và Môi trường

Email: maitrinhhinh@gmail.com

Tóm tắt

Bài báo giới thiệu về mô phỏng một số quá trình phong hóa dầu theo phương pháp thể tích hữu hạn và mô hình phong hóa dầu để xem xét các quá trình phong hóa thay đổi lượng dầu (như bốc hơi, phân tán, nhũ tương hóa và hòa tan). Dựa trên công trình nghiên cứu thông qua các công thức được áp dụng phổ biến nhiều nhất trên thế giới, so sánh kết quả và số liệu phân tích, nhóm tác giả đã xây dựng các phương trình thích hợp, sử dụng thiếu hụt dầu như phân tán lắng đọng dầu trong nước, để mô phỏng các quá trình phong hóa dầu, tính toán quá trình lan truyền cơ học, quá trình bay hơi, xác định tỷ lệ nhũ tương hóa của dầu tràn... phụ thuộc vào tính chất dầu và tác động của môi trường.

Từ khóa: Tràn dầu, các quá trình phong hóa, mô hình toán học.

1. Giới thiệu

Sự cố tràn dầu gây tác động nghiêm trọng đến môi trường, các hệ sinh thái và kinh tế - xã hội khu vực ven biển. Khi dầu thô hoặc sản phẩm tinh chế từ dầu mỏ tràn trên biển sẽ bắt đầu diễn ra một loạt các quá trình chuyển đổi phức tạp có thay đổi theo thời gian và không gian. Các kết quả hoạt động của các quá trình phụ thuộc vào các tính chất, thành phần của dầu, các thông số tràn ra và điều kiện môi trường tự nhiên (không khí và nước) xung quanh.

Các quá trình tự nhiên gồm vật lý, hóa học, sinh học và môi trường biển (Hình 1). Các quá trình phong hóa dầu là một tập hợp của các quá trình vật lý và hóa học thay đổi các thuộc tính của dầu tràn gây ô nhiễm.

Hiện nay có rất nhiều loại mô hình được xây dựng để mô phỏng từ các mô hình quỹ đạo đơn giản tới các mô

hình ba chiều tính toán chi tiết quá trình lan truyền và biến đổi của dầu sau khi xảy ra sự cố. Các kết quả nghiên cứu thường phụ thuộc vào một hay nhiều yếu tố của các quá trình vật lý, hóa học, sinh học và phụ thuộc vào các điều kiện môi trường, khí tượng và hải văn. Các quá trình này có thể gồm: quá trình loang dầu cơ học ngay sau khi dầu thoát ra khỏi nguồn; quá trình phân tán tự nhiên; quá trình nhũ tương hóa, bốc hơi hòa tan, oxy hóa, phân hủy sinh học, phân hủy do ánh sáng mặt trời...

Trên cơ sở kết quả nghiên cứu trên thế giới, nhóm tác giả đã xây dựng các công thức tính toán quá trình lan truyền cơ học, quá trình bay hơi, xác định tỷ lệ nhũ tương hóa của dầu tràn... phụ thuộc vào tính chất dầu và tác động của môi trường.

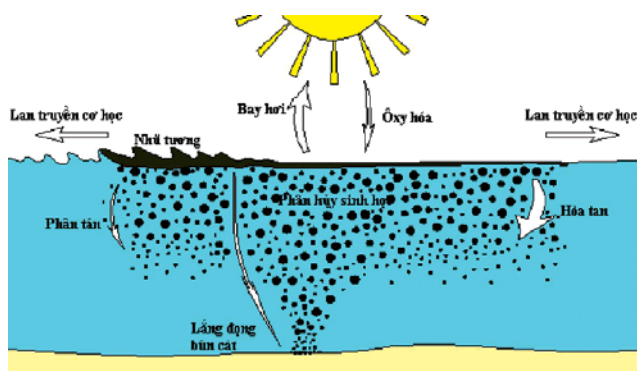
2. Một số quá trình phong hóa dầu

2.1. Quá trình lan truyền dầu cơ học

Quá trình lan truyền dầu cơ học là một trong các quá trình quan trọng trong di chuyển ban đầu của dầu loang. Các lực tác động trong quá trình lan truyền dầu cơ học như dòng chảy bề mặt, gió và chuyển động rối do sóng vỡ [1, 2, 3].

Công thức của Blokker [4]: Xác định bán kính và độ dày dầu loang phụ thuộc vào trạng thái môi trường và đặc điểm tính chất dầu với tham số Blokker bán thực nghiệm và tiến triển theo thời gian.

$$\frac{dR_{min}}{dt} = k_b (\rho_w - \rho) (\rho / \rho_w) h$$



Hình 1. Các quá trình phân hủy dầu tự nhiên trên biển

hoặc $R_{min} = \left[(3/\pi)k_b(\rho_w - \rho)(\rho/\rho_w)Vt \right]^{1/3}$ (1a)

$$h = \left[(V/\pi)^{1/3} \left(\rho_w / (3\rho(\rho_w - \rho)k_b) \right)^{2/3} t \right]^{-2/3}$$
 (1b)

Công thức của Fay [5] xác định bán kính và diện tích dầu loang phụ thuộc vào trạng thái môi trường và đặc điểm tính chất dầu. Giả thuyết quá trình hoạt động phân thành 3 pha, bao gồm quán tính - trọng lực (Pha I), trọng lực - nhớt (Pha II) và nhớt - ứng suất bề mặt (Pha III) tiến triển theo thời gian.

