

See discussions, stats, and author profiles for this publication at: <https://www.researchgate.net/publication/310238334>

ENVIRONMENTAL MODELING

Presentation · January 2016

CITATIONS

0

READS

746

1 author:



Trương Minh Nhật
Can Tho University

9 PUBLICATIONS 0 CITATIONS

SEE PROFILE

TRƯỜNG ĐẠI HỌC CẦN THƠ
KHOA MÔI TRƯỜNG VÀ TÀI NGUYÊN THIÊN NHIÊN



BÁO CÁO MÔN HỌC
MÔ HÌNH HÓA MÔI TRƯỜNG
ENVIRONMENTAL MODELING

Giảng viên: Huỳnh Vương Thu Minh

Sinh Viên: Trương Minh Nhật

Mã số sinh viên: B1404563

Cần Thơ 2016

MỤC LỤC

CHƯƠNG I TỔNG QUAN VÀ Ý NGHĨA.....	5
I.1 KHÁI NIỆM	5
I.2 PHÂN LOẠI	5
I.2.1 MÔ HÌNH KHÁI NIỆM.....	5
I.2.2 MÔ HÌNH GIẢI TÍCH	5
I.2.3 MÔ HÌNH VẬT LÝ	6
I.2.4 MÔ HÌNH TƯƠNG TỰ	6
I.2.5 MÔ HÌNH TOÁN.....	6
I.3 ƯU NHƯỢC ĐIỂM CỦA CÁC MÔ HÌNH.....	10
I.3.1 MÔ HÌNH HÌNH KHÁI NIỆM.....	10
I.3.2 MÔ HÌNH GIẢI TÍCH	11
I.3.3 MÔ HÌNH VẬT LÝ	11
I.3.4 MÔ HÌNH TOÁN.....	12
I.4 TRƯỜNG HỢP SỬ DỤNG MÔ HÌNH VẬT LÝ VÀ MÔ HÌNH TOÁN	12
I.4.1 MÔ HÌNH VẬT LÝ	12
I.4.2 MÔ HÌNH TOÁN.....	12
I.5 KHÁI NIỆM MÔ HÌNH HÓA MÔI TRƯỜNG VÀ Ý NGHĨA.....	13
I.5.1 KHÁI NIỆM	13
I.5.2 Ý NGHĨA.....	13
I.5.3 MÔ HÌNH HÓA TRONG NGÀNH QUẢN LÝ MÔI TRƯỜNG	13
I.6 VÍ DỤ CỤ THỂ	14
CHƯƠNG II CÁC BƯỚC THIẾT LẬP MÔ HÌNH	15
II.1 CÁC ĐẶC TRƯNG CƠ BẢN CỦA MÔ HÌNH.....	15
II.2 CÁC BƯỚC XÂY DỰNG MÔ HÌNH	16
II.3 MÔ PHỎNG	19
II.4 ỨNG DỤNG	19
II.5 GIẢI THÍCH THUẬT NGỮ	19
II.6 LỊCH SỬ PHÁT TRIỂN.....	20
II.6.1 LỊCH SỬ PHÁT TRIỂN MÔ HÌNH	20

II.6.2	LỊCH SỬ MÔ HÌNH HÓA VỀ MÔI TRƯỜNG	21
CHƯƠNG III LÝ THUYẾT VỀ LỰA CHỌN, HIỆU CHỈNH VÀ KIỂM ĐỊNH MÔ HÌNH		
	22	
III.1	TIÊU CHUẨN LỰA CHỌN MÔ HÌNH	22
III.1.1	KHÁI NIỆM.....	22
III.1.2	MÔ HÌNH TỐT NHẤT	23
III.1.3	LỰA CHỌN MÔ HÌNH.....	23
III.1.4	ĐÁNH GIÁ VIỆC CHỌN LỰA.....	25
III.2	HIỆU CHỈNH MÔ HÌNH.....	25
III.2.1	KHÁI NIỆM.....	25
III.2.2	CÁC BƯỚC TRONG TIẾN TRÌNH HIỆU CHỈNH.....	25
III.2.3	CÁC TIỆP CẬN HIỆU CHỈNH	27
III.2.4	CÁC VẤN ĐỀ TRONG BỘ THÔNG SỐ	28
III.3	KIỂM ĐỊNH MÔ HÌNH.....	31
III.3.1	KHÁI NIỆM.....	31
III.3.2	CÁC CHỈ SỐ THÔNG KÊ	31
III.3.3	CÁC VẤN ĐỀ KIỂM ĐỊNH	34
III.3.4	HẬU KIỂM.....	34
CHƯƠNG IV LÝ THUYẾT VỀ DO, BOD.....		
	34	
IV.1	BOD, BOD ₅	34
IV.1.1	KHÁI NIỆM VÀ Ý NGHĨA BOD.....	34
IV.1.2	KHÁI NIỆM VÀ CÁCH XÁC ĐỊNH BOD ₅	35
IV.2	KHÁI NIỆM, CÁCH YẾU TỐ ẢNH HƯỞNG ĐẾN DO	36
CHƯƠNG V CƠ SỞ LÝ THUYẾT VỀ TRUYỀN TẢI - KHUẾCH TÁN		
	38	
V.1	LỊCH SỬ PHÁT TRIỂN MÔ HÌNH CHẤT LƯỢNG NƯỚC	38
V.2	CƠ SỞ LÝ THUYẾT VỀ MÔ HÌNH CHẤT LƯỢNG NƯỚC.....	40
V.2.1	CÁC PHƯƠNG TRÌNH CƠ BẢN	40
V.2.2	SỰ CHUYỂN HÓA CÁC CHẤT TRONG DÒNG CHẢY	44
CHƯƠNG VI MỘT SỐ KIẾN THỨC CƠ BẢN LIÊN QUAN ĐẾN MÔ HÌNH CHẤT		
LƯỢNG NƯỚC		
	57	

VI.1	HIỆN TƯỢNG LAN TRUYỀN TRONG NƯỚC	58
VI.2	CHUYỂN TẢI	60
VI.3	KHUẾCH TÁN/ PHÂN TÁN	61
CHƯƠNG VII LÝ THUYẾT VỀ LAN TRUYỀN CHẤT Ô NHIỄM		63
VII.1	PHƯƠNG TRÌNH VỀ SỰ LAN TRUYỀN CHẤT Ô NHIỄM	63
VII.2	TÍNH TOÁN LAN TRUYỀN CHẤT Ô NHIỄM TRÊN DÒNG SÔNG	64
VII.2.1	CÁC PHƯƠNG TRÌNH TOÁN CỦA MÔ HÌNH	65
VII.2.2	TÍNH TOÁN LAN TRUYỀN CHẤT TRONG DÒNG CHẢY	66
VII.3	TRÌNH TỰ THIẾT LẬP MÔ HÌNH CHẤT LƯỢNG NƯỚC	67
CHƯƠNG VIII CƠ SỞ LÝ THUYẾT LỰA CHỌN MÔ HÌNH CHẤT LƯỢNG NƯỚC		68
VIII.1	CÁC BƯỚC THIẾT LẬP MÔ HÌNH CHẤT LƯỢNG NƯỚC	68
VIII.1.1	BƯỚC ĐẦU	68
VIII.1.2	BƯỚC TIẾP THEO	68
VIII.2	LỰA CHỌN MÔ HÌNH CHẤT LƯỢNG NƯỚC	69
VIII.2.1	LỰA CHỌN MÔ HÌNH.....	69
VIII.2.2	SỰ PHÁT TRIỂN LÝ THUYẾT VẤN ĐỀ.....	71
VIII.2.3	KIỂM ĐỊNH VÀ HIỆU CHỈNH.....	71
CHƯƠNG IX LÝ THUYẾT BOD & DO CỦA STREETER-PHELPS.....		46
IX.1	CƠ SỞ LÝ THUYẾT.....	46
IX.2	MÔ HÌNH STREETER- PHELPS & ĐƯỜNG CONG SUY GIẢM OXY	47
IX.3	ĐƯỜNG CONG SUY GIẢM OXY CÓ KỂ ĐẾN QUÁ TRÌNH NITROGEN..	52
IX.4	ĐƯỜNG CONG SUY GIẢM OXY CÓ KỂ ĐẾN QUÁ TRÌNH PHÂN TÁN ..	52
IX.5	NHẬN XÉT	52
IX.6	BÀI TẬP VẬN DỤNG MÔ HÌNH CỦA STREETER-PHELPS	54
CHƯƠNG X TRÌNH BÀY MÔ HÌNH SỐ CHO CHẤT LƯỢNG NƯỚC		71
CHƯƠNG XI BÀI TẬP VẬN DỤNG		74
XI.1	BÀI TẬP 1	74
XI.2	BÀI TẬP 2	77
XI.3	BÀI TẬP 3	80
CHƯƠNG XII TÀI LIỆU THAM KHẢO		85

CHƯƠNG I TỔNG QUAN VÀ Ý NGHĨA

I.1 KHÁI NIỆM

_ Mô hình là một đối tượng cụ thể (vật chất hoặc phương trình toán học), một hệ thống, hoặc một khái niệm (tư duy) thay thế một nguyên bản.

_ Mô hình là một cấu trúc mô tả hình ảnh đã được tối giản hóa theo đặc điểm hoặc diễn biến của một đối tượng, một hiện tượng, một khái niệm hoặc một hệ thống.

_ Mô hình có thể là hình ảnh hoặc một vật thể cụ thể thu nhỏ phóng đại, chỉ làm gọn bằng phương trình toán học, công thức vật lý, một phần mềm tin học để mô tả một hiện tượng thực tế mang tính điển hình. (Lê Anh Tuấn, 2008).

_ Theo Abdel-Magid IS (1997), mô hình có thể được định nghĩa là quá trình áp dụng các kiến thức cơ bản và kinh nghiệm để mô phỏng hoặc mô tả hoạt động của một hệ thống thực để đạt được những mục tiêu nhất định. Mô hình có thể được hiệu quả chi phí (cost-effective) và công cụ hiệu quả bất cứ khi nào, khả thi giống như làm việc với thực tế, hệ thống này thường phức tạp. Mô hình từ lâu đã là một phần không thể thiếu trong việc tổ chức, tổng hợp, và hợp lý hóa các quan sát và đo lường từ các hệ thống thực tế và trong việc tìm hiểu nguyên nhân và tác động của chúng.

⇒ Tóm lại: Như vậy chúng ta có thể hiểu một cách đơn giản mô hình là một đối tượng cụ thể được mô phỏng hoặc mô tả các hoạt động từ hệ thống thực bởi áp dụng các kiến thức cơ bản và kinh nghiệm. Mô hình có được thu nhỏ hoặc phóng to, và có thể cảm nắm được hay một phần mềm máy tính, một phương trình toán học, công thức vật lý để mô tả các đối tượng thực tế trong tự nhiên mang tính điển hình. Mô hình được tạo ra để dự báo xu thế biến động môi trường theo không gian và thời gian. Từ đó, giúp cho các nhà quản lý đưa ra các quy hoạch một cách hợp lý.

I.2 PHÂN LOẠI

I.2.1 MÔ HÌNH KHÁI NIỆM

_ Mô hình khái niệm là một dạng ý tưởng hóa nhằm tối giản những yếu tố phức tạp ngoài thực tế ở dạng lưu đồ hoặc sơ đồ. Mô hình khái niệm phải thể hiện dễ hiểu tạo cho những người không phải là chuyên gia hiểu được mục tiêu mô hình.

I.2.2 MÔ HÌNH GIẢI TÍCH

_ Theo Abdel-Magid IS (1997), khi tất cả các phương trình trong một mô hình có thể được giải quyết bằng đại số để mang lại một hi vọng mới, trong khi các một mô hình còn lại đang bị bế tắc, và một thủ tục tính toán là cần thiết để giải quyết một hoặc nhiều các phương trình mô hình, mô hình này được phân loại là mô hình số.

_Mô hình giải tích/ mô hình số là thực chất là một loạt các thuật toán được viết để giải quyết các quan hệ giữa các thông số và biến số trong mô hình và cho ra kết quả dưới dạng số hoặc đồ thị.

⇒ Đây là phần cốt lõi và quan trọng nhất và là phần phức tạp trong tiến trình thực hiện mô hình toán.

I.2.3 MÔ HÌNH VẬT LÝ

_Mô hình tỉ lệ là hệ vật lý được mô phỏng lại với các thành phần được mô phỏng bằng một tỉ lệ chính xác (thu nhỏ hoặc phóng to).

Ví dụ tỉ lệ của Petronas Towers tại thủ đô Kuala Lumpur là 1:50

Ưu điểm:

- + Là công cụ chuẩn xác để dự đoán những hiện tượng vật lý.
- + Kích thước nhỏ, đo đạc dễ dàng.
- + Quan sát các hiện tượng tận mắt, dễ dàng định hướng nghiên cứu

Nhược điểm:

- + Tốn nhiều thời gian và chi phí.
- + Chỉ được áp dụng khi hết sức cần thiết khi nghiên cứu chi tiết để thiết kế công trình.
- + Khó mô phỏng tất cả các hiện tượng theo tỉ lệ chính xác

_Mô hình phác thảo thử nghiệm là dạng này được sử dụng nhanh và thô (phác thảo) để thử nghiệm một vài chức năng.

I.2.4 MÔ HÌNH TƯƠNG TỰ

_Những hiện tượng khác xa nhau về bản chất vật lý nhưng lại có sự tương đồng khi được mô tả bằng những công thức hay phương trình toán học, do đó người ta có thể sử dụng mô hình tương tự để nghiên cứu các hiện tượng khác nhau.

Ví dụ: Sử dụng mô hình dòng điện (đơn giản) có phương trình toán học tương tự mô hình dòng thấm (phức tạp) để nghiên cứu mô hình dòng thấm.

I.2.5 MÔ HÌNH TOÁN

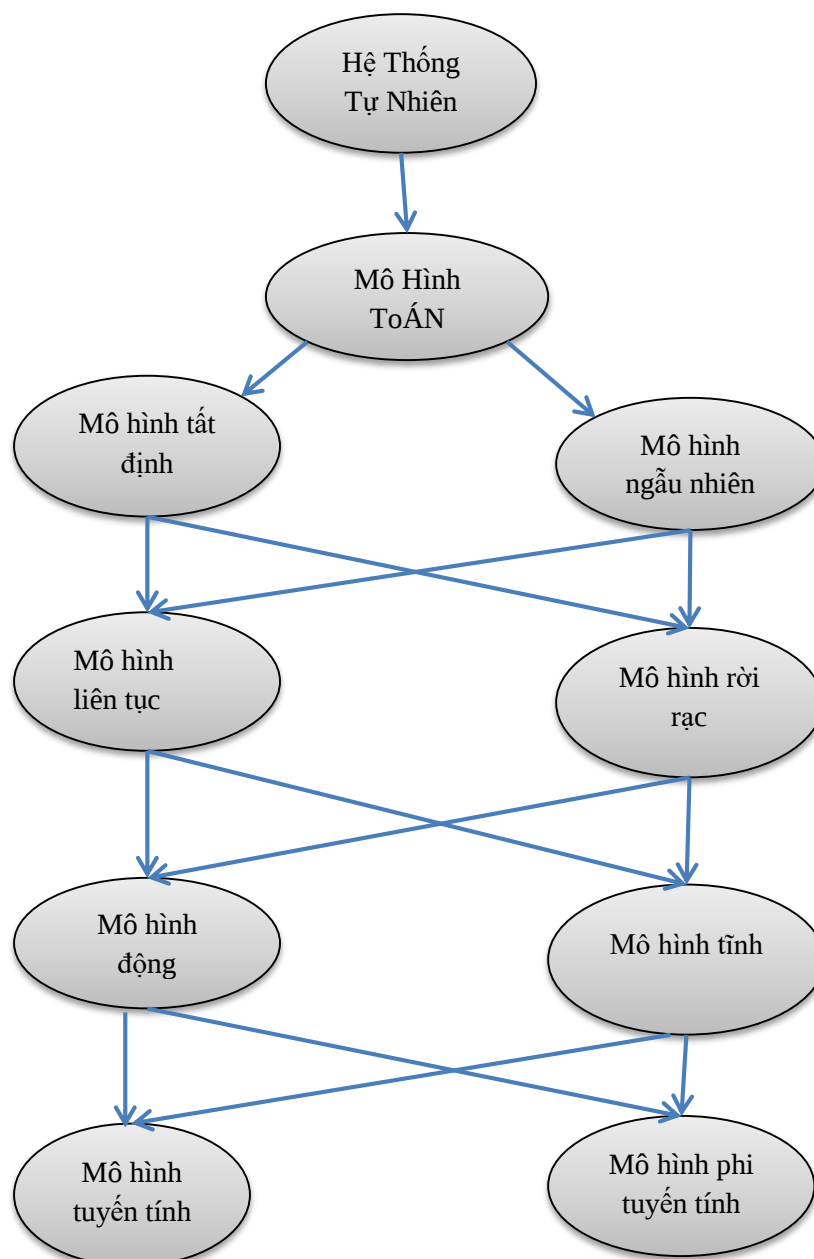
_Mô hình toán là dùng ngôn ngữ lập trình mô tả mối quan hệ toán học giữa các yếu tố trong hệ thống (các quá trình hóa học, vật lý, sinh học) được mô phỏng từ hệ thống thực. Ý nghĩa thể hiện mối tương quan giữa các thành phần thông qua các phương trình cụ thể. và sử dụng các ngôn ngữ lập trình như pascal, excel, Java, C++, C, Fortran, v.v.

_Một số mô hình toán ứng dụng trong nhiều lĩnh vực

- + Mô hình thủy văn: HEC HMS, NAM, TANK, SSARR.
- + Mô hình lưu vực sông: MIKE BASIN
- + Mô hình thủy lực: MIKE 11, MIKE 21, MIKE 3, SOBECK (Hà lan), VRSAP
- + Mô hình chất lượng nước: MIKE 11 ECOLab, HSPF
- + Mô hình nước ngầm: MODFLOW iMOD, Visual MODFLOW
- + Hệ thống thông tin địa lý: MAPInfo, MOSKITO, Arc GIS.