Pha I: $R_{min1} = 1,14 \left[\Delta\rho g V t^2 \right]^{1/4}$; $A = 0,57\pi \sqrt{\Delta\rho g V t}$;
 $t = 2,63 \sqrt{\frac{V}{\Delta\rho g \rho_w}}$ với $t < 12$ giờ (2a)

Pha II: $R_{min2} = 1,45 \left[\Delta\rho g \frac{V^2 t^{3/2}}{\sqrt{V}} \right]^{1/3}$;
 $A = 2,1\pi^3 \sqrt{\Delta\rho \frac{gV^2}{\sqrt{V}} t^{3/2}}$ với $12 \text{ giờ} < t < 1 \text{ tuần}$ (2b)

Pha III: $R_{min3} = 2,30 \left(\frac{\sigma^2}{\rho_w^2 V} t \right)^{1/4}$; $A = 2,6\pi \sqrt{\frac{\sigma^2}{\rho_w^2 V} t^2}$;
 $\Delta\rho = 1 - \frac{\rho}{\rho_w}$ với $1 \text{ tuần} < t$ (2c)

Công thức của Mackay [6] xác định diện tích dầu loang phụ thuộc vào đặc điểm tính chất dầu theo thời gian.

$$\frac{dA}{dt} = C_1 A^{1/3} \left(\frac{-C_2}{h + 10^{-5}} \right) = C_3 A^{1/3} h^{4/3}$$
 (3)

Công thức của Lehr [7] xác định bán kính và diện tích lan truyền dầu phụ thuộc vào đặc điểm tính chất dầu và trạng thái môi trường và tác động cơ học.

$$R_{min} = 1,7 \left((\rho_w / \rho - 1) V \right)^{1/3} (t/60)^{1/4}$$
; (4)

$$R_{max} = R_{min} + 0,03 U_w^{4/3} V^{2/3} (t/60)^{3/4}$$
; $A = (\pi/4) R_{min} R_{max}$

Công thức của Yapa [8] xác định bán kính và diện tích dầu loang phụ thuộc vào trạng thái môi trường và đặc điểm tính chất dầu. Giả thuyết quá trình hoạt động phân thành 4 pha, bao gồm quán tính - trọng lực (Pha I), trọng lực - nhớt (Pha II), nhớt - ứng suất bề mặt (Pha III) và cân bằng (Pha IV) tiến triển theo thời gian.

Pha I: $R_{min1} = 1,14 \left[\left(1 - \frac{\rho}{\rho_w} \right) g V t^2 \right]^{1/4}$ với $t < 12$ giờ (5a)

Pha II: $R_{min2} = 0,98 \left[\left(1 - \frac{\rho}{\rho_w} \right) g \frac{V^2 t^{3/2}}{\sqrt{V}} \right]^{1/6}$ (5b)

với $12 \text{ giờ} < t < 1 \text{ tuần}$ (5b)

Pha III: $R_{min3} = 1,60 \left(\frac{\sigma^2}{\rho_w^2 V} t \right)^{1/4}$ với $1 \text{ tuần} < t < 1 \text{ tháng}$ (5c)

Pha IV: $R_{min4} = 10^5 \left(V^{3/4} / \pi \right)^{1/2}$ với $1 \text{ tuần} < t < 1 \text{ tháng}$ (5d)

Công thức của Mackay [6] và Reed [9] xác định diện tích dầu loang phụ thuộc vào đặc điểm tính chất dầu theo thời gian

$$\frac{dA}{dt} = K_1 V^{4/3}$$
; $A = \pi R_{min}^2$; $V = \pi h R_{min}^2$; $h = V/A$ (6)

Công thức của Al-Rabeh [10]: Vệt dầu có thể được xác định là một hình ellipse trong một hệ quy chiếu Descartes với hệ trục tọa độ là X1 và Y1 mà tọa độ tâm là (x1, y1) = (0,0) và trục X1 là trùng hướng gió. Hình ellipse vệt dầu theo thời gian giả định là đồng tâm

$$\frac{r_{min}}{R_{min}} = \frac{r_{min} + \Delta r_{min}}{R_{min} + \Delta R_{min}}$$
; $\frac{r_{max}}{R_{max}} = \frac{r_{max} + \Delta r_{max}}{R_{max} + \Delta R_{max}}$; $\frac{r_{min}}{R_{min}} = \frac{r_{max}}{R_{max}}$ (7a)

$$\Delta R_{min} = 1,7 \left(1 - \frac{\rho}{\rho_w} \right)^{1/3} V^{1/3} \left(\frac{t}{60} \right)^{-3/4} \frac{\Delta t}{4 \times 60}$$
; (7b)

$$\Delta R_{max} = \Delta R_{min} + 0,03 U_w^{4/3} V^{2/3} \left(\frac{t}{60} \right)^{-1/4} \frac{3\Delta t}{4 \times 60}$$

Đưa hệ tọa độ Descartes quy ước theo hướng gió về hệ quy chiếu thực Descartes hệ thống toàn cầu được biến đổi như sau:

$$x = x1 \times \cos \varphi - y1 \times \sin \varphi$$
; $y = x1 \times \sin \varphi + y1 \times \cos \varphi$ (8)

Công thức của Warluzel và Benque [11], Tkalich [12]: Mô hình động lực dầu tràn có thể đủ khả năng để chính xác theo các phương trình Navier - Stokes

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial uh}{\partial x} + \frac{\partial vh}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) = \pm Q$$
 (9)

Công thức của Nihoul [13] và Arkhipov [14] xác định độ dày và bán kính dầu loang phụ thuộc vào đặc điểm tính chất dầu và trạng thái môi trường.

$$h = \frac{3V}{2\pi R_{min}^2} \left(1 - \frac{r^2}{R_{min}^2} \right)^{1/2}$$
; $R_{min} = \left(\frac{3,6^{1/2}}{2\pi} \right)^{1/3} (aVt^2)^{1/6}$; (10)

$$r^2 = x^2 + y^2$$
; $a = \left(1 - \frac{\rho}{\rho_w} \right) g / f$; $f = 0,95 - 1,15$

Công thức của Johansen [15] và Tomassini [16] xác định bán kính và diện tích dầu loang phụ thuộc vào đặc điểm tính chất dầu và trạng thái môi trường

$$R_{min} = A t^{7/12}$$
; $A = 0,754 \frac{[g^2 g(\rho_w - \rho)]^{1/6}}{\rho_w \sqrt{V_w}}$ (11)

Công thức của Fay [5] và Fengqi You [18] xác định diện tích dầu ban đầu và diện tích lan truyền dầu phụ thuộc vào đặc điểm tính chất dầu và trạng thái môi trường và tác động cơ học

$$A_0 = \pi \frac{C_1^4}{C_2^2} \left(\left(1 - \frac{\rho}{\rho_w} \right) \frac{gV_0^5}{v_w^2} \right)^{1/6}; t_0 = 60 \frac{C_1^4}{C_2^4} \left(\frac{\rho_w V}{(\rho_w - \rho) g v_w} \right)^{1/3};$$

$$A = 2270 \left(\frac{\rho_w}{\rho} - 1 \right) V^{1/3} (t/60)^{1/2} + 40 \left(\frac{\rho_w}{\rho} - 1 \right)^{1/3} V^{2/3} U_w^{4/3} (t/60)$$

Công thức của Al-Rabeh [10] và Chao [19], Berry [20]: Xác định bán kính và diện tích lan truyền dầu phụ thuộc vào đặc điểm tính chất dầu và trạng thái môi trường và tác động cơ học

$$R_{min} = 1,7 \left(1 - \frac{\rho}{\rho_w} \right)^{1/3} V^{1/3} \left(\frac{t}{60} \right)^{1/4};$$

$$R_{max} = R_{min} + 0,03 U_w^{4/3} V^{2/3} \left(\frac{t}{60} \right)^{3/4}; A = (\pi/4) R_{min} R_{max}$$

Công thức của Chao [19] và Ehsan Sarhadi Zadeh [21] xác định bán kính và diện tích lan truyền dầu phụ thuộc vào đặc điểm tính chất dầu và trạng thái môi trường và tác động cơ học.

$$R_{min} = 53,76 \left(\left(1 - \frac{\rho}{\rho_w} \right) V \right)^{1/3} \left(\frac{t}{60} \right)^{1/4};$$

$$R_{max} = R_{min} + 0,95 V^{2/3} U_w^{4/3} \left(\frac{t}{60} \right)^{3/4}$$

$$A = 2270 \left(\frac{\rho_w}{\rho} - 1 \right) V^{1/3} (t/60)^{1/2}$$

$$+ 40 \left(\frac{\rho_w}{\rho} - 1 \right)^{1/3} V^{2/3} U_w^{4/3} (t/60)$$

Từ các công trình nghiên cứu trên, nhóm tác giả đưa ra hệ thống công thức liên quan đến quá trình lan truyền cơ học của dầu tràn phụ thuộc vào tính chất dầu và tác động của môi trường [22].

$$A_0 = \pi \frac{C_1^4}{C_2^2} \left(\left(1 - \frac{\rho}{\rho_w} \right) \frac{gV_0^5}{v_w^2} \right)^{1/6}; R = \sqrt{\frac{A_0}{\pi}}; h = \frac{V}{A_0}$$

$$t_{max} = 60 \frac{C_1^4}{C_2^4} \left(\frac{\rho_w V}{(\rho_w - \rho) g v_w} \right)^{1/3}$$

$$A = 227,5 \rho V^{2/3} (t/60)^{1/2} + 21,75 \pi \frac{V^{1/3}}{v} U_w^{4/3} (t/60)$$

$$R_{(t+\Delta t)} = R_{(t)} + \Delta R_{(\Delta t)}$$

$$\Delta R_{min} = 1,45 \rho \left(1 - \frac{\rho}{\rho_w} \right)^{1/3} V^{1/3} \left(\frac{t}{60} \right)^{-3/4} \frac{\Delta t}{4 \times 60};$$

$$\Delta R_{max} = \Delta R_{min} + 0,95 \pi U_w^{4/3} V^{2/3} \left(\frac{t}{60} \right)^{-1/4} \frac{3 \Delta t}{4 \times 60}$$

Đưa hệ tọa độ Descartes quy ước theo hướng gió về hệ quy chiếu thực Descartes hệ thống toàn cầu được biến đổi như sau:

$$x = x1 \times \cos \varphi - y1 \times \sin \varphi; y = x1 \times \sin \varphi + y1 \times \cos \varphi$$

$$h = \frac{3V}{2\pi R^2} \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right)^{1/2}; r^2 = x^2 + y^2$$

Trong đó:

R_{min} và R_{max} : Bán kính dầu loang theo hình ellipse nhỏ và lớn (m);

R_{mini} : Bán kính dầu loang trong các pha i (m);

A_0 : Diện tích dầu loang ban đầu (m²);

A: Diện tích dầu loang (m²);

h: Độ dày lớp dầu (m);

ρ và ρ_w : Mật độ của dầu và nước (kg/m³);

v và v_w : Hệ số nhớt động học của dầu và nước ($\approx 7,6 \times 10^{-3} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ dưới 30°C); (m²/s hoặc cSt); k_b : Số Blokker (4,5);

K_1 : Hệ số thực nghiệm ($\sim 17,5/s$) (s⁻¹);

C_1 và C_2 : Hệ số tương ứng 1,14 và 1,45;

V: Thể tích dầu tràn (barrels) (1barrels = 0,1589m³);

t: Thời gian (s);

σ : Sức căng mặt ngoài (N/m);

g: Gia tốc trọng trường (m/s²);

U_w : Vận tốc gió ở độ cao 10m (knots, 1knots = 1852/3600m/s);

u và v: Vận tốc loang dầu (m/s);

D_{xy} : Hệ số khuếch tán dầu (m/s);

Q: Dầu phân tán do quá trình phong hóa;

q: Lưu lượng dầu (m³/s);

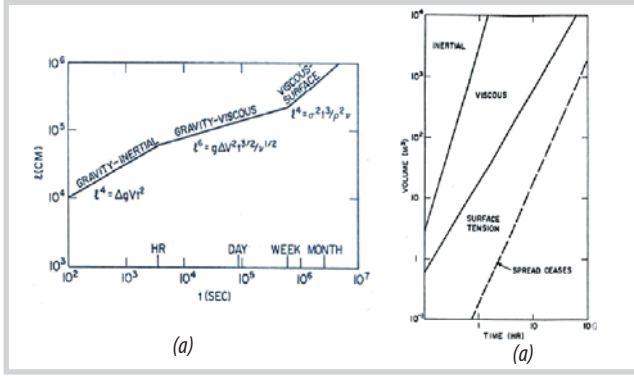
μ và μ_w : Độ nhớt động lực dầu và nước (Ns/m² hoặc cP);

r: Khoảng cách từ tâm đến vị trí x và y (m);

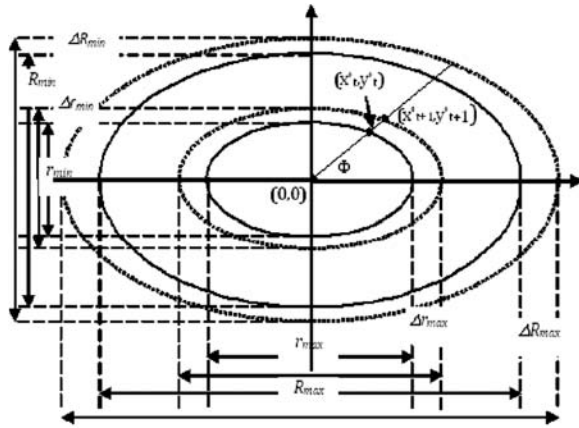
t: Thời gian (s).