Phân loại mô hình toán

Mô hình toán được phân loại rất đa dạng và chúng có sự tương tác phức tạp với nhau.



(a) Mô hình tất định và mô hình ngẫu nhiên

_Mô hình tất định là khi các biến (trong một hệ thống động và tĩnh) được xác định một cách chắc chắn, các mối quan hệ giữa các biến được xác định là cố định và ra một kết quả duy nhất. Mô hình được xây dựng bằng các phương trình đại số và các công thức khác biệt.

_Mô hình ngẫu nhiên, nếu tính ngẫu nhiên không thể đoán được chính xác hoặc xác suất được kết hợp với một biến hay kết quả, thì được gọi là mô hình ngẫu nhiên. (If some unpredictable randomness or probabilities are associated with at least one of the variables or the outcomes, the model is considered probabilistic).

❖ Ví dụ

+ Hãy xem xét việc xả chất ô nhiễm vào một hồ nước. Nếu tất cả các biến trong hệ thống này, chẳng hạn như tốc độ chảy, khối lượng của hồ được giả định là giá trị cố định trung bình, mô hình này có thể được phân loại như tất định.

+Mặt khác, nếu lưu lượng được thực hiện như là một giá trị trung bình với một số xác suất biến động xung quanh giá trị trung bình, do chảy tràn, đây là một ví dụ về cách tiếp cận mô hình xác suất đã được điều chỉnh để đánh giá tác động của các biến này.

(b) Mô hình liên tục và mô hình rời rạc.

_Khi các biến trong hệ thống là chức năng liên tục theo thời gian được gọi là mô hình liên tục. Mô hình liên tục được xây dựng theo phương trình vi phân.

_Nếu những thay đổi trong biến xảy ra một cách ngẫu nhiên và theo định kỳ, mô hình rời rạc. Mô hình rời rạc được xây dựng theo phương trình khác nhau.

❖ Ví dụ

+Một hồ nước, một khối lượng nồng độ các độc chất thay đổi theo thời gian, nhưng miễn là dòng chảy khác 0=> hệ thống tuân theo mô hình liên tục.

+Nếu sự kiện như lượng mưa xảy ra ngẫu nhiên không tục theo mùa=> hệ thống tuân theo mô hình rời rạc.

(c) Mô hình động và mô hình tĩnh

_Một hệ thống ở trạng thái ổn định, đầu vào và đầu ra không hay đổi theo thời gian, và luôn ở mức giá trị trung bình, mô hình này gọi là mô hình tĩnh hay ổn định. Các kết quả của mô hình tĩnh được tính bằng cách một sự toán duy nhất cho tất cả các phương trình (The results of a static model are obtained by a single computation of all of the equations). Kết quả đầu ra của mô hình tĩnh là bộ số liệu.

_Khi các hành vi phụ thuộc vào thời gian được gọi là Mô hình động. Kết quả của một mô hình động phụ thuộc vào đầu ra một thời gian trước đó và đầu vào của thời gian hiện tại. Kết quả của nó được tính bằng sự lặp đi lặp các phương trình theo thời gian.

❖ Ví dụ

+ Nếu lưu lượng chảy vào và ra vẫn không thay đổi nồng độ các chất ô nhiễm và luôn ở giá trị trung bình=> Mô hình này được xem là mô hình tĩnh.

+Nhưng nếu dòng chảy của các chất ô nhiễm thay đổi giá trị từ ở trạng thái ổn định sang giá trị khác, và nồng độ của nó thay đổi theo thời gian=> mô hình động.

(d) Mô hình tuyến tính và phi tuyến tính

_Mô hình tuyến tính có giá trị đầu vào bậc nhất với tỷ lệ giá trị đầu ra.

_Mô hình phi tuyến tính còn là một phương trình đầu vào bậc nhất không tỷ lệ với giá trị đầu ra.

🌈 Ngoài ra, mô hình toán học cũng được phân loại theo cách khác

(a) Mô hình hộp đen

Mô hình chỉ cung cấp thông tin đầu vào và đầu ra, các cấu trúc bên trong không biết, có thể do quá phức tạp

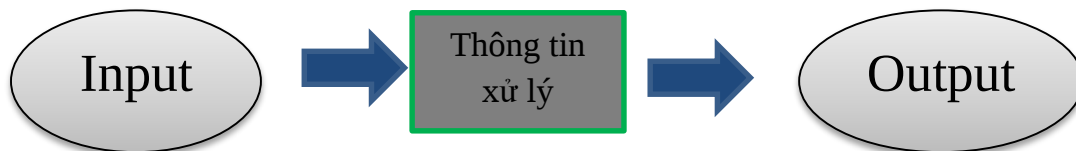


Hình 1.2 Mô hình hộp đen

❖ Ví dụ: Mô hình ngẫu nhiên

(b) Mô hình hộp xám

Mô hình cung cấp thông tin đầu vào và đầu ra, và một phần của cấu trúc bên trong

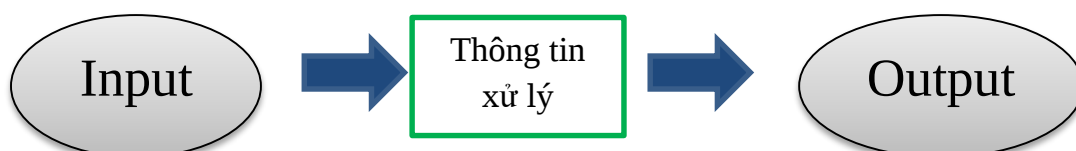


Hình 1.3 Mô hình hộp xám

❖ Ví dụ: Mô hình khái niệm.

(c) Mô hình hộp trắng

Mô hình cung cấp thông tin đầu vào, đầu ra và cấu trúc bên trong hệ thống.



Hình 1.4 Mô hình hộp xám

- ❖ Ví dụ. mô hình hệ thống xử lý nước thải, mô hình số, mô hình vật lý

I.3 ƯU NHƯỢC ĐIỂM CỦA CÁC MÔ HÌNH

I.3.1 MÔ HÌNH HÌNH KHÁI NIỆM

Bảng 1.1 Ưu, nhược điểm mô hình khái niệm

Ưu điểm	Nhược điểm
Mô hình khái niệm có thể được hình thành mặc dù người tạo ra nó có thể chưa hiểu hết tất cả các hiện tượng phức tạp trong thực tế	Mô hình khái niệm là một khái quát nhân tạo và phi vật lý tối giản nên có thể không đưa ra hết những quan hệ tương tác giữa các đối tượng
Có thể đơn giản hóa tính bất nhất của các thông số thành tính đồng nhất	Những người thiếu kinh nghiệm có thể tạo ra các giả thiết phi thực tế hoặc quá đơn giản
Có thể giảm thiểu được số liệu yêu cầu	Mô hình khái niệm mang tính tổng quát nên đôi khi bỏ sót các phương án vận hành
Dễ dàng cho người xem hiểu cách thu thập số liệu, thông tin sử dụng một cách nhanh chóng, ít tốn kém	Mô hình khái quát thường không thể thể hiện cách điều chỉnh sai số hoặc ngoại suy trong trường hợp thiếu dữ liệu
Mô hình khái niệm là một công cụ kỹ thuật cho các lập trình viên hiểu vấn đề phải giải quyết mà không cần phải là một chuyên gia môi trường	Khi cần bổ sung mô hình hoặc tái cấu trúc mô hình có thể tạo ra một tình trạng quá gò bó thông số
Mô hình khái niệm tạo thuận lợi cho việc diễn giải trong thuyết minh, biểu bảng, đồ thị	
Có thể tạo ra một giao tiếp với cơ sở dữ liệu và hệ thống thông tin địa lí.	

I.3.2 MÔ HÌNH GIẢI TÍCH

Bảng 1.2 Ưu, nhược điểm mô hình giải tích

Mô hình giải tích	
Ưu điểm	Nhược điểm
Các đối tượng được đơn giản hóa dưới dạng các công thức hay phương trình toán học	Một số đối tượng có thể bị lược bỏ chỉ giữ lại những yếu tố chính.
Cho kết quả nhanh chóng, tổng quát	
Là cơ sở để xây dựng mô hình toán	
Ít tốn kém.	

I.3.3 MÔ HÌNH VẬT LÝ

Bảng 1.3 Ưu, nhược điểm mô hình vật lý

Mô hình vật lý	
Ưu điểm	Nhược điểm
Dễ dàng kiểm tra được các hiện tượng cực đoan	Tốn kém thời gian và tiền bạc
Kích thước nhỏ đo đạc dễ dàng, có khả năng đo đạc cùng thời điểm	Khó mô phỏng tất cả các hiện tượng theo tỉ lệ chính xác
Quan sát các hiện tượng tận mắt, dễ dàng định hướng tập trung nghiên cứu	Khó mô phỏng các điều kiện biên một cách chính xác
Tổng hợp các phương trình mà không cần thiết đơn giản hóa mô hình toán	Chiếm diện tích lớn trong phòng thí nghiệm goặc nơi nghiên cứu
	Mô hình vật lý chỉ sử dụng cho một trường hợp (kịch bản) nhất định
	Không thể mô phỏng các biên và điều kiện biên như thật

I.3.4 MÔ HÌNH TOÁN

Bảng 1.4 Ưu, nhược điểm mô hình toán

Mô hình toán	
Ưu điểm	Nhược điểm
Độ chính xác cao	Không thể sử dụng cho một số hiện tượng tự nhiên quá phức tạp không có công thức tương quan cụ thể
Cho kết quả nhanh	Không thể quan sát trực quan
Ít tốn kém chi phí, thời gian	Quá trình xây dựng mô hình phức tạp và gặp nhiều khó khăn
Xây dựng, tính toán cho nhiều trường hợp, kịch bản khác nhau	
Xử lý được số liệu quá lớn, quá nhiều	
Được áp dụng cho khu vực rộng lớn như quy mô toàn cầu	

I.4 TRƯỜNG HỢP SỬ DỤNG MÔ HÌNH VẬT LÝ VÀ MÔ HÌNH TOÁN

I.4.1 MÔ HÌNH VẬT LÝ

_Hiện tượng tự nhiên quá phức tạp không có công thức tương quan cụ thể

_Mô hình vật lý dùng để kiểm định lại mô hình toán

I.4.2 MÔ HÌNH TOÁN

_Trường hợp cần cho ra nhiều kết quả với nhiều kịch bản khác nhau.

_Trong trường hợp số liệu quá lớn, quá nhiều cho một quy mô lớn như toàn cầu.

_Thí nghiệm các thực nghiệm nguy hiểm

_Thúc đẩy các quá trình diễn ra nhanh, chậm (như mô phỏng chiều cao cây hay là sự phát triển động học dân số)

I.5 KHÁI NIỆM MÔ HÌNH HÓA MÔI TRƯỜNG VÀ Ý NGHĨA

I.5.1 KHÁI NIỆM

Mô hình hóa môi trường là cách tiếp cận toán học mô phỏng diễn biến chất lượng môi trường dưới ảnh hưởng của một hoặc tập hợp các nhân tố có khả năng tác động đến môi trường, dự báo tác động môi trường và kiểm soát các nguồn ô nhiễm.

I.5.2 Ý NGHĨA

Dự báo biến động môi trường theo không gian và thời gian bởi mô hình. Từ đó, giúp cho các nhà quản lý đưa ra các quy hoạch và chính sách môi trường một cách hợp lý.

I.5.3 MÔ HÌNH HÓA TRONG NGÀNH QUẢN LÝ MÔI TRƯỜNG

Hiện nay, lực lượng quản lý, nghiên cứu môi trường phải đang đối phó với một loạt các chất ô nhiễm trải qua sinh học phức tạp và quá trình phi sinh học trong đất, nước mặt, nước ngầm, nước biển, và không khí của sinh quyển. Do đó, mô hình hóa các hệ thống môi trường quy mô lớn thường là một công việc phức tạp và đầy thử thách cho các nhà quản lý, nghiên cứu về môi trường. Động lực thúc đẩy cho phát triển mô hình môi trường trong ngành Quản lý môi trường có thể có một trong những lý do sau đây:

- (1) Để đạt được một sự hiểu biết tốt hơn và có cái nhìn sâu sắc về môi trường như là quy trình và vận chuyển các chất ô nhiễm trong môi trường và ảnh hưởng của nó.
- (2) Để xác định nồng độ hóa học ngắn hạn và dài hạn trong các khoang khác nhau của sinh quyển để sử dụng trong thực thi quy định và trong việc đánh giá rủi ro, ảnh hưởng và rủi ro của hiện tại cũng như đề xuất hóa chất.
- (3) Để dự đoán nồng độ các chất ô nhiễm môi trường trong tương lai dưới tải trọng chất thải khác nhau và / hoặc thay thế quản lý.
- (4) Để đáp ứng yêu cầu quy định và luật định liên quan đến khí thải môi trường, thải, chuyển nhượng, và các phiên bản của các chất ô nhiễm được kiểm soát.
- (5) Để sử dụng trong thử nghiệm giả thuyết liên quan đến quy trình, lựa chọn thay thế kiểm soát ô nhiễm, v.v.
- (6) Thực hiện trong việc thiết kế, vận hành và tối ưu hóa các lò phản ứng, quy trình, lựa chọn thay thế kiểm soát ô nhiễm, v.v.
- (7) Để sử dụng trong đánh giá tác động môi trường của các hoạt động và được đề xuất .

I.6 VÍ DỤ CỤ THỂ



Hình 1.5 Mô hình khái niệm về hiện tượng thay đổi DO trong lưu vực

Phương trình diễn tả sự thay đổi DO trong V

$DO_{\text{vào}} + DO_{\text{sản sinh trong V}} - (DO_{\text{ra}} + DO_{\text{mất trong V}}) = \text{Sự thay đổi DO trong V.}$

Các quá trình ảnh hưởng đến nồng độ oxy hòa tan

_Sự hòa tan oxy từ không khí vào nước qua bề mặt thoáng.

_Sự sản sinh oxy trong nước do quá trình quang hợp của thực vật thủy sinh.

_Sự mất oxy cho quá trình oxy hóa để phân hủy các chất hữu cơ trong nước, phân hủy các chất cặn lắng dưới đáy và các quá trình khử nitrat và nitrat hóa.

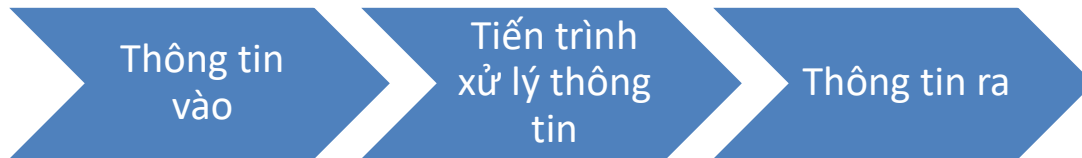
_Một phần oxy cần cho sự hô hấp của động thực vật thủy sinh.

_Hàm lượng DO chảy vào, có thể mang nhiều chất hữu cơ và DO hòa tan.

Như vậy, từ các phân tích các quá trình sinh hóa trong dòng chảy ta có phương trình tổng quát mô tả cân bằng oxy hòa tan trong dòng chảy.

CHƯƠNG II CÁC BƯỚC THIẾT LẬP MÔ HÌNH

II.1 CÁC ĐẶC TRƯNG CƠ BẢN CỦA MÔ HÌNH



_Thông tin vào: bao gồm các dạng cơ sở dữ liệu đưa vào mô hình để xử lý

_Tiến trình xử lý thông tin: bao gồm quá trình tiếp nhận dữ liệu vào, tính toán, phân tích, đánh giá và xuất dữ liệu.

_Thông tin ra: thể hiện ở dạng đồ thị, biểu bảng, báo cáo đánh giá kết quả.

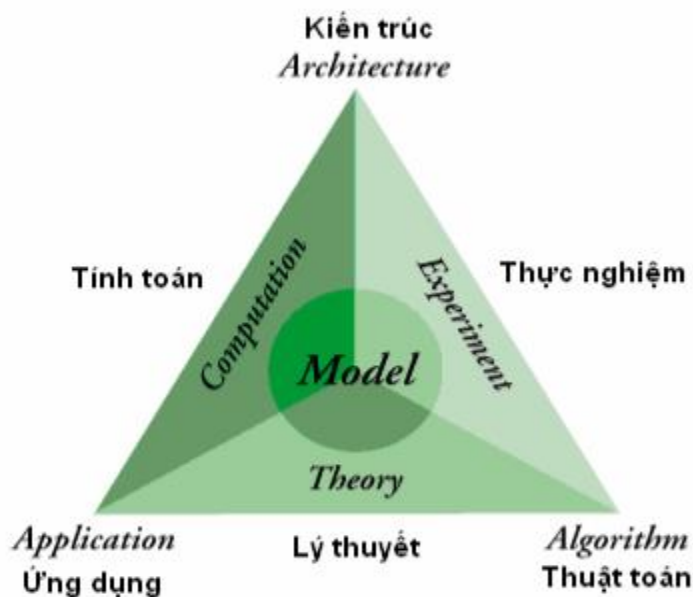
❖ Mô hình cần thể hiện các đặc trưng sau:

_Mô hình cần được tối giản với một số giả định đặt ra

_Điều kiện biên hoặc điều kiện ban đầu cần định danh

_Mức độ khả năng ứng dụng của mô hình có thể xác lập được

Mô hình thường áp dụng theo kiểu khung khái quát theo ngành khoa học tính toán, mang tên là 3A, viết tắt từ 3 chữ Application (ứng dụng), Algorithm (thuật toán), và Architecture (kiến trúc) theo hình vẽ sau:



Hình 2.1 Khái quát mô hình theo khoa học tính toán

Ba phần cơ bản của mô hình là:

(1) Ứng dụng mô hình (Application of a model): Mục tiêu của việc sử dụng mô hình là chỉ ra việc ứng dụng của nó. Xác định phạm vi ứng dụng nói lên tầm quan trọng của mô hình trong thực tiễn. Ví dụ ứng dụng mô hình giúp ta xác định thông tin có bao nhiêu đạm ammonia chuyển thành đạm nitrogen trong không khí, hoặc có bao nhiêu lượng nước chảy tràn trên mặt đất sau một trận mưa bão. Nói cách khác, ứng dụng mô hình giúp ta trả lời câu hỏi: Đây là những gì ta muốn mô phỏng, bây giờ ta sẽ làm việc mô phỏng đó bằng cách nào?