2.2. Quá trình bay hơi

Quá trình bay hơi có ảnh hưởng lớn nhất đến lượng dầu còn lại trên mặt nước hoặc đất sau khi sự cố tràn dầu xảy ra. Trong vài ngày, loại nhiên liệu nhẹ như xăng bay hơi hoàn toàn ở nhiệt độ môi trường xung quanh, trong khi chỉ có một tỷ lệ nhỏ của dầu nặng hơn (Bunker C) bay hơi. Tốc độ bay hơi của dầu phụ thuộc chủ yếu vào thành phần của dầu. Sự bay hơi của một số loại dầu điển hình dao động từ 20 - 50% và thậm chí trên 90%



Hình 2. Bán kính loang dầu theo thời gian (a); Chu kỳ loang dầu phụ thuộc vào thể tích dầu tràn (b) [23]



Hình 3. Bán kính loang dầu dưới tác động của dòng lực [10]

với xăng hay dầu nhẹ [9, 24, 25]. Các thành phần dầu nhẹ trong hỗn hợp dầu là thành phần dễ bay hơi nhất, có thể bay hơi đến 75% thể tích trong vòng vài ngày, đối với dầu trung bình có thể bay hơi đến 40% thể tích. Với dầu nặng thì bay hơi chỉ khoảng 10% trong vòng vài ngày đầu. Với các loại dầu thành phẩm nhẹ như xăng, dầu hỏa thì dầu có thể bay hơi hoàn toàn.

Công thức của Mackay [26] và Stiver [27] phụ thuộc vào đặc điểm tính chất dầu và trạng thái môi trường và tác động cơ học sử dụng hàm của độ API của dầu [2].

$$F_e = 10,3 \frac{T_g}{T} \ln \left\{ 1 + \left[10,3 \frac{T_g}{T} \frac{K_w U_w^{7/9} A}{V} \right] \right\} \exp \left(6,3 - 10,3 \frac{T_g}{T} \right) t; \quad (16)$$

$$T = 457,16 - 3,13447 API; \quad T_g = 1356,7 - 247,36 \ln(API)$$

Công thức của Mackay [6] và Yapa [8] phụ thuộc vào đặc điểm tính chất dầu và trạng thái môi trường và tác động cơ học.

$$F_e = \frac{1}{C} \left[\ln P + \ln \left(CK_w U_w^{7/9} \frac{AM_m}{RT_e V \rho \times 10^6} t + \frac{1}{P} \right) \right]$$

$$\ln P = 10,6(1 - T/T_e); \quad C = 1158,9 API^{-1,1435}; \quad V_m = \frac{M_m}{10^6 \rho} \quad (17)$$

$$T = 542,6 - 30,275 API + 1,565 API^2 - 0,03439 API^3 + 0,0002604 API^4$$

Công thức của Reed [9] phụ thuộc vào đặc điểm tính chất dầu, khối lượng phân tử và trạng thái môi trường và tác động cơ học.

$$F_e = K_w U_w^{7/9} \frac{PAM_m}{RT_e} t; \quad \ln P = 10,6(1 - T/T_e); \quad (18)$$

$$M_m = 10^6 V_m \rho$$

Công thức Riazi [28] phụ thuộc vào đặc điểm tính chất dầu và tác động cơ học.

$$F_e = 1 - \exp \left(- \frac{K_e V_o}{h} t \right) \quad (19)$$

Công thức của ASCE [19] phụ thuộc vào đặc điểm tính chất dầu và tác động cơ học, trong khoảng thời gian.

$$F_e = \frac{K_w U_w^{7/9}}{h^{0,11} Sc^{2/3}} A \frac{Z_i P_i M_i}{RT_e V_i \rho_i} t \quad (20)$$

Công thức của Marquardt [29] và Bergueiro [30] phụ thuộc thời gian được đánh giá qua tốc độ gió và bức xạ (trực tiếp và gián tiếp).

$$F_e = a \ln(1 + bt / 60) \quad (21)$$

Công thức của Mackay [26] và Lehr [7], Berry [20] phụ thuộc vào đặc điểm tính chất dầu và tác động cơ học, trong khoảng thời gian.

$$F_e = 0,656 \frac{U_w^{7/9} (0,018 / M)^{1/3}}{R_{max}^{1/9}} A \frac{PX}{RT} t \quad (22)$$

$$\ln \left(\frac{P}{P_a} \right) = \Delta S \frac{(T - C_2)^2}{RT} \left(\frac{1}{T - C_2} - \frac{1}{T_e - C_2} \right)$$

$$C = 1158,9 API^{-1,1435}; \quad C_2 = 0,19(T - 18,0);$$

$$\Delta S = 8,75 + 1,987 \log(T) \quad (22a)$$

$$T = 542,6 - 30,275 API + 1,565 API^2 - 0,03439 API^3 + 0,0002604 API^4$$

Công thức của Stiver [27], Ehsan Sarhadi Zadeh [21] và Aghajanloo [31] phụ thuộc vào đặc điểm tính chất dầu, phân loại dầu và trạng thái môi trường và tác động cơ học sử dụng dữ liệu thí nghiệm để xác định các thông số cần thiết như ở mô hình OILMAP, nhưng mô hình ADIOS bằng hàm của độ API của dầu [1, 2].

$$F_e = \ln \left[1 + B_e \frac{T_g}{T_e} \frac{K_w U_w^{7/9} A t}{V} \exp \left(A_e - B_e \frac{T}{T_e} \right) \right] \frac{T_e}{B_e T_g} \quad (23)$$