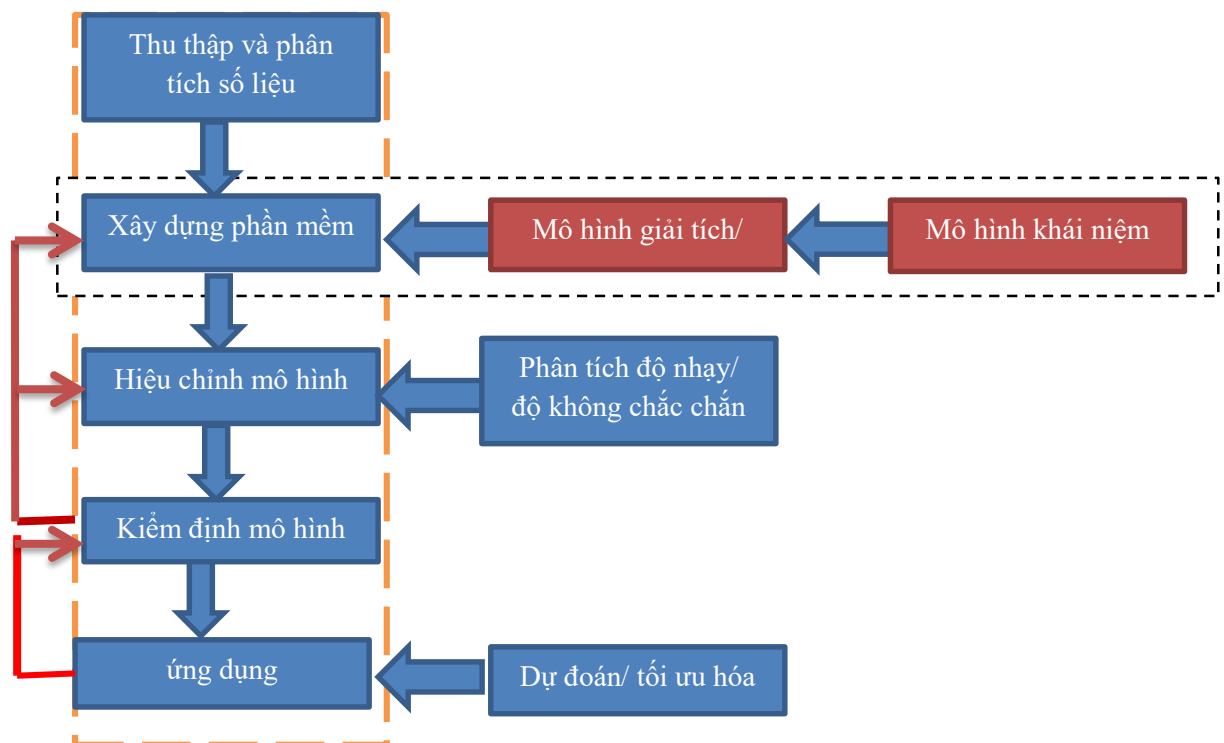
(2) Thuật toán mô hình (Algorithm of a model): Thuật toán mô hình cho ta biết cách tiếp cận kỹ thuật tính toán hay phương pháp tính, liên quan đến các phương trình, các thông số mà chúng ta muốn đưa vào chứng trình máy tính.

(3) Kiến trúc mô hình (Architecture of a model): Kiến trúc hay cấu trúc mô hình xác định kiểu hình nào mà mô hình sẽ sử dụng, loại máy tính nào, chương trình nào sẽ được sử dụng các thông tin để xử lý.

_Việc áp dụng mô hình toán học giúp giải quyết các khó khăn trong thực tế như:

- + Sự kiện xảy ra quá nhanh (như các phản ứng phân tử trong hóa học);
- + Sự kiện xảy ra quá chậm (như sự phát triển động học dân số hoặc quần thể);
- + Các thực nghiệm đắt tiền khi làm ở phòng thí nghiệm (như mô hình hầm gió);
- + Các thực nghiệm rất nguy hiểm (thực nghiệm vụ nổ nguyên tử).

II.2 CÁC BƯỚC XÂY DỰNG MÔ HÌNH



Hình 2.2 Các bước xây dựng mô hình

Bước 1 Xác định khu vực cần nghiên cứu và phân tích số liệu

Bước 2 Xây dựng phần mềm, trong xây dựng phần mềm thì đầu tiên xây dựng được mô hình khái niệm, sau đó xây dựng mô hình giải tích (mô hình số)

Bước 3 Hiệu chỉnh mô hình

Bước 4 Kiểm định mô hình

Bước 5 Dự đoán, tối ưu hóa

❖ Giải thích các bước mô phỏng mô hình

Bước 1 Thu thập số liệu và phân tích dữ liệu

_Để thu thập và phân tích số liệu cần phải xác định được loại số liệu cần thu thập (ví dụ như lưu lượng, mực nước hay các thông số chất lượng nước).

_Xác định bước thời gian.

_Xác định độ dài của chuỗi số liệu.

_Xác định thời điểm thu thập số liệu.

_Đánh giá mức độ tin cậy, khả năng xuất hiện lại của số liệu thu thập.

Mục đích của thu thập số liệu

+ Cho điều kiện ban đầu

+ Cho điều kiện biên

+ Hiệu chỉnh mô hình

+ Kiểm định mô hình

Chú ý: Tùy loại mô hình thì dữ liệu đầu vào khác nhau.

Bước 2 Xây dựng phần mềm

Để xây dựng phần mềm cần phải xác định được quy mô của vùng cần mô phỏng, chọn lựa loại mô hình và so sánh. Phần mềm thường được xây dựng như sau:

_Xây dựng mô hình khái niệm:

+ Mô hình khái niệm là một dạng ý tưởng hóa nhằm tối giản những yếu tố phức tạp ngoài thực tế ở dạng lưu đồ hoặc sơ đồ.

+ Mô hình khái niệm phải thể hiện dễ hiểu tạo cho những người không phải là chuyên gia hiểu được mục tiêu mô hình.

_Xây dựng mô hình số/ giải tích

+ Mô hình giải tích/ mô hình số là một loạt các phương trình toán học diễn tả các mối quan hệ giữa thông số và biến số, từ mô hình khái niệm đã thể hiện dưới dạng sơ đồ hoặc lưu đồ.

+Đây là phần cốt lõi và quan trọng nhất và là phần phức tạp trong tiến trình thực hiện mô hình toán.

+Kết quả của mô hình số/ giải tích là bộ số liệu hay đồ thị.

_Xây dựng mô hình toán

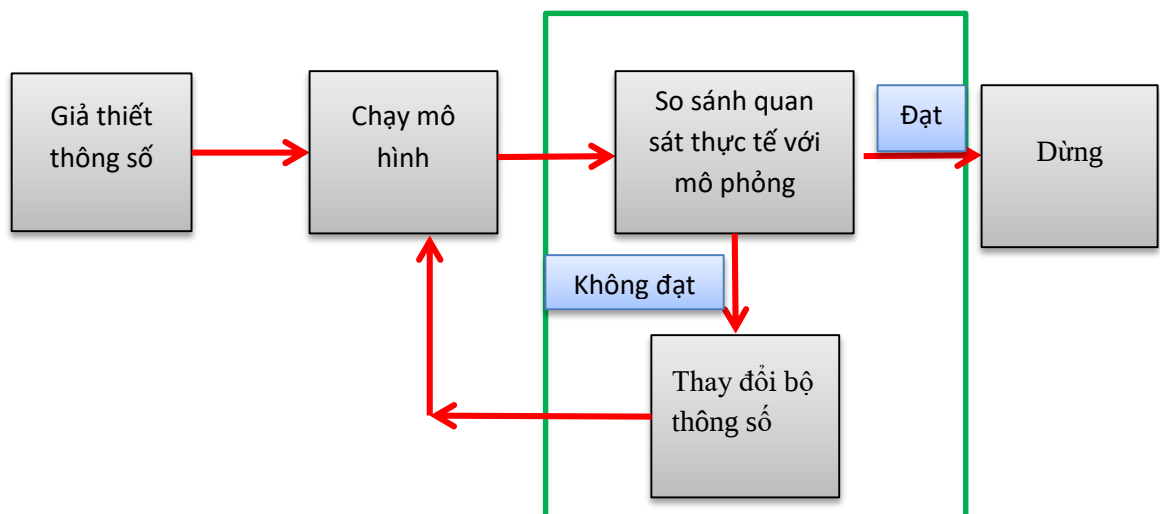
Sau khi đã xây dựng mô hình số xong thì sau đó dùng những mô hình toán xây dựng phần mềm. Các mô hình toán như: Mô hình tất định_ Mô hình ngẫu nhiên; mô hình liên tục_ mô hình rời rạc; mô hình tĩnh_ mô hình động, mô hình hộp trắng, mô hình hộp đen, mô hình xám. Khi chọn mô hình toán, cần xác định là tự chọn ngôn ngữ lập trình để xây dựng mô hình hay chọn mô hình có sẵn ngoài thị trường. Các ngôn ngữ lập trình thường được sử dụng như là C++, C, Fortan, Java, vv.

Bước 3 Hiệu chỉnh mô hình

Hiệu chỉnh mô hình (calibration) là tiến trình mà trong đó các thông số và biến số của mô hình được điều chỉnh để kết quả mô hình phù hợp với thực tế quan sát được. Kết quả hiệu chỉnh mô hình là một bộ thông số.

_Trường hợp hiệu chỉnh mô hình không thỏa:

- +Kiểm tra độ nhạy của thông số, chỉ ra thông số chính mà mình cần hiệu chỉnh.
- + Hiệu chỉnh bộ thông số lại nhiều lần, nếu vẫn không được thì thay đổi bộ thông số.
- +Ngoài ra , cần xem số liệu đầu vào thu thập được
- + Nếu số liệu đầu vào không có vấn đề, thì phải xem lại mô hình khái niệm.
- + Nếu số liệu đầu vào thiếu hay không có số liệu, nếu chúng ta có đủ thời gian và kinh phí thì thu tự đi thập số liệu.



Bước 4 Kiểm định mô hình

Kiểm định mô hình (verification) là mô hình tiếp theo sau của hiệu chỉnh nhằm kiểm tra các thông số mô hình đưa ra có phù hợp với thực tế hay không.

_Trường hợp kiểm định không thỏa

+Tiếp tục hiệu chỉnh lại các thông số trong mô hình đến khi thỏa.

+Dùng bộ số liệu khác nữa để kiểm nghiệm lại mô hình

Bước 5 Tiên đoán và tối ưu

Mục đích của người sử dụng mô hình là có thể tiên đoán diễn biến những hiện tượng trong tương lai bằng cách tạo ra nhiều kịch bản. Ứng dụng trong quy hoạch, quản lý.

II.3 MÔ PHỎNG

Mô phỏng là tạo dựng các hình ảnh hoặc sự vật thu nhỏ hoặc tương tự, bắt chước theo thực tế để mô tả sự kiện cũng như tạo ra các kịch bản biến đổi lượng và chất theo thời gian nhằm tiên đoán và dự báo trong tương lai.(Lê Anh Tuấn, 2008).

II.4 ỨNG DỤNG

Ứng dụng là áp dụng các nguyên lý vật lý và toán học vào thực tiễn để mô phỏng các diễn biến thực tế trong tự nhiên và đưa ra các dự báo cần thiết.

II.5 GIẢI THÍCH THUẬT NGỮ

_Hệ Thống là tập hợp các phần tử có hệ quan hệ hữu cơ với nhau, tác động chi phối lẫn nhau theo quy luật nhất định để trở thành một chỉnh thể. Từ đó xuất hiện các thuộc tính mới gọi là tính trội của hệ thống mà từng phần tử riêng lẻ không có hoặc không đáng kể.

_Hệ thống thủy văn (hydrological system) là hệ thống các thành phần liên quan đến nhau, bao gồm các quá trình của lượng mưa, bốc hơi, hơi nước, xâm nhập, lưu lượng nước ngầm, dòng chảy,vv, ngoài ra còn có những cấu trúc và thiết bị được sử dụng và quản lý hệ thống. Hệ thống thủy văn là tùy thuộc vào các khái niệm khác nhau của mô hình thời tiết phức tạp theo không gian, thời gian, và là động và ngẫu nhiên trong tự nhiên.

_ Thông số (parameter) là đặc trưng số lượng của hệ thống thủy văn..Thông số của hệ thống không hay đổi theo thời gian trong điều kiện các nhân tố ảnh hưởng đến hệ thống ổn định. Đặc tính của hệ thống có thể biểu thị qua nhiều thông số khác nhau.(Nguyễn Hữu Khải, 2003).

Theo Lê Anh Tuấn (2008), thông số (parameter) là những hệ số gia trọng, không có thứ nguyên.

_Biến số (variable) là các đại lượng vật lý có ý nghĩa, thường có thứ nguyên. (Lê Anh Tuấn, 2008)

_Hiệu chỉnh (calibration) là tiến trình mà trong đó các thông số và biến số của mô hình được điều chỉnh để kết quả mô hình phù hợp với thực tế quan sát được.

_Kiểm nghiệm (verification) là mô hình tiếp theo sau của hiệu chỉnh nhằm kiểm tra các thông số mô hình đưa ra có phù hợp với thực tế hay không.

_Tính không chắc chắn (uncertainty) khi chuỗi số liệu quá ngắn thì sẽ tạo ra những giá trị không chắc chắn ảnh hưởng lớn đến việc hiệu chỉnh thông số.

_Tối ưu hóa thông số (optimization) kỹ thuật này áp dụng kết quả tính toán chưa đạt yêu cầu chương trình tự động điều chỉnh tạo ra những thông số mới bằng cách kết hợp trị vừa tính toán và sai biệt thống kê.

_Dự báo (forecast) là một ngành khoa học và nghệ thuật tiên đoán những sự việc xảy ra trong tương lai, trên cơ sở phân tích khoa học về các dữ liệu đã thu thập.

_ Projection Error: Sự khác biệt giữa các con số ước tính và con số thực tế.

II.6 LỊCH SỬ PHÁT TRIỂN

II.6.1 LỊCH SỬ PHÁT TRIỂN MÔ HÌNH

Từ xa xưa vào thời tiền sử con người đã nghĩ rằng có thể tạo ra một mô phỏng tối giản để phát họa những hình ảnh khuôn dạng người để có một sắp xếp xem xét sự tiến hóa của các nhóm vách hang đá cho ta hình dung nền văn hóa người Cổ Cận Đông và Cổ Hy Lạp. Một trong các mô hình đầu tiên được công nhận là các con số, số điểm và số viết được ghi lại trên các mảnh xương đã được tìm thấy vào khoảng 30.000 năm trước Công Nguyên. Ngành thiên văn và kiến trúc đã để lại ghi chép mô hình các vì sao, công trình nhà cửa từ 4.000 năm trước Công Nguyên. Vào khoảng 2.000 năm trước Công Nguyên, ít nhất ba nền văn minh Babylon, Ai Cập và Ấn Độ đã biết cách sáng tạo và phát triển các bài toán và ứng dụng “ mô hình toán “ trong cuộc sống thường nhật của họ. Phần lớn các bài toán của họ là các thuật toán được đề xuất để giải các vấn đề đặc biệt.

Tương tự, ở Việt Nam các hình ảnh để lại trên trống đồng Đông Sơn cho chúng ta nghĩ đến một mô phỏng các điệu múa, y phục và các sinh hoạt săn bắn của người Việt Cổ trong khoảng thời gian từ thế kỉ thứ 6 đến thế kỉ thứ 7 trước Công nguyên. Sự phát triển của ngành triết học trong thời kỳ văn minh Hy Lạp (Hellenic Age) (khoảng 600 năm trước công nguyên) đã kết hợp với toán học dẫn đến phương pháp suy diễn (deductive method) sau đó trở thành một phần quan trọng trong lý thuyết toán học. Trong thời kỳ này hình học đã bắt đầu hình thành và phát triển. Nhà toán học Thales đã áp dụng hình học để tiên đoán hiện tượng nhật thực (solar eclipse) vào năm 585 trước Công Nguyên. Thales cũng đã phát minh ra cách đo chiều cao một vật thể bằng cách đo chiều dài của vật thể bằng cái bóng của vật thể in trên nền đất. Vào khoảng năm 250 trước Công Nguyên. Euclid đã dùng một mô hình toán học hình học để tìm khoảng cách từ trái đất đến mặt trời vào khoảng cách từ trái đất đến mặt trăng. Ông cũng tính được chu vi của trái đất. Ngành thiên văn học cổ cũng đã tạo ra các mô hình để diễn tả các vì sao trong thái dương hệ. Các nhà kiến trúc khi xây dựng công trình cổ xưa ở Trung Hoa, Ấn Độ, các nước theo đạo Hồi đã để lại những chứng tích

các mô hình đèn đài, công trình thu nhỏ như là những phương pháp tương tự (similar method), một hình thức của mô hình tỷ lệ, trước khi xây dựng các công trình thực. Các nền văn minh ở châu Á cũng chứng tỏ sự phát triển mô hình vật lý đi song song với các mô hình toán học trong các công trình kiến trúc của họ .