Dầu thô: $T = 532,98 - 3,1295 API$
 $T_g = 985,62 - 13,597 API$

và dầu tinh chế: $T = 645,45 - 4,6588 API$
 $T_g = 388,19 - 3,8725 API$ (23a)

$$A_e = -0,572 - (0,016 T_g) + (0,045 T); \quad (23b)$$

$$B_e = 7,288 - (0,008 T_g) + (0,024 T)$$

Công thức của Fingas [32]: Từ số liệu đo đạc từ thực tế, thí nghiệm đã đưa ra công thức xác định lượng dầu bay hơi chỉ phụ thuộc nhiệt độ theo thời gian.

$$F_e = [0,0165(\%D) + 0,0045(T_e - 288)] \ln(t/60) \quad (24)$$

$$\text{hoặc } F_e = [0,0254(\%D) + 0,0010(T_e - 288)] \sqrt{t/60}$$

Từ kết quả các công trình nghiên cứu trên, nhóm tác giả đã đưa ra hệ thống công thức liên quan đến quá trình bay hơi của dầu tràn phụ thuộc vào tính chất dầu và tác động của môi trường [22].

$$F_e = \ln \left[1 + B_e \frac{T_g}{T_e} \frac{K_w U_w^{7/9} A t}{V} \exp \left(A_e - B_e \frac{T}{T_e} \right) \right] \frac{T_e}{B_e T_g} \quad (25)$$

$$T = 542,6 - 30,275 API + 1,565 API^2 - 0,03439 API^3 + 0,0002604 API^4 \quad (25a)$$

$$T_g = 1356,7 - 247,36 \ln(API)$$

Dầu thô: $T_g = 985,62 - 13,597 API$ và dầu tinh chế:

$$T_g = 388,19 - 3,8725 API \quad (25b)$$

$$A_e = -0,572 - (0,016 T_g) + (0,045 T); \quad (25c)$$

$$B_e = 7,288 - (0,008 T_g) + (0,024 T)$$

$$SG = \frac{141,5}{API + 131,5}; \quad API = \frac{141,5}{SG} - 131,5; \quad V = \frac{M}{10^6 \rho} \quad (25d)$$

Trong đó:

F_e : Tỷ lệ dầu bay hơi (%);

a và b: Tham số phụ thuộc (Bảng 1);

C: Tham số phụ thuộc chỉ số API;

%D: Tỷ lệ (%) trọng lượng bay hơi ở 180°C;

Sc: Số Schmidt ($Sc = 2,7$);

P_a : Áp suất khí quyển (Pa);

P: Áp suất hơi dầu (atm hoặc Pa);

T và T_g : Nhiệt độ dầu và môi trường (K);

T_g : Gradient nhiệt độ của dầu và tốc độ bốc hơi;

ρ : Mật độ dầu (kg/m^3);

API: Số dầu phụ thuộc mật độ (m^3/kg);

K_w : Hệ số ảnh hưởng của gió (0,00252);

U_w : Tốc độ gió (knots, 1knots = 1.852/3.600m/s);

A: Diện tích vết dầu (m^2);

V_m : Thể tích phân tử ($1,5 \times 10^{-4} - 6,0 \times 10^{-4} m^3/mol$);

Mm: Khối lượng phân tử (kg/mol);

M: Trọng lượng dầu trung bình ($2,52 \times 10^5 kg/mol$);

R: Hằng số khí ($8,206 \times 10^{-5} atm m^3/(mol K)$);

V_o : Thể tích dầu tràn ban đầu (m^3);

V: Thể tích dầu tràn (m^3);

h: Độ dày lớp dầu (m);

R_{max} : Chiều dài vết dầu theo gió (m);

A_e và B_e : Tham số phụ thuộc nhiệt độ dầu và gradient nhiệt độ dầu;

V_{ei} : Thể tích dầu mất đi của thành phần i do bay hơi (m^3);

Z_i : Tỷ lệ dầu thành phần trên tổng dầu $Z_i = E_i / \sum E_i$ (%);

P_i : Áp suất hơi của thành phần i (Pa);

M_i : Trọng lượng thành phần i ($(0,1 - 10,0) \times 10^5 kg/mol$),

ρ_i : Mật độ dầu thành phần i (kg/m^3);

Δt : Bước thời gian (s);

t: Thời gian (s).

2.3. Quá trình nhũ tương hóa

Nhũ tương hóa là quá trình phân tán nước vào dầu tràn dưới dạng các hạt nước nhỏ xen kẽ. Cơ chế hình thành nhũ tương có thể bắt đầu quá trình các hạt nước xâm nhập xen kẽ vào dầu với kích thước khoảng 10 - 25 μm (hoặc 0,010 - 0,025mm). Nếu dầu có độ nhớt nhỏ thì, những hạt nước sẽ xâm nhập nhanh và nhiều. Mặt khác nếu dầu có độ nhớt lớn thì hạt nước sẽ khó xâm nhập vào dầu.

Công thức của Rasmussen [33] tỷ lệ nhũ tương dầu tương quan gió theo thời gian.

$$F_w = \frac{1 - \exp[-K_A K_B (1 + U_w)^2 t]}{K_B} \quad (26)$$

Công thức của Shen và Yapa (1988) [34], Chao [19], Ehsan Sarhadi Zadeh [21]: Tỷ lệ lượng nước trong dầu tương quan gió và loại dầu theo thời gian.

Bảng 1. Tham số a và b phụ thuộc theo Marquardt [29]

TT	Khoảng nhiệt độ (°C)	Vận tốc gió (m/s)	Bức xạ trực tiếp		Bức xạ gián tiếp	
			a	b	a	b
1	16,8 - 25,8	1	5,564	0,176	4,156	0,177
2	16,8 - 25,8	5,7	6,282	0,155	4,686	0,160
3	16,8 - 25,8	6,8	5,896	0,288	4,402	0,229

$$F_w = C_2 \left[1 - \exp\left(\frac{C_3(1+U_w)^2 t}{C_2}\right) \right] \quad (27)$$

Công thức của Mackay [6], Reed [9] và Aghajanloo [31] xem xét quan hệ giữa tốc độ gió và lượng nước chứa trong dầu.

$$\frac{dF_w}{dt} = K_{em} (1+U_w)^2 \left(1 - \frac{F_w}{C_1} \right) \quad (28)$$

Từ các công trình nghiên cứu trên, nhóm tác giả đưa ra công thức xác định tỷ lệ nhũ tương hóa của dầu tràn mà phụ thuộc vào tính chất dầu và tác động của môi trường [22].

$$F_w = K_{em} \times (1+U_w)^2 \times \left(1 - \frac{F_{w0}}{C_1} \right) \times t \quad (29)$$

Trong đó:

F_{w0} và F_w : Phần dầu nhũ tương trong nước ban đầu và hiện tại (%);

K_{em} : Hệ số khớp đường cong thực nghiệm ($1 \times 10^{-6} \div 2 \times 10^{-6}$ đối với dầu nhẹ và $4,5 \times 10^{-6}$ đối với dầu nặng);

U_w : Tốc độ gió (m/s);

C_1 : Phần nước chứa cực đại trong nhũ tương (0,7 với dầu nhẹ và 1,15 với dầu nặng);

$K_A = 4,5 \times 10^{-6}$ và $K_B = 1,25$ là các hằng số;

C_2 : Tham số phụ thuộc loại dầu (0,7 với dầu nặng và 0,25 với dầu nhẹ);

C_3 : Hệ số ($-2,0 \times 10^{-6}$);

t: Thời gian (s).

3. Mô phỏng và đánh giá kết quả

Để mô phỏng các quá trình, nhóm tác giả giả định các thông tin cơ bản về dầu và môi trường xung quanh là cơ sở cho việc mô phỏng các quá trình phong hoá dầu (Bảng 2).

Từ Hình 4 đến Hình 8 là kết quả tính toán dựa trên công thức của nhóm tác giả, có so sánh với các công thức đã được công bố trong các công trình nghiên cứu khác.

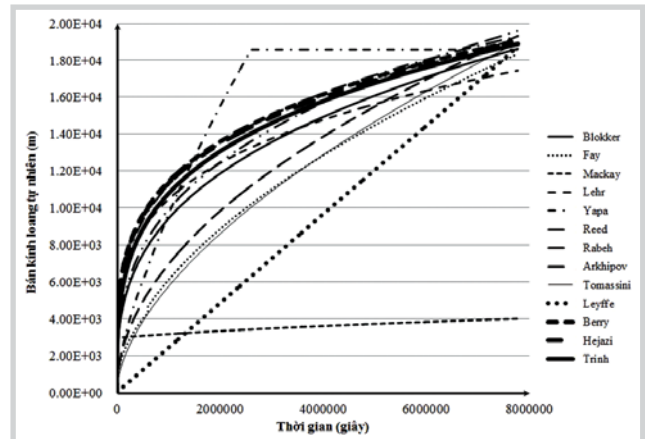
3.1. Quá trình lan truyền cơ học

Hình 4, 5 và 6 là kết quả tính toán bán kính loang dầu dựa trên công thức của nhóm tác giả, có so sánh với các công thức đã được công bố trong các công trình nghiên cứu khác.

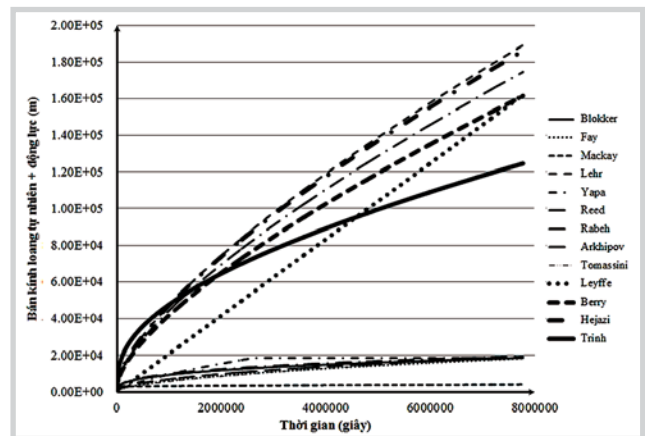
Kết quả tính toán của nhóm tác giả đã thỏa mãn và phù hợp với xu thế biến đổi của các công thức khác. Ngoài

Bảng 2. Đặc điểm dầu thô được sử dụng trong mô phỏng các quá trình phong hóa

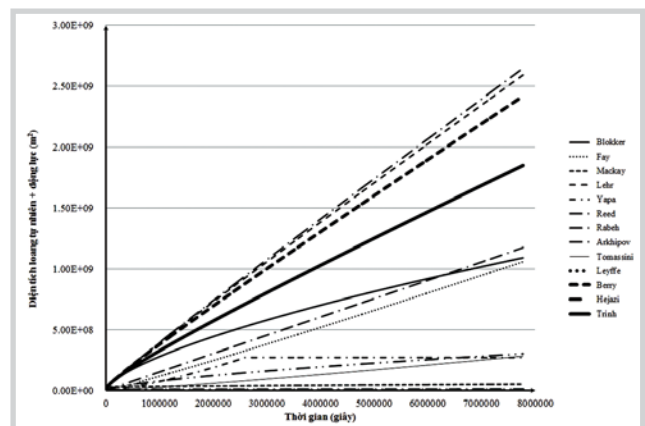
TT	Yếu tố	Giá trị
1	Mật độ (kg/m ³)	980
2	Độ nhớt dầu ở 40°C(cP)	8,75
3	Nhiệt độ điểm sôi (°K)	301
4	Nhiệt độ không khí (°K)	300
5	Nhiệt độ nước (°K)	298
6	Mật độ nước (kg/m ³)	1022,5
7	Độ nhớt nước ở 20°C(cP)	0,0091
8	Sức căng bề mặt dầu (N/m ²)	24
9	Tốc độ di chuyển (m/s)	0,75
10	Tốc độ gió (m/s)	5,0



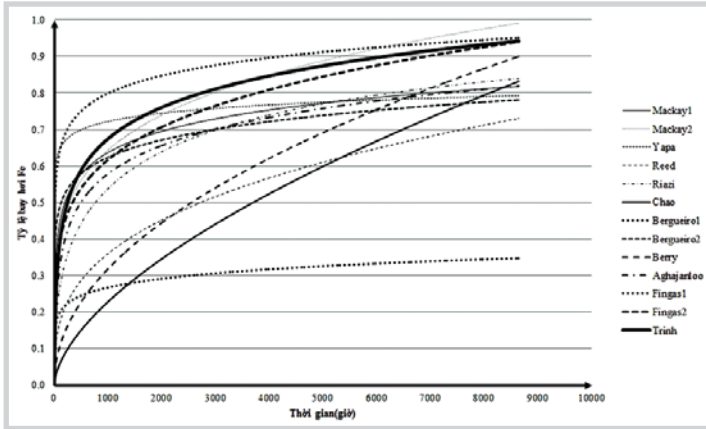
Hình 4. Bán kính loang dầu tự nhiên biến đổi theo thời gian