Từ thế kỉ 20 trở đi , song song với sự phát triển của ngành toán học, vật lý, đặc biệt là sự ra đời của máy tính điện tử đã thúc đẩy sự phát triển nhanh chóng của thuật toán mô hình. Nhiều công ty phần mềm chuyên sản xuất ra các công cụ mô hình phục vụ cho nhiều lĩnh vực từ khoa học kỹ thuật, kinh tế, môi trường, khí tượng, thủy văn, quản lí hành chính đến các lãnh vực quan hệ xã hội,vv. Có thể nói, ngày nay kỹ thuật mô hình đang càng ngày chứng tỏ vai trò trong việc tạo điều kiện cho con người hiểu biết sâu hơn về thế giới của mình mà còn tiên toán những tình thế có khả năng xảy ra trong tương lai.

II.6.2 LỊCH SỬ MÔ HÌNH HÓA VỀ MÔI TRƯỜNG

Mô hình là quá trình áp dụng các kiến thức cơ bản và kinh nghiệm để mô phỏng các hệ thống thực để đạt mục tiêu theo mục đích người sử dụng. Mô hình là bức tranh đơn giản từ hệ thống thực tế, nó giúp giải quyết nhiều vấn đề, giúp cho các nhà khoa học, nhà quản lý đưa ra đề xuất hợp lý. Trong những thập niên gần đây, với tốc độ quá trình công nghiệp hóa, đô thị hóa,vv gây ảnh hưởng môi trường nghiêm trọng. Các nhà khoa học, nhà quản lý đang gặp khó khăn phải đối đầu ứng phó, giải quyết hàng loạt các vấn đề ô nhiễm gây ảnh hưởng đến sức khỏe cộng đồng. Do đó, cần xây dựng mô hình để mô tả hệ thống tự nhiên với các yếu tố đặc trưng, mà để xây dựng được các mô hình môi trường, thì phải hiểu được các bản chất hệ thống tự nhiên và áp dụng phương trình toán học như đại số, phương trình vi phân, các công thức vật lý theo các từng trường hợp cụ thể. Vì vậy, xây dựng mô hình về môi trường là một công việc đầy áp lực, đầy thử thách cho các nhà quản lý và khoa học về môi trường.

Trong những năm gần đây với sự phát triển công nghệ thông tin, thì có nhiều mô hình toán về môi trường được xuất hiện đang đáp ứng được nhu cầu hiện tại ví dụ các mô hình chất lượng nước(MHCLN), mô hình chất lượng nước được ứng dụng rất rộng rãi trong các lĩnh vực : dự báo ô nhiễm, đánh giá xu thế biến đổi chất lượng nước, khai thác sử dụng hợp lý nguồn nước và làm cơ sở khoa học cho việc bảo vệ tổng hợp nguồn nước.Với các mục đích nghiên cứu, mô phỏng trên các đối tượng khác nhau nên các MHCLN rất phong phú và đa dạng. Theo hướng dẫn của ngân hàng thế giới (WB) trong lĩnh vực ngăn ngừa và giảm thiểu ô nhiễm đối với các dự án phát triển và các ứng dụng trong thực tiễn trên thế giới cũng như nước ta trong vài năm gần đây, thường sử dụng các phần mềm sau để tính toán mô phỏng chất lượng nước :

_Mô hình HSPF (Hydrological Simulation Program Fortran (USEPA) (1984). Mô phỏng trong không gian 2 chiều ở trạng thái động lực với các thông số chất lượng nước: các chất hoà tan, SS, DO, các chất dinh dưỡng và các loại vi khuẩn chỉ thị. Dự báo xu thế thay đổi

chất lượng nước trong dòng chảy sau các trận mưa và các thông tin về việc thu nước ở các kênh.

_Mô hình SWMM (Storm Water Management Model)

Phát triển trên cơ sở mô hình HSPF, tính toán xu thế biến đổi chất lượng nước cho cả một lưu vực sông với các nguồn thải không điểm. Mô hình SWMM là mô hình 1 chiều với trạng thái động lực mô phỏng sự chảy tràn nước mưa qua các vùng đất nông nghiệp và các khu vực đô thị với các thông tin về dòng chảy của các hệ thống thu gom nước.

_Mô hình WAPS (USEPA) Ghép nối mô hình thủy lực (DYNHYD) với mô hình lan truyền chất (WAPS), mô phỏng sự lan truyền và chuyển hóa các chất ô nhiễm trong dòng chảy. Tùy theo mục đích, số liệu đầu vào và các thông tin cơ sở về các quá trình chuyển hóa các chất trong dòng chảy, có thể sử dụng để tính toán ở các dạng đơn giản, cải tiến hay phức tạp.

_Hệ thống MIKE

Trong những năm 1990, viện thủy lực Đan mạch đã thiết lập hệ thống mô hình chất lượng nước cho kênh, sông. Hệ thống này có thể tính toán sự lan truyền, vv.

Tóm lại: Để giải quyết các vấn đề về môi trường thì cần mô hình toán để mô phỏng, dự đoán xu thế từ đó đưa ra các phương án hợp lý. Và, lĩnh vực của mô hình hóa môi trường đã phát triển rất nhanh chóng trong 2 thập kỷ qua do sự phát triển của công nghệ thông tin, cho phép chúng ta xử lý những phép tính toán rất phức tạp như tính toán các phương trình toán học, vật lý với độ tin cậy cao. Nhưng yêu cầu đặt được đặt ra cho người các chuyên viên môi trường, thì phải có kiến thức sâu rộng về hệ thống hệ thống tự nhiên và hiểu được vấn đề áp dụng đúng phương trình toán học như đại số, phương trình vi phân theo các từng trường hợp cụ thể.

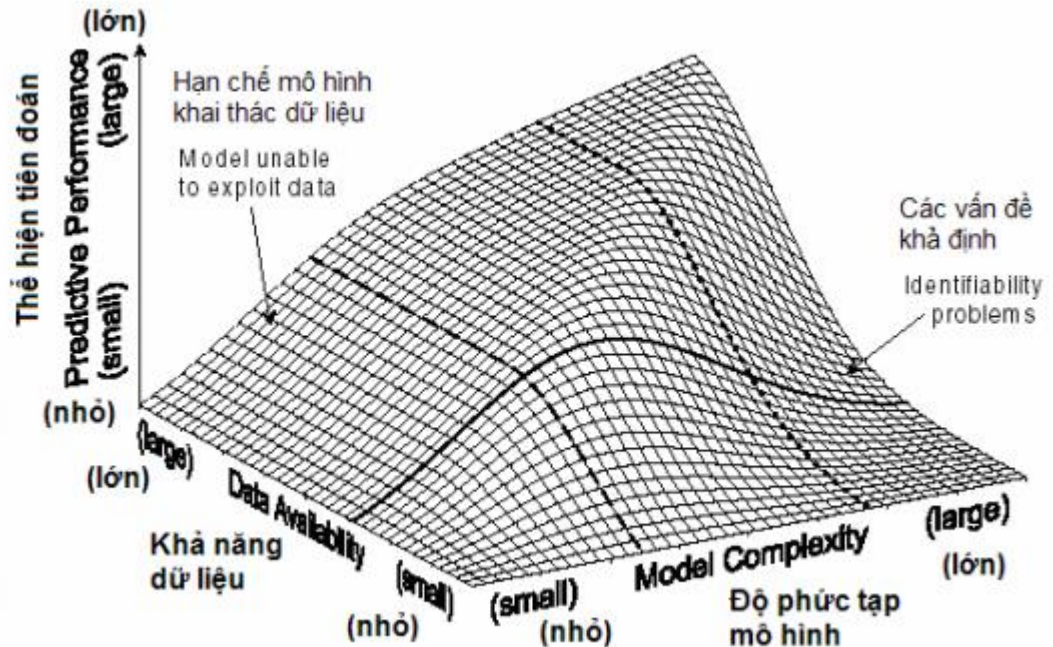
CHƯƠNG III LÝ THUYẾT VỀ LỰA CHỌN, HIỆU CHỈNH VÀ KIỂM ĐỊNH MÔ HÌNH

III.1 TIÊU CHUẨN LỰA CHỌN MÔ HÌNH

III.1.1 KHÁI NIỆM

Mỗi mô hình thường có các ưu điểm và các nhược điểm nhất định. Không thể có một mô hình chuẩn mực nào cho tất cả các trường hợp thực tế. Điều này gây ra sự bối rối cho người sử dụng khi phải lựa chọn mô hình phù hợp cho mình. Khái niệm mô hình tốt nhất thường được hiểu một cách tương đối. Về nguyên tắc, mô hình càng phức tạp, dữ liệu nhập vào càng nhiều thì kết quả thể hiện mô hình càng cao.

⇒ Phụ thuộc vào mục đích sử dụng mô hình



Hình 3.1. Biểu đồ minh họa quan hệ giữa độ phức tạp của mô hình, mức đòi hỏi của dữ liệu và khả năng thể hiện kết quả tiên đoán của mô hình (Grayson and Bloeschl, 2000)

III.1.2 MÔ HÌNH TỐT NHẤT

Mô hình tốt nhất: tùy thuộc vào cách hiểu tiêu chuẩn nào là tốt nhất → tùy thuộc vào mức chính xác của yêu cầu khoảng thời gian quan trắc.

VD: Thời đoạn lấy mẫu nước theo giờ, ngày, tháng hoặc mùa. Chuẩn tốt nhất còn tùy theo mức độ dày mật của kích thước không gian mẫu. Khoảng cách càng nhỏ thì mức chính xác càng cao. Theo Woolhiser và Brakensiek (1982), việc chọn lựa mô hình tốt nhất còn tùy thuộc vào độ lớn về kích thước tự nhiên của bài toán và sự phức tạp trong thay đổi các biến số

⇒ **Đặc điểm của mô hình phải tương thích với yêu cầu của bài toán.**

III.1.3 LỰA CHỌN MÔ HÌNH

III.1.3.1 CHỌN MÔ HÌNH THEO CẤU TRÚC VÀ GIÁ TRỊ VÀO/ RA

_Sự khái quát hóa các tiến trình chủ yếu: Mô hình phải phản ánh “ý tưởng” đúng theo thực tế liên quan đến các tiến trình chính. Sơ đồ khái quát phải thể hiện được các bộ phận cấu thành diễn biến theo một tiến trình mang tính lý thuyết.

_Mức độ chính xác cho việc tiên đoán, dự báo: ở kết quả đầu ra rất quan trọng. Mô hình phải được kiểm nghiệm sao cho sai số thống kê và những yếu tố không chắc chắn đạt được một chất lượng nhất định. Mô hình phải tối thiểu hóa thể xu hướng và biến sai số phải xem

là nhỏ hơn các tính toán khác. Mức chính xác của dữ liệu nhập vào quan trọng hơn mức chính xác của dự báo của mô hình.

_Tính đơn giản của mô hình: nhằm giảm bớt các biến số và thông số để mô tả tiến trình. Mô hình cũng cần tạo sự dễ dàng cho việc nhập dữ liệu, hiểu rõ các biến số và kết quả ra có thể giải thích được; tránh sự thô kệch, rườm rà làm việc xử lý trở nên khó khăn, phức tạp và sai số lớn.

_Xem xét việc thành lập các thông số: quan trọng trong việc phát triển các mô hình khái niệm sử dụng các thông số được thành lập từ các kỹ thuật tối ưu hóa. Nếu các giá trị tối ưu của thông số có độ nhạy cao theo thời kỳ ghi nhận, hoặc nếu các thông số có sự biến động lớn giữa các lưu vực tương tự, mô hình có nhiều khả năng thiếu hiện thực. Việc xem xét sự thành lập các thông số cũng hàm ý rằng các nhà nghiên cứu về mô hình khác nhau nên dựa theo việc xem xét các giá trị thông số từ việc quan trắc thực tế hoặc từ việc thực hành hiệu chỉnh.

_Độ nhạy của kết quả đến sự thay đổi giá trị thông số: Mô hình quá nhạy cảm sẽ dẫn đến cần nhiều giá trị nhập vào, gây khó khăn khi đo đạc.

_Các giả định (assumption): nên chứa ít giả định nếu không sẽ tạo nên việc giới hạn sử dụng mô hình và làm các thông số nhạy cảm hơn.

_Tiềm năng cho việc cải tiến mô hình: Cải tiến mô hình dễ dàng khi có các thông tin mới hoặc có các thủ tục bổ sung.

III.1.3.2 CHỌN MÔ HÌNH THEO VẤN ĐỀ THỰC TẾ

_Điều kiện tự nhiên của mô hình: phải đáp ứng các vấn đề thực tế phải giải quyết.

VD: các đầu ra mong muốn có thể là lưu lượng đỉnh, nồng độ chất ô nhiễm theo bước tính là giờ, ngày, tuần cho mục đích thiết kế hoặc vận hành.

_Chọn mô hình trọn gói hay là mô hình theo yêu cầu: Mô hình trọn gói (thiết kế cho tổng thể các trường hợp) thường dễ sử dụng nhưng thiếu mềm dẻo vì bị hạn chế sử dụng. Nó thường sử dụng khi gặp các tình huống ít có hơn số tình huống ban đầu. Mô hình theo yêu cầu là mô hình mà ta có thể đặt hàng cho những chuyên gia phát triển mô hình làm riêng cho một trường hợp nào đó. Nó giúp ta giải quyết đúng vấn đề thực tế cần thiết nhưng tốn kém thời gian, tiền bạc.

_Bài toán liên quan đến giá trị quyết định: khi tính toán khả năng tài chính, tài nguyên, cũng như tổn thất tiềm năng về sinh mạng, tài sản ứng với một tần suất xuất hiện nào đó.

_Khả năng khung thời gian: Tùy thuộc vào thời hạn chót phải hoàn tất dự án, kể cả thời gian (và chi phí) thu thập thông tin vào.

_Các thiết bị tính toán: phần cứng máy tính và các loại mô hình và độ phức tạp của mô hình

_Ứng dụng trong tương lai của phần xuất mô hình: dự kiến cho các lần sử dụng sau.

_Tính tổng hợp của mô hình: xem mô hình có khả năng giải quyết nhiều mục tiêu, có tầm ứng dụng rộng và dự kiến các khả năng sử dụng về sau.

_Cách truy cập mô hình, tài liệu hướng dẫn và dự phòng: xem xét nhà cung cấp có tạo các dễ dàng cho người sử dụng truy cập, hỗ trợ, huấn luyện bước hướng dẫn, trả lời các gút mắc, có công cụ lưu dữ liệu dự phòng,...

_Khả năng nguồn nhân lực: nên xem nguồn nhân lực khi trang bị mô hình tính toán, huấn luyện nhân viên chưa có kinh nghiệm.

_Cách thể hiện mô hình: độ chính xác của kết quả, tính ổn định, độ nhạy, cách thể hiện đồ thị ở phần xuất.

_Tính thân thiện cho người sử dụng: mô hình có dễ dàng giúp người sử dụng nhập dữ liệu, chọn kiểu xuất kết quả, giao diện, kiểu đồ thị, bảng kết quả thống kê.

_Xem xét quy mô: quy mô không gian mô hình sử dụng có tương thích với việc khái niệm và cấu trúc của vấn đề.

III.1.4 ĐÁNH GIÁ VIỆC CHỌN LỰA

Để đánh giá việc lựa chọn thì chúng ta phải trả lời các câu hỏi, với đáp án hợp lý:

_Các thông tin mà mô hình cung cấp có thực sự theo yêu cầu của bài toán không?

_Các đặc trưng vật lý thể hiện qua các thông số của mô hình có thực sự đáp ứng việc ứng dụng trong thực tế không?

_Các phương trình sử dụng trong cấu trúc mô hình có đúng với thuật toán hiện đại phù hợp với dữ liệu và thiết bị máy tính không?

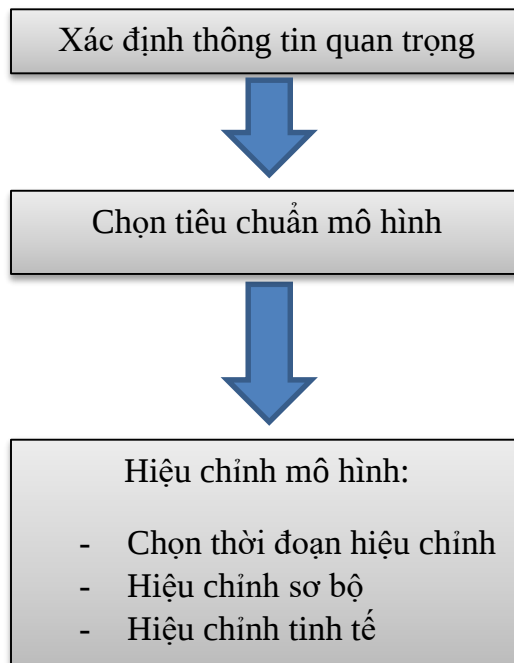
_Các kết quả mà mô hình cung ứng có chất lượng tốt tương xứng chi phí theo một thời gian đặc thù nào không?

III.2 HIỆU CHỈNH MÔ HÌNH

III.2.1 KHÁI NIỆM

Hiệu chỉnh (calibration) là tiến trình mà trong đó các thông số và biến số của mô hình được điều chỉnh để kết quả ra của mô hình phù hợp với thực tế quan sát được. Hiệu chỉnh là công việc nhằm rút ngắn các khoảng cách sai biệt bằng cách đưa ra các thông số điều chỉnh gọi là thông số mô hình (model parameters).

III.2.2 CÁC BƯỚC TRONG TIẾN TRÌNH HIỆU CHỈNH



Bước 1: Bước xác định thông tin quan trọng: Cần xác định thông tin gì là quan trọng mà mô hình có định áp dụng. Việc này phải trên cơ sở là xem các thông số nào trong mô hình sẽ quyết định kết quả này có khả năng phù hợp hoặc thỏa mãn với các diễn biến ở thực tế.

Bước 2: Bước chọn tiêu chuẩn mô hình

Xác định mục tiêu đặc thù mà mô hình cần nghiên cứu. Khi phát triển mô hình, các đích nhắm mà chúng ta muốn mô hình thể hiện bao gồm những yếu tố nào. Các yếu tố này cần được định lượng qua đo đạc thực tế và tính toán từ mô hình. Việc định lượng liên quan đến các tiêu chuẩn thống kê mà mô hình phải thỏa mãn.

Bước 3: Bước hiệu chỉnh mô hình

_Chọn thời đoạn hiệu chỉnh: xem xét tổng thời gian quan trắc và chia khoảng thời gian này làm 2 thời đoạn: thời đoạn thứ nhất với chuỗi số liệu dài hơn để làm Hiệu chỉnh và thời đoạn thứ hai ngắn hơn để làm kiểm nghiệm. Một số trường hợp, người ta có thể chia đều hai thời đoạn. Việc lựa chọn thời đoạn hiệu chỉnh để chạy bài toán mô hình cần phải theo mục tiêu vấn đề là cần kết quả đầu ra của mô hình.

_Hiệu chỉnh sơ bộ: là bước thử ban đầu để xem thử các thông số mô hình đã cho có “nhảy” với kết quả mô hình hay không? Việc hiệu chỉnh sơ bộ theo bảng hướng dẫn của mô hình hoặc từ quan sát thực tế. Đây là một bước bắt buộc nhằm định lại:

+ Giá trị ban đầu thực tế cho các thông số.

+ Chiều dài “lý tưởng” để mô hình tìm kiếm giá trị tốt nhất của thông số. Nếu bước tính quá ngắn sẽ làm tăng số lần tính toán, bước tính quá dài tạo ra sự vượt quá hay cường điệu hóa khi tìm giá trị tối ưu.

+ Thử xác định khoảng giới hạn (trên và dưới) của các thông số nhằm giới hạn sự thất bại của mô hình khi tạo ra các giá trị phi thực tế hay vượt quá thực tế.

_Hiệu chỉnh tinh tế: làm nhuễn ở mức chi tiết các kết quả ở đầu ra qua điều chỉnh vi cấp (fine tuning) các thông số mô hình.

III.2.3 CÁC TIẾP CẬN HIỆU CHỈNH

III.2.3.1 TIẾP CẬN TIỀN NHIỆM

_Những giá trị ban đầu của thông số mô hình được suy ra từ đo đạc thực tế hoặc từ một tính chất nào đó của sự việc, hoặc được thành lập do thực nghiệm.

_Giả định rằng mô hình là xác định và các thông số có ý nghĩa về vật lý; từ đó mô hình đang tạo ra các mô phỏng tốt cho những lý do đúng đắn.

_Khả thi về mặt lý thuyết nhưng cần số liệu khá lớn cho các mô hình xác định. Đối với các lưu vực nghiên cứu nhỏ, các tiếp cận này bị giới hạn và đôi khi không thực hiện được.

III.2.3.2 TIẾP CẬN PHÙ HỢP ĐƯỜNG CONG

_Các thông số mô hình cũng có thể được suy ra bởi cách tiếp cận phù hợp đường cong, hay còn gọi là độ phù hợp. Cách tiếp cận này liên quan đến việc tìm các thông số sẽ bảo đảm mức gần kính tương ứng giữa các đặc trưng đặc thù của các chuỗi thời gian tính toán và các giá trị quan trắc tương ứng. Đây là một tiến trình tối ưu hóa thông số (parameter optimization). Trong cách tiếp cận này, tiêu chuẩn độ phù hợp theo thống kê được áp dụng để xác định mức gần gũi của các biến số trong chuỗi thời gian theo quan trắc và mô hình tương ứng.

_Có hai phương pháp cơ bản để có các thông số mô hình tối ưu khi hiệu chỉnh bằng phương pháp phù hợp đường cong, đó là theo cách thủ công và cách tự động. Một biến đổi tối ưu hóa theo cách thủ công còn được gọi là tiến trình lặp lại được phân mảnh (segmented iterative procedure).

_Tối ưu hóa theo kiểu thủ công (Manual optimization): Theo cách này các giá trị của một thông số tính toán tại một thời điểm tương ứng với giá trị quan trắc được thử sai (trial and error) sao cho dần dần phù hợp với đường cong. Phương pháp thủ công điều chỉnh các thông số riêng rẽ sẽ mất nhiều thời gian, nhất là các mô hình đa thông số mà trong đó các thông số sẽ tương tác cao độ lẫn nhau. Phương pháp này đòi hỏi người làm mô hình phải hiểu rõ cách cấu trúc và sự vận hành của mô hình.

_Tiến trình lặp lại được phân mảnh: đối với các mô hình có nhiều hơn 5 thông số thì nên thực hiện cách tiếp cận theo cách này:

+ Đầu tiên, tất cả các thông số liên quan đến một tiến trình đặc thù nào đó được tối ưu hóa cùng nhau bằng cách định khoảng giá trị chặn trên và chặn dưới để tìm thông số mô hình phù hợp nhất cho phép biến đổi, các thông số khác được giữ nguyên. Mảng giá trị thông số đã hiệu chỉnh cải tiến sẽ được xác định và giữ lại như một hằng số cho bước kế tiếp.

+ Tương tự ở bước thứ hai, mảng thông số khác trong tiến trình sẽ được biến đổi phù hợp với mô hình.

+ Từng nhóm một của thông số liên quan đến tiến trình đặc thù nào đó sẽ tiếp tục tiến trình tìm giá trị tối ưu lần lượt cho đến khi tất cả thông số được tối ưu hóa. Trong đó, có thể người làm mô hình phải trở lại bước thứ nhất hoặc thứ hai/ba nào đó khi việc tối ưu hóa bị trở ngại.

+ Tiến trình tìm các giá trị tối ưu cho từng mảng thông số được lặp lại cho đến khi có một chuỗi các thông số tối ưu toàn thể.

_Tối ưu hóa tự động (tối ưu hóa mục tiêu): được áp dụng ở một số mô hình hóa theo cách chọn lựa đường phù hợp theo tiêu chuẩn thống kê. Kỹ thuật này áp dụng khi kết quả tính toán thống kê chưa đạt yêu cầu thì chương trình tự động điều chỉnh tạo ra thông số mới bằng cách kết hợp giá trị vừa tính toán và sai biệt thống kê. Cách tiếp cận này làm cho các thông số dần dần tiếp cận đến mục tiêu tối ưu nhưng cũng nhiều lúc gặp bất trắc do sự phán đoán phi tuyến không hợp lý. Tiến trình này đưa đến việc giảm bớt việc dựa vào cách phân mảng chủ quan của người làm mô hình. Tối ưu hóa tự động có thể tạo nên một tiến trình hiệu chỉnh nhanh hơn một cách có ý nghĩa.

- Một số nhà nghiên cứu mô hình khuyến cáo là không thể có một thuật toán duy nhất để tạo ra một loạt các thông số tối ưu cho các mô hình khác nhau. Việc tiếp cận nhiều thuật toán tối ưu kết hợp là nên làm.

III.2.4 CÁC VẤN ĐỀ TRONG BỘ THÔNG SỐ

_Vấn đề khi thành lập thông số:

+ Sai số khi dùng giá trị trung bình hoặc một hệ số đặc trưng nào đó của các biến số như nồng độ chất ô nhiễm, các chất ô nhiễm lan truyền không đồng nhất.

+ Thay đổi các thông số thủy văn do thay đổi đặc điểm vật lý lưu vực.

+ Sai số do kỹ năng chọn lựa không thích hợp và hiệu chỉnh các thông số mô hình của người sử dụng mô hình.

+ Sai số khi đưa thêm các hệ số hiệu chỉnh lại sự biến đổi của đặc điểm không gian môi trường nhằm đối phó với hạn chế khả năng đo đạc chính xác hoặc phỏng đoán các giá trị thông số.

+Khi lấy những biến số độc lập đối lập với kết quả đầu ra của mô hình để thử nghiệm khi hiệu chỉnh mô hình thì các thông số có thể không mang tính đại diện một cách tiêu biểu cho toàn lưu vực.

+Kỹ thuật lấy mẫu và đo đạc ngoài hiện trường và trong phòng thí nghiệm hay giữa hai người khác nhau sẽ có những kết quả khác nhau.

_Khắc khe về số liệu:

+Bắt đầu từ số liệu đầu vào đủ dài và có độ chính xác cao nhất định.

+Khi chuỗi số liệu quá ngắn hoặc thiếu số liệu sẽ tạo ra những giá trị không chắc chắn, kém tin cậy.

+Ứng dụng mô hình dòng chảy môi trường bị hạn chế do chuỗi số liệu trong quá khứ quá ngắn để đánh giá tần suất xuất hiện các thời kỳ quan trọng như thời kỳ đỉnh lũ hay dòng chảy kiệt.

+Kết quả hiệu chỉnh thông số có thể phù hợp với những chuỗi số liệu ngắn hoặc đứt đoạn nhưng khi kiểm nghiệm với những thay đổi mới thì bộc lộ nhiều sai số lớn.

+Do có số lượng số liệu nhiều hơn nên mô hình liên tục thường cho kết quả hiệu chỉnh tốt hơn mô hình dựa vào sự kiện.

_Tương tác giữa các thông số:

+Tạo nên sự phức tạp của bài toán do tương tác quan hệ của các thông số.

+Cần hiểu biết về mức độ và mẫu hình của sự tương tác giữa các thông số, độ nhạy của các tiêu chuẩn phù hợp của bất kỳ sự thay đổi nào của các giá trị thông số.

+Ít xảy ra trường hợp mô hình chủ yếu mang tính khái quát, trong đó các thông số có mức độ diễn giải vật lý thì về mặt lý thuyết, một kết quả của mô hình cũng được xem là đúng.

+Hiệu ích để các thông số mô hình chắc chắn thường xuất phát từ đo đạc thực tế bên ngoài hơn là lý thuyết thống kê.

+Không hẳn thông số của lưu vực tương tự đáp ứng yêu cầu về độ phù hợp cho mô hình ở lưu vực nghiên cứu dù tính chất và đặc điểm của chúng như nhau.

_Sự tương tự lưu vực và các vấn đề chuyển dịch thông số:

+Về lý thuyết, các thông số mô hình như quan hệ mưa-dòng chảy có thể cung cấp một giá trị tiếp cận xấp xỉ về mặt thủy văn cho những lưu vực tương tự nhưng thiếu trạm đo. Gorgen đề xuất thành lập các thông số khi:

-Giá trị thông số có thể chuyển dịch bởi các đặc trưng lưu vực đo được.

-Giá trị thông số có thể dựa vào xu thế phát triển mang tính khu vực.

-Các thông số có thể được thành lập bằng sự hiệu chỉnh mô hình một hoặc nhiều lưu vực khi các điều kiện vật lý của chúng có những tính chất thủy lực- thủy văn gần như nhau.

+Việc chuyển dịch thông số khuyến khích sử dụng trừ khi có hai hay nhiều lưu vực tương tự về mặt thủy học. Nếu khác biệt về thủy văn thì cần xem xét lại thông số.

+Cần phải có các thông tin đánh giá căn cứ sự nghiên cứu thực tế với các công cụ như bản đồ địa hình, bản đồ địa chất, không ảnh máy bay, ảnh vệ tinh và thám sát thực tế ngoài đồng.

+Căn cứ vào xu thế khu vực liên quan đến các thông số mô hình nhiều lưu vực có trạm đo thì cần phát triển một bộ thông số tiêu chuẩn cho lưu vực thiếu trạm đo. Đặc điểm:

-Thú vị và ít tốn kém

-Giảm hiệu chỉnh nhưng kết quả có thể có chất lượng kém hơn.

-Các thông số trong mô hình hóa môi trường mang tính tương tác cao hơn và phức tạp hơn so với mô hình thủy văn thông thường, đặc biệt là giữa thành phần số lượng nguồn nước và thành phần hóa học.

+Xem xét tương tự lưu vực phải có sự quan hệ giữa chiều dài dòng chảy, độ dốc, độ nhám. Phải có sự thông hiểu liên quan đến tiến trình thủy văn và các biến đổi của chúng, đặc biệt là xác định ảnh hưởng sự thay đổi tính chất dòng chảy theo không gian.

+Chứng minh sự tương tự giữa các lưu vực là quan trọng. Sự khác biệt về không gian sẽ tạo ra các vấn đề sai biệt hệ thống.

⇒ Kết luận: Không thể áp dụng một lưu vực mẫu cho các lưu vực khác khi không thử nghiệm đầy đủ vì nó chỉ mang tính tương đối.

_Giá trị thông số và vấn đề quy mô

+Quy mô chi phối sự thành lập thông số mô hình. Khi dịch chuyển các thông số từ một mô hình có quy mô nhỏ sang lớn, các tiến trình thủy văn và chất lượng nước sẽ thay đổi.

+Mô hình môi trường được thiết lập trên các quy mô vật lý tỷ lệ nhỏ để tạo ra thông số có ý nghĩa vật lý đáp ứng điều kiện sử dụng của nó.

+Các mô hình vật lý khi áp dụng trong phòng thí nghiệm quy mô nhỏ khi mở rộng ra thực tế hay gặp thất bại cần phải điều chỉnh nhưng tiêu tốn thời gian và công sức.

_Vấn đề ngoại suy thông số (kỹ thuật toán học để kéo dài số liệu tính toán hoặc quan trắc hoặc thử nghiệm mô hình. Dùng để tiên đoán những khả năng xảy ra trong tương lai hoặc thử áp dụng khi có trường hợp mở rộng không gian hoặc tiên lượng sự cố)

+Chỉ có thể đúng hoặc gần đúng ở điều kiện gần kết quả tính toán. Khi điều kiện mô tả của mô hình mở rộng hoặc điều kiện vật lý các hiện tượng thực tế nằm ngoài tính toán thì tính tối ưu của thông số không còn tính nữa.

+ Sai số và gia tăng các khiếm khuyết có thể gặp trong khái quát hóa mô hình khi sử dụng thông số từ chuỗi số liệu ngắn ngoại suy cho chuỗi dài hơn. Phần lớn không thể áp dụng với chuỗi dữ liệu nằm ngoài khoảng hiệu chỉnh của mô hình.

III.3 KIỂM ĐỊNH MÔ HÌNH

III.3.1 KHÁI NIỆM

Kiểm định mô hình là bước tiếp theo việc hiệu chỉnh để kiểm tra các thông số mô hình đưa ra có phù hợp với thay đổi trong thực tế hay không.

III.3.2 CÁC CHỈ SỐ THÔNG KÊ

Để so sánh độ phù hợp giữa trị mô phỏng và trị quan trắc cho cả chuỗi thời gian và cho từng sự kiện riêng rẽ ở kết quả đầu ra. Gồm:

Trị trung bình (mean):

$$\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

Trong đó: $\bar{X}$: Trị trung bình của các trị quan trắc;

x_i : Trị quan trắc được ở thời điểm thứ i ;

n : số thời điểm quan trắc.

Hàm mục tiêu liên quan đến giá trị trung bình thể hiện mức độ phân trăm giữa trị trung bình số quan trắc và số mô phỏng. Nếu mô hình tốt thì hàm mục tiêu trị trung bình phải tối thiểu hóa:

$$100 \cdot \frac{(x - y)}{\bar{X}} \rightarrow 0$$

Phương sai (variance) V_x

$$V^x = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})^2$$

Mô hình được xem là tốt khi hàm mục tiêu của phương sai là tối thiểu hóa:

$$100 \cdot \frac{(V_x^2 - V_y^2)}{V_x^2} \rightarrow 0$$

Độ lệch chuẩn (standard deviation) S_x

$$S_x = \sqrt{V_x}$$

Mô hình được xem là tốt khi hàm mục tiêu của độ lệch chuẩn là tối thiểu hóa:

$$100 \cdot \frac{(S_x - S_y)}{S_x} \rightarrow 0$$

Hệ số biến động (variance deviation) CV_x

$$CV_x = \frac{S_x}{\bar{X}}$$

Mô hình được xem là tốt khi hàm mục tiêu của hệ số biến động là tối thiểu hóa:

$$100 \cdot \frac{(CV_x - CV_y)}{CV_x} \rightarrow 0$$

Hệ số thiên lệch (skewness) CS_x

$$CS_x = \frac{n}{S_x(n-1)(n-2)} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})^3$$

Mô hình được xem là tốt khi hàm mục tiêu của hệ số thiên lệch là tối thiểu hóa:

$$100 \cdot \frac{(CS_x - CS_y)}{CS_x} \rightarrow 0$$

Sai số thống kê

+ Sai số chuẩn của trị trung bình (standard error of the mean) các trị quan trắc

$$SE_x = \frac{S_x}{\sqrt{n}}$$

+ Sai số tiêu chuẩn trung bình (root mean square error – RMSE) của trị quan trắc x_i và trị mô phỏng y_i

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}{n}}$$

Trị RMSE càng gần 0 thì mức phù hợp giữa thực tế và mô hình càng cao.

Hệ số tương quan (correlation coefficient) cho quan hệ tuyến

+ Sai số chuẩn của trị trung bình (standard error of the mean) các trị quan trắc

$$SE_x = \frac{S_x}{\sqrt{n}}$$

+ Sai số tiêu chuẩn trung bình (root mean square error – RMSE) của trị quan trắc x_i và trị mô phỏng y_i

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}{n}}$$

Trị RMSE càng gần 0 thì mức phù hợp giữa thực tế và mô hình càng cao.