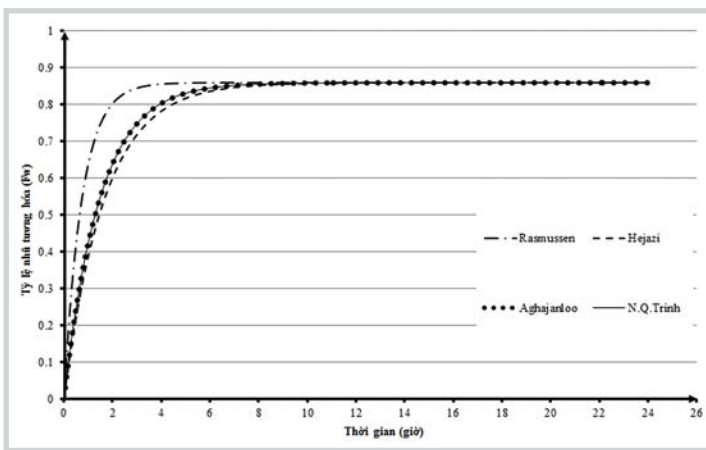
Hình 5. Bán kính loang dầu dưới tác động của động lực biến đổi theo thời gian



Hình 6. Diện tích loang dầu (m²) dưới tác động của động lực biến đổi theo thời gian



Hình 7. Biến đổi tỷ lệ bay hơi (Fe) theo thời gian



Hình 8. Biến đổi tỷ lệ nhũ tương hóa (Fw) theo thời gian

ra, kết quả của phương trình tính toán bao gồm cả quá trình biến đổi tự nhiên và quá trình biến đổi dưới tác động của động lực biến đổi theo thời gian. Dưới tác động của động lực thì quá trình này biến đổi rất nhanh và khả năng lan truyền phụ thuộc nhiều vào các yếu tố môi trường như: gió, dòng chảy bề mặt.

3.2. Quá trình bay hơi

Ở giai đoạn này, dầu thô có đặc điểm như trong Bảng 2, tốc độ gió là 5m/s, nhiệt độ nước 25°C và nhiệt độ không khí 27°C. Hình 7 trình bày tỷ lệ bốc hơi theo tính toán của các công thức mà nhóm tác giả đã giới thiệu ở phần trên. Kết quả mô phỏng theo các phương trình tương đối phù hợp. Nếu có dữ liệu chi tiết về các thành phần chưng cất dầu có sẵn, có thể bổ sung thêm số liệu đầu vào khi mô phỏng.

3.3. Quá trình nhũ tương hóa

Hình 8 trình bày tỷ lệ nhũ tương biến đổi theo thời gian tính toán của các công thức mà nhóm tác giả dựa trên các phương trình giới thiệu ở phần trên. Kết quả mô phỏng các phương trình đạt được tương đối phù hợp. Nếu dữ liệu đầu vào đầy đủ chi tiết về các thành phần dầu chưng cất, mô phỏng có thể được áp dụng nhiều thành phần làm đầu vào hơn nữa.

4. Kết luận

Mô hình phong hóa dự đoán hoạt động của vết dầu loang trên biển, là cơ sở để tính toán tốc độ truyền tải khối lượng do quá trình phong hóa quan trọng nhất: bốc hơi và nhũ tương hóa. Ngoài ra, có thể sử dụng mô hình phong hóa để tính toán sự thay đổi của tính chất dầu trong các quá trình này. Do thiếu dữ liệu đầu vào, nên nhóm tác giả thực hiện phép so sánh kỹ thuật giữa kết quả tính toán theo các phương trình của các nhà khoa học đã công bố trước đó và phương trình bán thực nghiệm của nhóm tác giả để đánh giá xác nhận mô hình toán học.

Tỷ lệ thất thoát khối lượng dầu phụ thuộc rất nhiều vào loại dầu (tính chất hóa học và tính chất vật lý), điều kiện thời tiết (tốc độ và hướng gió, sóng, nhiệt độ) và các thuộc tính của nước biển (độ muối, nhiệt độ). Trên thực tế, mô hình phong hóa sẽ được áp dụng để tính tỷ lệ dầu thất thoát đồng bộ, phát triển sự ổn định của vết dầu loang trên mặt nước. Vậy, mô hình mô phỏng do nhóm tác giả đề xuất trong bài báo này là một phần của nghiên cứu thực hiện trong lĩnh vực mô phỏng số của dầu loang trong môi trường biển.

Tài liệu tham khảo

1. National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA). *ADIOS 2 technical details (draft, unpublished)*. 1999.
2. NOAA. *Automated data inquiry for oil spills (ADIOS) version 2.0*. www.response.restoration.noaa.gov. 2000.
3. NOAA. OR & R. www.response.restoration.noaa.gov. 2013.
4. P.C.Blokkeer. *Spreading and evaporation of petroleum products on water*. 1964.
5. James A.Fay. *Physical processes in the spread of oil on a water surface*. Proceedings of the International Oil Spill Conference. 1971; 1: p. 463 - 467.
6. Donald Mackay, Ian A.Bruist, R. Mascarenhas, S.Paterson. *Oil spill processes and models - Volume 8: Environmental emergency branch, environmental impact control directorate, environmental protection service, environment Canada*. Environment Canada. 1980.