Sai số tương đối (Mean Percentage Error) MPE/ (Mean Absolute Percentage Error) MAPE

$$MPE = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n \left(\frac{x_i - y_i}{x_i} \right) \cdot 100$$

$$MAPE = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n \left| \frac{x_i - y_i}{x_i} \right| \cdot 100 = |MPE|$$

Hệ số tương quan (correlation coefficient) cho quan hệ tuyến tính R

$$R = \frac{COV_{XY}}{S_X \cdot S_Y} \quad \text{với} \quad cov_{XY} = \frac{\sum_{i=1}^n ((x_i - \bar{X})(y_i - \bar{Y}))}{(n-1)}$$

R càng tiến đến ± 1 thì mức đồng tương quan càng lớn.

$R > 0$ thì tương quan là đồng biến;

$R < 0$ thì tương quan nghịch biến.

R tiến về 0 thì tương quan càng kém.

$R \rightarrow 1$, hàm mục tiêu tương quan là tối đa hóa.

Phần trăm sai số của giá trị lớn nhất (Percentage of Peak Flow Error)

$$PPE = \frac{(Y_{\text{peak}} - X_{\text{peak}})}{X_{\text{peak}}} \cdot 100$$

Phần trăm sai số của thể tích (Percentage of Runoff Volume Error) PVE

$$PVE = \frac{Vol^Y - Vol^X}{Vol^X} \cdot 100$$

Time to Peak TTP:

$$TTP = T_{py} - T_{px}$$

Tổng các thống kê bình phương (sums of squares statistics)

- Toàn tổng bình phương (STT): là một số đo sự phân tán của các giá trị mô phỏng so với giá trị trung bình

$$STT = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{Y})^2$$

- Tổng các bình phương giải nghĩa (SSR): tổng sai lệch các giá trị mô phỏng với trị trung bình mô phỏng

$$SSR = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{Y})^2$$

- Tổng của các bình phương phi giải nghĩa (SSE): là tổng bình phương các khoảng lệch cực tiểu ($y_i - \hat{y}_i$)

$$SSE = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$

Ta được: $SST \approx SSR + SSE$

III.3.3 CÁC VẤN ĐỀ KIỂM ĐỊNH

_Cần có các phương pháp mới để kéo dài chuỗi số liệu từ thực tế hoặc lấy thêm từ các lưu vực tương tự, tình huống môi trường xấp xỉ.

_Phải đánh giá các ảnh hưởng do sự không chắc chắn của các thông số nhập vào mô hình khi xem xét sự thể hiện hình.

_Các số liệu nghèo nàn dẫn đến hiệu chỉnh và kiểm định sai lệch.

_Các số liệu quan trắc phải có đầy đủ sự kiểm soát chất lượng, đủ chi tiết và đủ độ dài theo thời gian.

III.3.4 HẬU KIỂM

_Đánh giá độ chính xác của mô hình khi tiên đoán kết quả cho tương lai gọi là hậu kiểm (post-audit).

_Các dữ liệu mới sẽ được thu thập nhiều năm và vận hành lại mô hình sau khi việc nghiên cứu mô hình đã hoàn tất để đánh giá độ chính xác tiên đoán đầu ra.

_Hiệu chỉnh và kiểm nghiệm lại các thông số hoặc đổi giả thiết, thuật toán, cấu trúc, khái niệm mô hình khi mô hình cũ không thỏa.

CHƯƠNG IV LÝ THUYẾT VỀ DO, BOD

IV.1 BOD, BOD5

IV.1.1 KHÁI NIỆM VÀ Ý NGHĨA BOD

_**Khái niệm:** BOD là lượng oxy cần cung cấp để oxy hóa các chất hữu cơ trong nước bởi vi sinh vật. BOD là một chỉ số đồng thời là một thủ tục được sử dụng để xác định xem các sinh vật sử dụng hết oxy trong nước nhanh hay chậm như thế nào

Chất hữu cơ + $O_2 \longrightarrow CO_2 + H_2O +$ tế bào mới + sản phẩm trung gian

_Ý nghĩa của chỉ số BOD

Trong tự nhiên BOD là thông số đánh giá lượng chất hữu cơ có trong nước có thể phân hủy được bằng con đường sinh học. Nó là một thông số nói lên chất lượng của một nguồn nước tự nhiên. Nguồn nước có BOD lớn điều đó chứng tỏ nước chứa nhiều chất hữu cơ vi sinh vật có thể phân hủy được bằng con đường hiếu khí. Khi phân hủy các chất hữu cơ vi sinh

vật chủ yếu sử dụng oxy hòa tan nên nó làm cho hàm lượng oxy hòa tan trong nước giảm mạnh, thậm chí xuống mức 0 gây ảnh hưởng và gây chết đối với các loài sinh vật sống trong nước, tạo điều kiện cho quá trình yếm khí xảy ra làm ô nhiễm nguồn nước.

Trong kĩ thuật chỉ số BOD được dùng để:

_Xác định gần đúng lượng oxy cần thiết để ổn định sinh học các chất hữu cơ có trong nước thải.

_Xác định kích thước bể xử lý.

_Xác định hiệu suất xử lý của một số quá trình.

_Xác định sự chấp thuận tuân theo những quy định cho phép xả thải.

IV.1.2 KHÁI NIỆM VÀ CÁCH XÁC ĐỊNH BOD₅

Khái niệm

BOD₅ là lượng oxy cần thiết cho vi khuẩn oxy hóa chất hữu cơ tại 20⁰c trong 5 ngày.

Cách xác định BOD₅

BOD₅: Là thông số biểu thị cho lượng chất hữu cơ của nguồn bị phân hủy trong 5 ngày ủ mẫu thông qua lượng oxygen của mẫu suy giảm sau năm ngày ủ.

Vì trong khoảng thời gian 5 ngày đầu có khoảng 60 – 70% chất hữu cơ bị phân hủy nên trong thực tế người ta thường xác định BOD₅ tức BOD được xác định trong năm ngày, tiêu chuẩn này đã được chuẩn hóa quốc tế và được nhiều nước sử dụng.

Cách tính BOD₅ được tính như sau:

_Cho một lượng nhất định mẫu nước thải vào chai phân tích BOD.

_Pha loãng mẫu tới thể tích trên bằng dung dịch pha loãng (có bổ sung thêm một số nguyên tố dinh dưỡng như N, P, Fe, K... và bão hòa oxygen)

_Đóng chai và ủ trong tủ hoặc trong tối ở nhiệt độ 20⁰C trong khoảng 5 ngày.

_Xác định DO ban đầu và DO sau năm ngày, hiệu số của hai chỉ số này gọi là BOD₅. (vì BOD₅ của các mẫu chất thải điển hình thường bằng vài trăm mg/l do đó cần pha loãng mẫu để cho nồng độ oxygen cuối cùng ngày thứ năm là không âm thì kết quả thí nghiệm mới có nghĩa).

Biểu thức tính:

$$BOD_5 = \frac{DO_0 - DO_5}{P} \text{ mgO}_2/\text{l}$$

Trong đó:

DO₀: nồng độ oxygen hòa tan ban đầu của mẫu nước trước khi ủ

DO₅: nồng độ mẫu sau năm ngày ủ.

P: là hệ số pha loãng.

$$P = Q/R$$

Q: thể tích nước đem phân tích

R: thể tích nước mẫu đã pha loãng trước khi ủ

Trong một vài trường hợp cần bổ sung thêm vi sinh vật vào nước pha loãng để đảm bảo chắc chắn có đủ lượng vi sinh vật cần thiết cho quá trình phân hủy. Trong trường hợp đó, BOD₅ được tính theo công thức:

$$BOD_5 = \frac{(D_1 - D_2) - (B_1 - B_2)F}{P} \text{ mg/l}$$

Trong đó:

D : nồng độ oxygen hòa tan của mẫu nước pha loãng có cấy vi khuẩn ngay sau khi chuẩn bị mẫu xong để ủ.

D₂: Nồng độ oxygen hòa tan của mẫu nước thải pha loãng có cấy vi khuẩn sau năm ngày ủ ở 20°C.

B₁: nồng độ oxy hòa tan của nước pha loãng có cấy vi khuẩn trước khi đem ủ.

B₂: nồng độ oxygen hòa tan của nước pha loãng có cấy vi khuẩn sau khi ủ, mg/l.

F: tỉ số giữa chất lỏng bổ sung vi khuẩn trong mẫu và trong đối chứng.

$$F = \frac{\text{thể tích mẫu nước đem phân tích}}{\text{tổng thể tích mẫu nước đem phân tích và nước pha loãng}}$$

Ngoài chỉ số BOD₅ còn có chỉ số BOD₃ cách tính tương tự như BOD₅ nhưng chỉ ủ trong 3 ngày trong điều kiện nhiệt độ 30°C. Và BOD₂₀ là chỉ số BOD xác định trong 20 ngày.

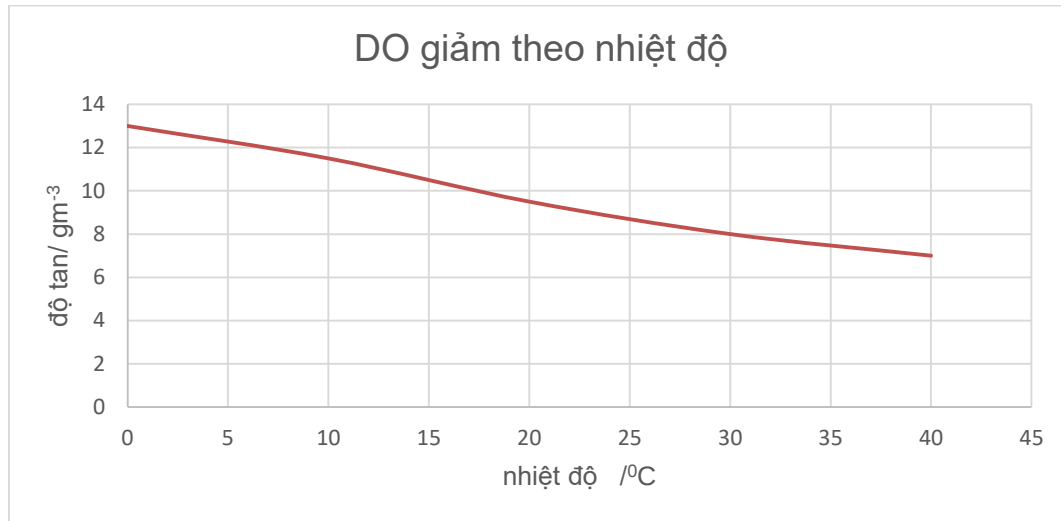
IV.2 KHÁI NIỆM, CÁCH YẾU TỐ ẢNH HƯỞNG ĐẾN DO

DO hòa tan là lượng oxy có trong nước được tính bằng mg/l hay % bão hòa dựa vào nhiệt độ. Phần trăm bão hòa là phần trăm tiềm tàng của nước để giữ oxy có mặt trong nước. Oxy trong nước mặt dao động từ 0mg/l ở nguồn nước có điều kiện quá tải cho đến 15mg/l trong nước đóng băng.

DO bão hòa gọi là nồng độ oxy bão hòa 100% chính là nồng độ oxy trong nước bão hòa không khí. Nồng độ oxy bão hòa phụ thuộc vào nhiệt độ, độ muối và độ cao so với mực nước biển. Nhiệt độ tăng thì nồng độ oxy bão hòa giảm. Độ muối tăng hay càng lên cao so với mực nước biển thì nồng độ oxy bão hòa cũng giảm.

Các yếu tố ảnh hưởng đến lượng oxy hòa tan trong nước

Nhiệt độ



Hình 4.1 Thể hiện hàm lượng DO biến động nhiệt độ

Về mùa hè khi nhiệt độ của nước nguồn tăng, quá trình oxy hóa sinh hóa các chất hữu cơ xảy ra với cường độ mạnh hơn. Trong khi đó độ hòa tan của oxy vào nước nguồn lại giảm xuống. Vì vậy về mùa hè, độ thiếu hụt oxy tăng nhanh hơn so với mùa đông.

Về mùa đông nhiệt độ nước nguồn thấp nên độ hòa tan tăng, tuy nhiên với nhiệt độ thấp các vi khuẩn hiếu khí tham gia vào quá trình oxy hóa các chất hữu cơ sẽ hoạt động yếu. Do đó quá trình khoáng hóa các chất hữu cơ xảy ra chậm chạp. Nói một cách khác, về mùa đông trình tự làm sạch của nguồn nước xảy ra một cách chậm chạp.

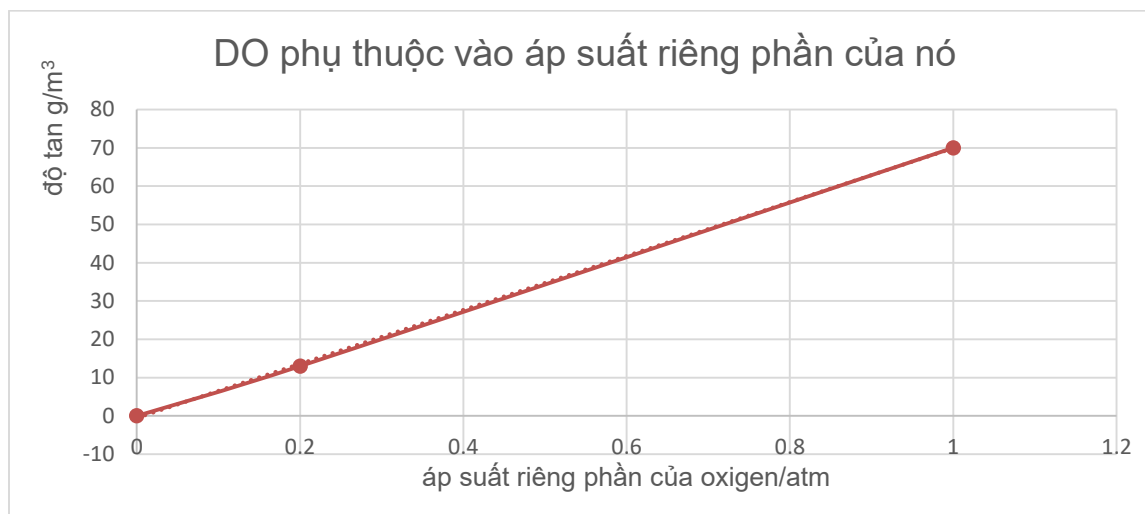
Cặn lắng

Cặn lắng nhiều làm giảm oxy hòa tan trong nước. Các chất hữu cơ trong cặn lắng sẽ bị phân hủy bởi vi khuẩn, nếu lượng cặn lắng quá lớn và lượng oxy trong nước nguồn không đủ cho quá trình phân hủy hiếu khí thì lượng oxy hòa tan trong nước nguồn sẽ bị cạn kiệt (DO=0).

Áp suất

_Áp suất cao oxy hòa tan trong nước tăng

_Áp suất thấp oxy hòa tan trong nước giảm



Hình 4.2 Thể hiện hàm lượng DO biến động theo áp suất

Độ mặn

_Độ hòa tan của oxy trong nước mặn thấp hơn trong nước ngọt.

Một số yếu tố khác

_Oxy trong không khí: nguồn bổ sung oxy

_Quá trình quang hợp của thực vật thủy sinh tạo ra oxy

_Quá trình hô hấp của thủy sinh vật làm tiêu hao oxy

_Quá trình phân hủy chất hữu cơ trong nước của vi khuẩn làm tiêu hao oxy

_Diện tích tiếp xúc giữa 2 pha oxy và nước; mức độ xáo trộn gây ra bởi dòng chảy cũng như các tác nhân khác: gió trên mặt thoáng của dòng chảy cũng có ảnh hưởng đến oxy hòa tan trong nước hay nói khác hơn là các thủy vực.

_Sự thay đổi mùa cũng ảnh hưởng đến nồng độ oxy hòa tan

CHƯƠNG V CƠ SỞ LÝ THUYẾT VỀ TRUYỀN TẢI - KHUẾCH TÁN

V.1 LỊCH SỬ PHÁT TRIỂN MÔ HÌNH CHẤT LƯỢNG NƯỚC

Mô hình chất lượng nước là một trong những công cụ quản lý chất lượng nguồn nước một cách tổng quát và toàn diện, mang lại hiệu quả kinh tế cao. Trong những năm gần đây được ứng dụng rất rộng rãi trong các lĩnh vực : dự báo ô nhiễm, đánh giá xu thế biến đổi chất lượng nước, khai thác sử dụng hợp lý nguồn nước và làm cơ sở khoa học cho việc bảo vệ tổng hợp nguồn nước.

Trong gần một thế kỷ, từ mô hình đơn giản đầu tiên cho đến nay sự phát triển MHCLN có thể được tóm tắt theo các giai đoạn sau :

Giai đoạn đầu thế kỷ 20, mô hình chất lượng nước đầu tiên được Streeter-Phelps thiết lập 1925, mô phỏng sự thay đổi các chất hữu cơ BOD & DO (độ thiếu hụt oxy) ở vùng hạ lưu các nguồn thải điểm trên dòng chảy sông Ohio. Mô hình được thiết lập dựa trên cơ sở các giả thiết : dòng chảy ổn định, sự phân hủy các chất hữu cơ theo phản ứng bậc nhất và sự thiếu hụt oxy trong dòng chảy là do sự phân hủy các chất hữu cơ.

Trong những năm của thập kỷ 30-50, kết hợp các kết quả nghiên cứu lý thuyết về quá trình xáo trộn, khuếch tán rối vật chất trong dòng chảy của Taylor, Eder và các phương pháp tính toán sự lan truyền chất trên dòng chảy, Các tác giả cố gắng nâng cao độ tin cậy bằng việc xem xét đồng thời ảnh hưởng của quá trình khuếch tán rối đến quá trình lan truyền các chất ô nhiễm trong dòng chảy. Các nghiên cứu tập trung vào các mối quan hệ giữa sự thay đổi giá trị BOD&DO trên các dòng chảy với các chế độ thủy lực khác nhau. Tuy nhiên, trong giai đoạn này do sự hạn chế của phương pháp tính, công cụ tính toán cũng như các điều kiện thực nghiệm trong dòng chảy nên các MHCLN chủ yếu tập trung giải quyết các vấn đề đặt ra trong các dòng chảy đơn giản kênh, sông với điều kiện ổn định, một chiều. Kết quả đạt được trong giai đoạn này là các công thức thực nghiệm xác định hằng số tốc độ hoà tan oxy, các số liệu thống kê về hằng số tốc độ phân huỷ các chất hữu cơ trong các dòng chảy có chế độ thủy lực khác nhau.

Giai đoạn thập kỷ 60, cùng với công cụ tính toán mới (máy tính điện tử) các phương pháp tính toán được hoàn thiện, các phương pháp số giải bài toán thủy lực, bài toán lan truyền chất trong dòng chảy đã trở nên quen thuộc. Các MHCLN được phát triển tính toán với bài toán nhiều chiều hơn và xử lý các vấn đề mà trước đây khi giải quyết còn gặp rất nhiều khó khăn. Độ tin cậy của mô hình cũng được nâng cao hơn. Các vấn đề được quan tâm trong giai đoạn này là áp dụng vào tính toán trong thực tiễn các vấn đề như đề cập trên nhưng các mô hình giải quyết các bài toán nhiều chiều hơn và các vấn đề phức tạp hơn. Độ tin cậy của mô hình được nâng cao do bổ sung thêm các quá trình có ảnh hưởng đến sự phân bố nồng độ các chất hữu cơ trong dòng chảy :

_Quá trình lắng các chất lơ lửng, phân tán nhỏ trong quá trình lan truyền.

_Quá trình giải phóng các chất từ lớp bùn đáy do sự cọ sát của dòng chảy với lớp bùn đáy.

_Quá trình quang hợp và hô hấp của hệ thực vật thủy sinh.

Các MHCLN được phát triển rất đa dạng. Nếu như trước đây các mô hình thuần túy đánh giá những tác động của nguồn thải điểm đến chất lượng nước sông, các mô hình đã đề cập đến sự lan truyền trong dòng chảy của các sông rộng, vùng cửa sông.

Trong các ứng dụng vào thực tiễn, các nghiên cứu đã xác định các số liệu thực nghiệm về hằng số tốc độ hoà tan, hệ số chuyển hoá các chất trong dòng chảy. Với các lưu vực có chế độ thủy lực độ tin cậy của kết quả tính toán mô phỏng còn nhiều hạn chế.

Giai đoạn thập kỷ 70, với sự hoàn thiện các phương pháp nghiên cứu thực nghiệm xác định sự phân tán vật chất trong dòng chảy các MHCLN phát triển đa dạng hơn. Đề cập đến vai trò của quá trình tự làm sạch của nguồn nước (khả năng chuyển hóa các chất bản của hệ động thực vật), các nghiên cứu tập trung thêm vào các yếu tố ảnh hưởng đến quá trình phú dưỡng nguồn nước. Sự chuyển hóa các chất ô nhiễm trong chuỗi thức ăn. Sự tích lũy các chất ô nhiễm trong các sinh vật tiêu thụ. Bước đầu, các nghiên cứu chỉ dừng lại ở các nghiên cứu sự phú dưỡng của các hồ chứa nước. Đối với dòng chảy vấn đề này cũng đã được đề cập đến, tuy nhiên khi triển khai ứng dụng còn rất nhiều khó khăn trong việc đánh giá và hiệu chỉnh mô hình.

Giai đoạn cuối những năm 80 trở lại đây, các MHCLN tập trung nghiên cứu mối quan hệ giữa các quá trình sinh thái -chất lượng nước trong dòng chảy. Các mô hình được thiết lập dưới dạng đơn giản hơn nhưng độ tin cậy cao hơn. Thomann và Mueller (1987) mô hình hoá các ảnh hưởng của mối quan hệ giữa các loại phù du thực vật với các chất dinh dưỡng trong dòng chảy đến chất lượng nước sông. Các chất dinh dưỡng được đưa vào dòng chảy dưới dạng các nguồn thải điểm. Law và Chalup (1990) xây dựng MHCLN trên cơ sở sự phát triển của quá trình quang hợp và hô hấp của tảo. Điều này đã được Bowie bổ sung vào mô hình Qual 2E (1993). Di Toro và Fitzpatrick (1993) phát triển, bổ sung thêm mối quan hệ giữa các sinh vật lớn tiêu thụ (sinh vật tiêu thụ bậc I) sự chuyển hóa và tích lũy các chất dinh dưỡng.

Hiện tại, hướng phát triển của MHCLN là nghiên cứu sự tích lũy các chất hữu cơ bền vững trong chuỗi thức ăn, sự tích lũy các chất độc trong các cơ thể sống. Mô phỏng phân bố nồng độ các chất ô nhiễm trên các dòng chảy phức tạp như sự lan truyền các chất ô nhiễm từ các nguồn thải điểm, các nguồn thải phân tán, các nguồn thải phát sinh thêm trong quá trình chuyển hóa các chất ô nhiễm. Các áp dụng thực tiễn, được triển khai rộng ở các dòng chảy có chế độ phức tạp như các dòng chảy sông rộng, cửa sông, các vũng, vịnh và các vùng biển ven bờ.

V.2 CƠ SỞ LÝ THUYẾT VỀ MÔ HÌNH CHẤT LƯỢNG NƯỚC

V.2.1 CÁC PHƯƠNG TRÌNH CƠ BẢN

Mô tả sự xáo trộn và lan truyền các chất ô nhiễm trong long chảy dựa trên cơ sở lý thuyết của quá trình khuếch tán rối. Lý thuyết này đã được thừa nhận rộng rãi trên thế giới. Phương trình vi phân cơ bản mô tả quá trình lan truyền và khuếch tán rối vật chất trong dòng chảy dựa trên các giả thuyết cơ bản sau:

_Chất lỏng không nén.

_Trị số Reynold đủ lớn để không xét đến hiệu ứng của quá trình khuếch tán phân tử.

_Số lượng số các chất giải phóng trong một đơn vị thời gian trên một đơn vị thể tích là rất nhỏ và bỏ qua ảnh hưởng của chúng đến cấu trúc của dòng chảy. Trên cơ sở định luật bảo

toàn khối lượng, phương trình vi phân mô tả quá trình xáo trộn, lan truyền và chuyển hóa các chất ô nhiễm trong chất lỏng lý tưởng .

_Phương trình tải-khuếch tán:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_x \frac{\partial C}{\partial x} + u_y \frac{\partial C}{\partial y} + u_z \frac{\partial C}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(-D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(-D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + F(s) = 0 \quad (5.1)$$

Trong đó:

D_x, D_y, D_z :Hệ số khuếch tán phân tử, m^2/s ;

u_x, u_y, u_z Vận tốc dòng chảy theo các phương x, y, z , m/s ;

$F(S)$: Số hạng đặc trưng cho quá trình chuyển hóa các chất ô nhiễm bởi các quá trình vật lý, hóa học và sinh học diễn ra trong dòng chảy.

Phương trình (5.1) là phương trình lý thuyết nửa kinh nghiệm mô tả quá trình tải và khuếch tán đối lưu vật chất trong dòng chảy. Khi áp dụng phương trình vi phân (5.1) giải bài toán xác định sự xáo trộn vật chất trong dòng chảy rối trong đường ống, (Taylor, 1954) từ các nghiên cứu thực nghiệm kiến nghị sử dụng hệ số khếch tán tích phân để có thể xem xét ảnh hưởng cầu trường vận tốc trên tiết diện của mặt cắt ướt đến quá trình khuếch tán rối vật chất.

Từ các nghiên cứu trên, phương trình vi phân (5.1) mô tả sự khuếch tán rối vật chất trong dòng chảy được viết lại là:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_x \frac{\partial C}{\partial x} + u_y \frac{\partial C}{\partial y} + u_z \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + F(S) \quad (5.2)$$

Trong đó:

$\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z$ Hệ số khuếch tán rối tích phân tại điểm đang xét, hệ số xáo trộn rối theo các phương x, y, z .

Từ các phương trình (5.1), (5.2) cho thấy sự lan truyền các chất trong dòng chảy rối trong mọi trường hợp phụ thuộc vào vận tốc dòng chảy tại điểm đang xét. Trong dòng chảy tự nhiên, trên kênh, sông... sự xáo trộn, khuếch tán của các chất tại một điểm luôn luôn chịu ảnh hưởng của trường vận tốc theo phương ngang và phương thẳng đứng, để làm rõ sự khác biệt này so với dòng chảy trong ống thường sử dụng hệ số phân tán rối. Phương trình (5.2) được viết lại là:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_x \frac{\partial C}{\partial x} + u_y \frac{\partial C}{\partial y} + u_z \frac{\partial C}{\partial z} = E_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + E_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + E_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + F(S)$$

Trong đó:

E_x, E_y, E_z Hệ số (phân tán rối) khuếch tán rối vật chất theo phương x, y, z tại mặt cắt.

Như vậy, quá trình phân tán rối vật chất trong dòng chảy là tổ hợp của quá trình khuếch tán rối vật chất trong trường hợp vận tốc dòng chảy có hướng và vận tốc khác nhau.

Hệ số khuếch tán rối theo phương thẳng đứng ε_z

Hệ số khuếch tán rối theo chiều thẳng đứng tại một điểm trên mặt cắt ngang được xác định theo công thức :

$$\varepsilon_z = kdu^* \left(\frac{z}{d} \right) \left(1 - \frac{z}{d} \right) \quad (5.4)$$

Với :

$u^* = \sqrt{gds}$: vận tốc trượt (vận tốc động lực) của dòng chảy tại mặt cắt.

z : tọa độ điểm tính toán, m.

k : hệ số rối Von Karman ($k \approx 0,40$).

d : chiều sâu trung bình của dòng chảy tại mặt cắt.

S : độ dốc đáy của dòng chảy, m/m.

g : gia tốc trọng trường, m/s².

Gọi $\bar{\varepsilon}_z$ là hệ số khuếch tán rối trung bình cho mặt cắt.

$$\bar{\varepsilon}_z = \frac{1}{d} \int_0^d \varepsilon_z dz \quad (5.5)$$

Jobson và Sayer (1970); Csanady (1976) bằng các nghiên cứu thực nghiệm xác định hệ số khuếch tán rối và đề xuất công thức kinh nghiệm về hệ số khuếch tán rối ε_z tại một mặt cắt ngang của dòng chảy.

$$\varepsilon_z = 0,067 du^*$$

Hệ số xáo trộn theo phương ngang ε_y

Fischer (1967, 1969) bằng thực nghiệm xác định hệ số khuếch tán rối và đưa ra công thức tính hệ số khuếch tán rối ε_y tại một điểm trên mặt cắt ngang của dòng chảy.

$$\varepsilon_y = 0,15 du^* \quad (5.6)$$

Lau và Krishnapan (1977) bằng các thực nghiệm trong các dòng chảy tự nhiên trên kênh, sông có các chế độ chảy khác nhau, kiến nghị mức độ sai số của hệ số ε_y .

Dòng chảy trong kênh thẳng hình thang : $\varepsilon_y = 0,15 du^* \pm 50\%$ (5.7)

Sông có chế độ chảy êm : $\varepsilon_y = 0,6 du^* \pm 50\%$ (5.8)

Sông hình dạng cong, khúc khuỷu : $\varepsilon_y = 25 \frac{\bar{u}^2 d^3}{R_c^2 u^*}$ (5.9)

Trong đó :

$\bar{u}$: vận tốc trung bình tại mặt cắt ngang dòng chảy, $L.T^{-1}$

R_c : bán kính thủy lực, L

d : chiều sâu trung bình, L .

Từ công thức (5.5) và (5.6) dễ dàng nhận thấy $\varepsilon_y \approx 10\varepsilon_z$ như vậy quá trình khuếch tán rối theo phương ngang của dòng chảy lớn hơn rất nhiều so với quá trình khuếch tán rối theo phương thẳng đứng.

_Hệ số khuếch tán rối ε_x

Tương tự như việc xác định ε_y và ε_z , Elder (1959) bằng thực nghiệm đã xác định hệ số khuếch tán rối tại một điểm trên mặt cắt ngang theo chiều dòng chảy ε_x .

$$\varepsilon_x = 5,93 du^* \quad (5.10)$$

So sánh ε_x ; ε_y và ε_z cho thấy : $\varepsilon_x \gg \varepsilon_y \gg \varepsilon_z$ như vậy quá trình xáo trộn và pha loãng các chất ô nhiễm diễn ra chủ yếu theo chiều của dòng chảy. Hay nói một cách khác sự xáo trộn, khuếch tán rối chất ô nhiễm tại một điểm nào đó tại mặt một điểm nào đó trên cắt ngang dòng chảy chịu ảnh hưởng chủ yếu vào trường vận tốc của dòng chảy tại mặt cắt ngang đó.

_Hệ số phân tán dọc dòng chảy E_x

Khi xem xét ảnh hưởng của trường vận tốc tại mặt cắt ngang lên sự khuếch tán dọc theo chiều dòng chảy Fischer (1967) kiến nghị thay thế hệ số khuếch tán rối ε_x bằng hệ số phân tán dọc dòng chảy E . Hệ số này được xác định bằng cách chia nhỏ mặt cắt dòng chảy ra thành nhiều đơn vị nhỏ để có thể xét được ảnh hưởng của trường vận tốc tại mặt cắt lên sự xáo trộn và phân tán vật chất.

$$E_x = -\frac{1}{A} \int_0^w (u_i - \bar{u}) \int_0^y \frac{1}{\varepsilon_y d} \int_0^y u' ddydydy \quad (5.11)$$

Với :

w : chiều rộng của dòng chảy tại mặt cắt đang xét, L

u_i : vận tốc trung bình qua đơn vị mặt cắt i , $L.T^{-1}$

$\bar{u}$: vận tốc trung bình trên toàn bộ mặt cắt, $L.T^{-1}$

d : chiều sâu của mặt cắt đơn vị thứ i , L

$\varepsilon_y = 0,6 du^*$ hệ số khuếch tán rối theo phương ngang giữa tiết diện đơn vị mặt cắt thứ i và $i-1$.

Tích phân (11) ta được hệ số phân tán theo chiều dòng chảy tại mặt cắt ngang của dòng chảy.

Từ các số liệu thực nghiệm Fisher đề xuất công thức kinh nghiệm tính hệ số phân tán dọc E_x tại mặt cắt ngang dòng chảy.

$$E_x = 0,011 W^2 \frac{\bar{u}^2}{du^*} \quad (5.12)$$

V.2.2 SỰ CHUYỂN HÓA CÁC CHẤT TRONG DÒNG CHẢY

Giả thiết rằng, các chất xâm nhập vào dòng chảy kênh, sông qua nước thải và các nguồn thải có kích thước đủ nhỏ(so với dòng chảy sông) để có thể coi như là các nguồn điểm. DO trong nước thải có nồng độ các chất cao hơn trong nguồn nước nên sẽ xuất hiện thế cân bằng nồng độ bằng cách vận chuyển các chất từ nước thải sang nước sông.

Quá trình vận chuyển chất được xảy ra bằng hai cách:

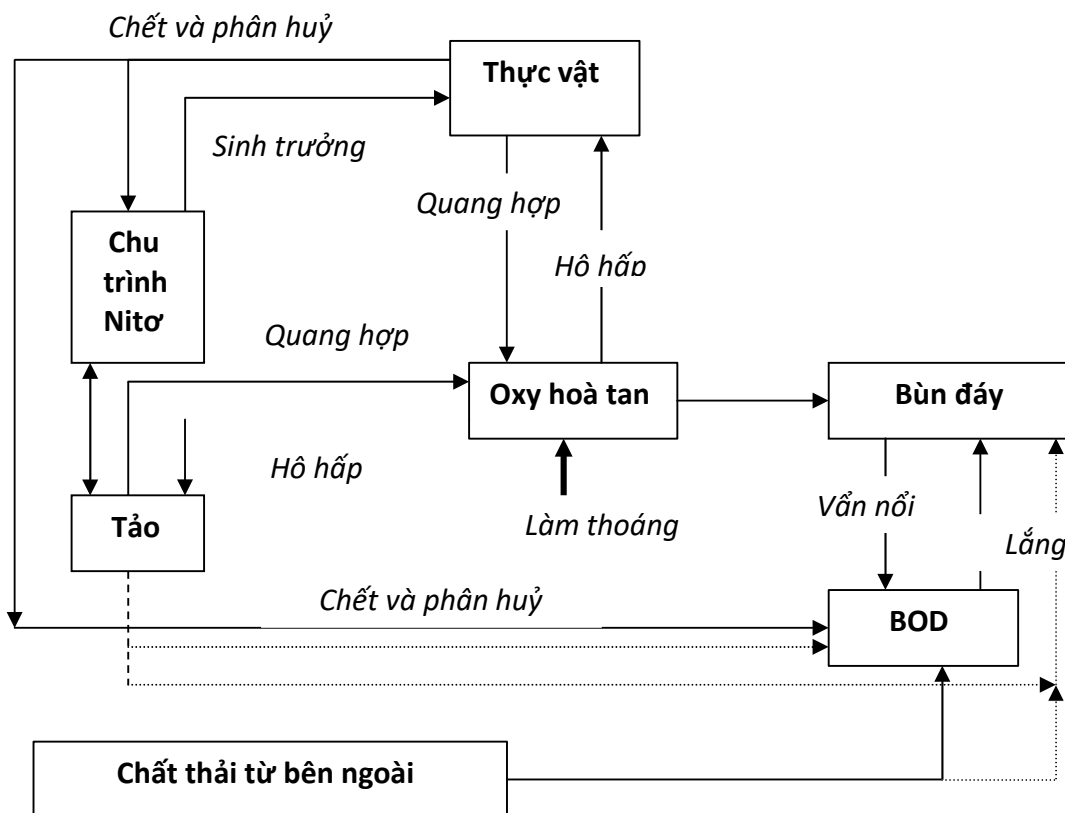
_Quá trình vận chuyển chất do dòng chảy (advection);

_Quá trình khuếch tán các chất do dòng chảy rối (turbulent diffusion).