7. W. J. Lehr, H.M.Cekirge, R.J.Fraga, M.S.Belen. *Empirical studies of the spreading of oil spills*. Oil and Petrochemical Pollution. 1984; 2(1): p. 7 - 11.
8. Poojitha D.Yapa. *Oil spill processes and model development*. Journal of Advanced Marine Technology. 1994; 11: p. 1 - 22.
9. Mark Reed, Øistein Johansen, Per Johan Brandvik, Per Daling, Alun Lewis, Robert Fiocco, Don Mackay, Richard Prentki. *Oil spill modeling towards the close of the 20th century: Overview of the state of the art*. Spill Science & Technology Bulletin. 1999; 5(1): p. 3 - 16.
10. A.H.Al-Rabeh, R.W.Lardner, N.Gunay. *Gulfspill Version 2.0: A software package for oil spills in the Arabian Gulf*. Environmental Modelling and Software. 2000; 15(4): p.425 - 442.
11. A.Warluzel, J. Benque. *Un modèle mathématique de transport et d'étalement d'une nappe d'hydrocarbures*. Proceedings of the Mechanics of Oil Slicks Conference, Paris. 1981: p. 199 - 211.
12. Pavel Tkulich. *A CFD solution of oil spill problems*. Environmental Modelling and Software. 2006; 21(2): p. 271 - 282.
13. Jacques C.J.Nihoul. *A non-linear mathematical model for the transport and spreading of oil slicks*. Ecological Modelling: Modelling the Rate and Effect of Toxic Substances in the Environment. 1984; 22(1-4): p. 325 - 339.
14. Boris Arkhipov, Vladimir Koterov, Viacheslav Solbakov, Dmitry Shapochkin, Yulia Yurezanskaya. *Numerical modeling of pollutant dispersion and oil spreading by the stochastic discrete particles method*. Studies in Applied Mathematics. 2008; 120(1): p. 87 - 104.
15. O.Johansen. *Particle in fluid model for simulation of oil drift and spread - Part I: Basic concepts*. Oceanographic Center, Sintef Group, Norway. 1985.
16. Lorenzo Tomassini, Peter Reichert, Reto Knutti, Thomas F.Stocker, Mark E.Borsuk. *Robust Bayesian uncertainty analysis of climate system properties using Markov Chain Monte Carlo methods*. Journal of Climate. 2007; 20(7): p. 1239 - 1254.
17. James C.Huang. *A review of the state-of-the-art of oil spill fate/behavior models*. Proceedings of the International Oil Spill Conference. 1983: p. 313 - 322.
18. Fengqi You, Sven Leyffer. *Mixed-integer dynamic optimization for oil-spill response planning with integration of a dynamic oil weathering model*. AIChE Journal. 2011; 57(12): p. 3555 - 3564.
19. Xiaobo Chao, N.Jothi Shankar, Sam S.Y.Wang. *Development and application of oil spill model for Singapore coastal waters*. Journal of Hydraulic Engineering. 2003; 129(7): p. 495 - 503.
20. Alan Berry, Tomasz Dabrowski, Kieran Lyons. *The oil spill model OILTRANS and its application to the Celtic Sea. Manuscript for OILTRANS model*. Marine Pollution Bulletin. 2012; 64(11).
21. Ehsan Sarhadi Zadeh, Kourosh Hejazi. *Eulerian oil spills model using finite-volume method with moving boundary and wet-dry fronts*. Modelling and Simulation in Engineering. 2012.
22. Nguyễn Quốc Trinh, Nguyễn Minh Huấn, Phùng Đăng Hiếu. *Nghiên cứu lan truyền dầu ở Biển Đông phục vụ cảnh báo và tìm kiếm nguồn thải*. Báo cáo tiến độ nghiên cứu sinh, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên - Đại học Quốc gia Hà Nội. 6/2014.
23. M.Popescu Delia, E.Nistoran-Gogoase Daniela. *Oil spill modeling on rivers - an efficient forecast tool. Part 1: Physico-chemical processes*. 2003.
24. C.A.Brebbia. *Oil spill modeling and processes*. WIT Press. 2001.
25. Mervin Fingas. *Oil spill science and technology*. Gulf Professional Publishing. 2010.
26. Donald Mackay, Ronald S.Matsugu. *Evaporation rates of liquid hydrocarbon spills on land and water*. The Canadian Journal of Chemical Engineering. 1973; 51(4): p. 434 - 439.
27. Warren Stiver, Donald Mackay. *Evaporation rate of spills of hydrocarbons and petroleum mixtures*. Environmental Science and Technology. 1984; 18(11): p. 834 - 840.
28. Mohammad R.Riazi, Mohsen Edalat. *Prediction of the rate of oil removal from seawater by evaporation and dissolution*. Journal of Petroleum Science and Engineering. 1996, 16(4): p. 291 - 300.
29. Donald W.Marquardt. *An algorithm for least squares estimation of non-linear parameters*. Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics. 1963; 11(2): p. 431 - 441.
30. J.R.Bergueiro Lopez, R.Romero March, S.Guijarro Gonzales, F.Serra Socias. *Simulation of oil spill at the*

Casablanca platform (Tarragona, Spain) under different environmental conditions. Journal of Maritime Research. 2006; 3(1): p. 55 - 72.

31. K.Aghajanloo, M.D.Pirooz, M.M.Namin. *Numerical simulation of oil spill behavior in the Persian Gulf.* International Journal of Environmental Research. 2013; 7(1): p. 81 - 96.

32. Merv F.Fingas. *Modeling oil and petroleum*

evaporation. Journal of Petroleum Science Research (JPSR). 2013; 2(3): p. 104 - 115.

33. Drote Rasmussen. *Oil spill modeling-a tool for cleanup operations.* Proceedings of the Oil Spill Conference, California. 1985: p. 243 - 249.

34. H.T.Shen, P.D.Yapa. *Oil slick transport in rivers.* ASCE. Journal of Hydraulic Engineering. 1988; 114(5): p. 529 - 543.

Simulation of oil weathering processes in marine environment

Nguyen Quoc Trinh¹, Nguyen Minh Huan²

Phung Dang Hieu³, Nguyen Quang Vinh⁴

¹National Centre for Hydro-Meteorological Forecasting, MONRE

²University of Science, VNU

³Institute for Marine and Island Research and Management, MONRE

⁴Aero-Meteorological Observatory, MONRE

Summary

The paper presents the application of two dimensional numerical model to simulate the oil slick spreading using finite volume approach and an oil weathering model (OWM) to consider the mass transfer processes (such as evaporation, vertical dispersion, emulsification and dissolution). Based on the most applicable expressions in the world and comparing their results and available experimental data or analytical solutions, the authors have developed the suitable equations, using the oil depreciations as sink term in oil dynamic equation to simulate the oil weathering processes, calculate the spreading and evaporation processes, and estimate the emulsification rate of the oil spill.

Key words: Oil spill, oil weathering processes, mathematical modelling.