Ngoài ra, tùy thuộc chế độ thủy lực của dòng chảy, tính chất thành phần các chất bản mà nồng độ các chất ô nhiễm trong dòng chảy còn phụ thuộc các quá trình: các quá trình vật lý (hấp phụ, hấp thụ, lắng, bay hơi, hóa học (sự phân hủy, tương tác hóa học,..) và sinh học (tích tụ sinh học, phân hủy, chuyển hóa,...)

Sự chuyển hóa các chất hữu cơ trong dòng chảy là tổng hợp các quá trình thủy động học, thủy hóa, sinh học...diễn ra trong nguồn nước. Dưới góc độ sinh thái, đây là khả năng đảm bảo sự tự ổn định của hệ sinh thái khi có tác động từ bên ngoài. Quá trình chuyển hóa- phân hủy các chất hữu cơ nhờ các vi sinh vật.

Sự chuyển hóa các chất hữu cơ trong dòng chảy có liên quan đến tất cả các quá trình sinh thái trong hệ sinh thái dòng chảy sông. Các quá trình sinh thái, mối quan hệ giữa các quá trình diễn ra trong dòng chảy khi tiếp nhận các chất thải từ các nguồn bên ngoài được mô tả ở Hình 5.1



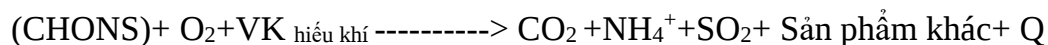
Hình 5.1 Sơ đồ chuyển hóa các chất hữu cơ trong dòng chảy

Giải thích:

Lượng oxy hòa tan là yếu tố cần thiết cho hầu hết các quá trình diễn ra trong dòng chảy, bao gồm các quá trình trong chu trình nitơ, quá trình oxy hóa phân hủy các chất hữu cơ trong nước và phân hủy các chất cặn lắng dưới đáy, quá trình hô hấp của thực vật thủy sinh và tảo. Bên cạnh đó, lượng oxy hòa tan cũng được bổ sung từ quá trình hòa tan khuếch tán oxy từ không khí qua bề mặt thoáng và quá trình quang hợp của hệ thực vật nước và tảo.

Vi sinh vật dị dưỡng sử dụng oxy để phân hủy chất hữu cơ thải từ bên ngoài, xác bã động thực vật thành các chất vô cơ đơn giản, tạo nên năng lượng cho quá trình tổng hợp tế bào của chúng. Quá trình này có thể được tóm tắt bằng 2 phương trình phản ứng sau:

_Quá trình oxy hóa hiếu khí

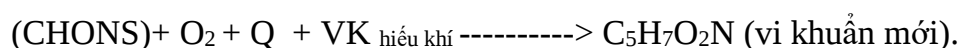


Trong đó:

+ (CHONS) : công thức đại diện cho chất hữu cơ

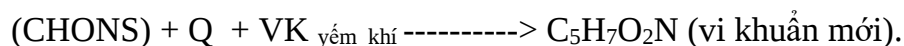
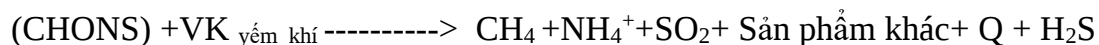
+ Q: năng lượng được phát ra

_Quá trình tổng hợp hiếu khí



Trong đó $C_5H_7O_2N$ là công thức đại diện cho tế bào vi khuẩn mới được sinh ra.

Tuy nhiên, các chất hữu cơ bị lắng xuống đáy tạo thành và kết hợp một với xác động thực vật thủy sinh, phần lớn ở dưới đáy ít được tiếp xúc với oxy, do đó nhờ những vi sinh vật yếm khí phân hủy các hợp chất hữu cơ và được thực hiện bởi 2 quá trình:

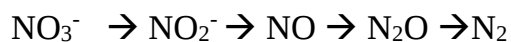


Bên cạnh đó, chu trình nitơ gồm nhiều quá trình sinh hóa như cơ chế nitrat hóa, cơ khử nitrat nhằm chuyển hóa nitơ thành các chất dinh dưỡng cần thiết cho sự sinh trưởng và phát triển của các sinh vật trong hệ sinh thái nước.

Ví dụ:

_Quá trình nitrat hóa là quá trình oxy hóa sinh hóa các chất ni-tơ của các muối NH_4^+ thành NO_2^- , và sau đó thành NO_3^- trong điều kiện thích ứng (có oxy và nhiệt độ trên $4^\circ C$).

_Quá trình khử nitrat là quá trình làm giảm ni-tơ trong nước thải mà chuyển nó thành những chất khí không hòa tan, sau đó phóng vào khí quyển. Điều kiện quá trình này khử nitrat xảy ra là $0 < DO < 1 \text{ mg/L}$.



Như vậy, có thể thấy rằng hàm lượng các chất hữu cơ thay đổi phụ thuộc vào các quá trình lý, hóa, sinh trong dòng chảy. Sự thay đổi nồng độ oxy hòa tan quyết định hầu hết diễn biến của các quá trình chuyển hóa cũng như sự sinh trưởng và phát triển của hệ thủy sinh vật. Vì vậy, lượng oxy hòa tan trong nguồn nước đóng vai trò quan trọng trong sự chuyển hóa các chất hữu cơ, là chỉ tiêu chung cho sự sống trong môi trường nước.

V.3 LÝ THUYẾT BOD & DO CỦA STREETER-PHELPS

V.3.1 CƠ SỞ LÝ THUYẾT

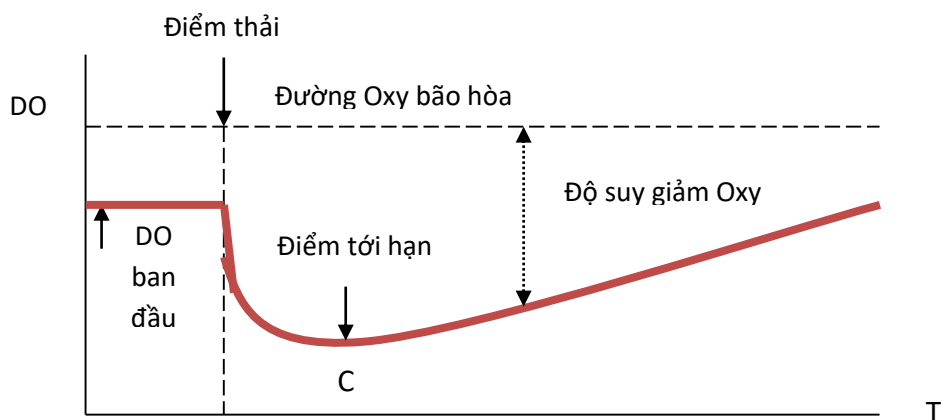
Khi một con sông bị ô nhiễm bởi các chất hữu cơ, nó sẽ tự khôi phục lại trạng thái trong sạch ban đầu bởi các quá trình lý, hóa, sinh học diễn ra trên một con sông. Tiến trình **tự làm sạch** phụ thuộc vào các quá trình vật lý, hóa học, vi sinh học và thủy học, đặc biệt là yếu tố sinh học của nguồn nước. Các cơ chế xảy ra các quá trình quá trình làm sạch dòng sông:

+ Sự pha loãng giữa nước thải có nồng độ ô nhiễm cao hơn và nước sông không có ô nhiễm hoặc ô nhiễm ít hơn;

+ Sự lắng cặn của các chất rắn lơ lửng và các chất rắn lắng được khi vận tốc dòng chảy giảm xuống;

- + Sự hấp phụ các chất ô nhiễm vào các hạt phù sa và sét trong nước sông;
- + Sự oxy hóa và kết tủa một số loại chất ô nhiễm;
- + Sự trao đổi chất bay hơi khí quyển và nguồn nước;
- + Sự phóng thích các chất khí từ quá trình biến dưỡng của sinh vật;
- + Sự phân hủy và đồng hóa các chất hữu cơ trong nguồn nước.

Trong các quá trình quan trọng hơn cả của quá trình tự làm sạch là sự phân hủy hiếu khí các chất hữu cơ bởi vi sinh vật. Lượng chất hữu cơ của một dòng chảy có thể bị đồng hóa bởi vi khuẩn giới hạn bởi oxy hòa tan trong nước. Quá trình phụ thuộc vào tốc độ tiêu thụ oxy của quá trình oxy hóa sinh hóa và tốc độ hòa tan của oxy trong khí quyển vào nước, phụ thuộc ít hơn vào các quá trình khác như quang hợp và việc oxy hóa các lắng đọng dưới đáy thủy vực. Trong trường hợp tất cả các oxy bị tiêu thụ hết, trạng thái yếm khí sẽ xuất hiện và quá trình tự làm sạch sẽ không diễn ra.

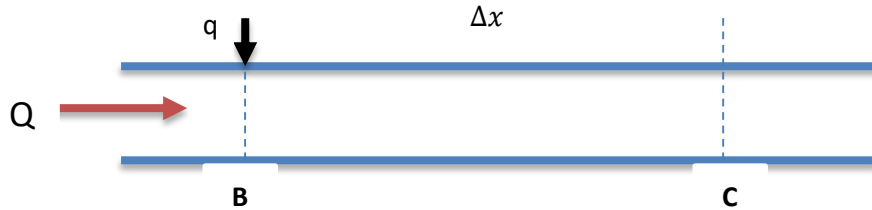


Tóm lại: Lượng oxy cần thiết để vi sinh vật phân hủy chất thải bản hữu cơ trong một đơn vị thể tích mẫu nước được gọi là nhu cầu oxy sinh hóa BOD và được tính bằng mg/L oxy. DO là chỉ tiêu chung cho sự sống trong môi trường nước và phần lớn các chất thải bản trong nước có tương tác với oxy qua phản ứng oxy hóa. Mặt khác BOD là nguyên nhân chính làm giảm sút hàm lượng DO trong nước. Do vậy, mô hình mô phỏng BOD bao giờ cũng gắn với DO. Việc mô phỏng sự thay đổi của BOD và DO trong nước chiếm phần lớn các công trình dành cho nghiên cứu chất lượng nước.

V.3.2 MÔ HÌNH STREETER- PHELPS & ĐƯỜNG CONG SUY GIẢM OXY

Mô hình chất lượng nước phát triển rất nhanh từ những năm 60. các quá trình được xem xét đầu tiên chỉ là BOD, DO và nhiệt độ, sau này thêm nhiều yếu tố được xem xét như độ mặn, nito, photpho và tảo,... độ chính xác của mô hình không chỉ phụ thuộc vào tính phức tạp của các yếu tố được đưa vào mô hình mà còn phụ thuộc vào khả năng có thể có được của số liệu thực đo dùng để xác định các thông số của mô hình.

Để có khái niệm ta xét một ví dụ đơn giản sau đây: một thành phố có lượng nước thải là q ($\text{m}^3/\text{ngày-đêm}$), lượng oxy hòa tan (DO) trong nước thải là 0 mg/L và nồng độ BOD trong nước thải là L_1 . Nước thải được thải vào sông với dòng chảy trên sông có lưu lượng là Q (m^3/s) và vận tốc trung bình là $\bar{u}$ (m/s). Nước có nồng độ DO là D_1 và nồng độ BOD là L_2



Hình 3.1. Sơ đồ thể hiện sự lan truyền nước thải trên sông

Giả sử đã biết hằng số tiêu tốn oxy để phân hủy các chất hữu cơ trong nước thải là K_1 , hằng số thấm oxy từ không khí vào nước là K_2 . Vấn đề đặt ra là xem sự biến đổi oxy hòa tan DO trong dòng chảy tại điểm C ở hạ lưu điểm xả và ngay điểm xả B ra sao?

- _ Để tính toán các giả thiết sau đây được sử dụng:
- _ Dòng chảy là đường dừng (không thay đổi theo thời gian)
- _ Nước thải phân bố đều theo mặt cắt ngang sông
- _ Không có sự phân tán dọc dòng chảy.
- _ Tốc độ oxy hóa chất bẩn tuân theo phản ứng tỷ lệ bậc 1.
- _ Chỉ có một nguồn thải bẩn trong đoạn BC.
- _ Chỉ có nguồn bổ sung oxy từ không khí (bỏ qua các nguồn khác)

Những giả thuyết trên đây (chỉ gần đúng trong thực tế) chỉ là cách đơn hóa cách thiết lập mô hình tính toán. Xem đoạn BC có chiều dài δx , mặt cắt ngang có diện tích A và thể tích V . bây giờ ta viết phương trình bảo toàn (cân bằng) DO trong khoảng thời gian δt cho đoạn BC theo nguyên lý: sự thay đổi DO trong khoảng thời gian δt trong đoạn BC là do dòng chảy mang vào thể tích V tại điểm B, lượng oxy thấm vào V với tốc độ K_2 , lượng oxy sản sinh chính trong thể tích V (do các nguyên nhân sinh hóa) trừ đi lượng oxy do dòng chảy mang ra khỏi thể tích V tại điểm C và lượng oxy tiêu tốn ngay trong V để phân hủy chất thải. Nguyên lý này có thể viết như sau:

DO vào + DO sản sinh trong V – (DO ra + DO mất trong V) = sự thay đổi DO trong V

$$Q \cdot D_u + gV - \left[Q \left(D_u + \frac{\partial D_u}{\partial x} \Delta x \right) + fV \right] = \frac{V \Delta D_u}{\Delta t} \quad (5.13)$$

Trong đó:

D_u là lượng oxy hòa tan trong dòng chảy

g là lượng oxy thấm vào từ không khí giả thiết bằng $K_2(D_s - D_u)$ với D_s là lượng oxy bão hòa trong nước sông

f là lượng tiêu tốn oxy cho phân hủy chất hữu cơ với tốc độ K_1 và giả thuyết bằng $K_1.L$ với L là nồng độ BOD trong dòng chảy.

Nếu xem dòng chảy là dừng với $Q = u.A$ thì (3.1) có dạng:

$$u \frac{\partial D_u}{\partial x} = K_2(D_s - D_u) - K_1 L \quad (5.14)$$

Nếu dùng khái niệm độ thiếu hụt Oxy $D = D_s - D_u$ thì nghiệm số của phương trình (5.14) có dạng:

$$D = \frac{K_1 L}{K_2 - K_1} (e^{-K_1 x/u} - e^{-K_2 x/u}) + D_0 e^{-K_2 x/u} \quad (5.15)$$

Trong đó: $D_0 = D_s - D_1$ là lượng suy giảm Oxy ban đầu trong dòng chảy; D là độ suy giảm Oxy ở khoảng cách x .

Mô hình được xét cho dòng chảy dừng trong kênh dạng chữ nhật, giả thiết cơ bản được sử dụng trong mô hình là tốc độ suy giảm oxy do phân hủy chất hữu cơ là bậc 1, tức là:

$$r_0 = -K_1 L \quad (5.16)$$

Trong đó r_0 là tốc độ suy giảm oxy (mg/L ngày); K_1 là hệ số suy giảm (1/ngày); L là nồng độ BOD tức thời tại điểm đang xét (mg/L).

Ta viết phương trình cân bằng vật chất trong một khoảng thời gian Δt cho một đoạn sông có chiều dài Δx với thể tích V dựa theo nguyên lý sau đây:

$$BOD \text{ vào thể tích } V + BOD \text{ sản sinh trong } V - BOD \text{ ra khỏi } V + BOD \text{ bị chuyển hóa} = \text{sự thay đổi BOD trong thể tích } V \text{ trong khoảng thời gian } \Delta t.$$

Vì dòng chảy là dừng nên vận tốc dòng chảy $u = \text{constant}$, cũng lý luận tương tự như khi thiết lập (5.14) ta có phương trình sau đây cho nồng độ L của BOD trong nước sông ở hạ lưu điểm xả:

$$u \frac{\partial L}{\partial x} = -K_1 L \quad \text{Hay} \quad \frac{dL}{L} = -\frac{K_1}{u} dx \quad (5.17)$$

$$\text{Nghiệm số của (5.17) là:} \quad L = L_0 e^{-K_1 x/u} \quad (5.18)$$

Với L_0 là nồng độ BOD tại điểm xả ($x=0$). Vì dòng chảy đều với vận tốc u , nên quãng đường di chuyển của một điểm vật chất su khoảng thời gian T trong dòng chảy sẽ là $x = u.T$

và vì thế biểu thức (5.18) được thay bằng (T là thời gian di chuyển từ x = 0 tới điểm có tọa độ x với vận tốc u):

$$L = L_0 e^{-K_1 T} \quad (5.19)$$

Lưu ý rằng L_0 là nồng độ BOD tại mặt cắt sông có nguồn xả (không phải BOD của nguồn xả). Như vậy khi thay vào (5.16) tốc độ suy giảm oxy sẽ là:

$$r_0 = -K_1 L_0 e^{-K_1 T} \quad (5.20)$$

Tốc độ thấm oxy từ không khí vào nước cũng được xem là tỷ lệ bậc 1 với độ suy giảm oxy hòa tan so với lượng oxy bão hòa. Như vậy:

$$r_R = K_2 (D_s - D_u) \quad (5.21)$$

Trong đó: r_R là tốc độ thấm khí ($\text{g/m}^3\text{-ngày}$ hoặc mg/L-ngày); K_2 là hằng số thấm khí ($1/\text{ngày}$); D_s là nồng độ oxy bão hòa trong nước (g/m^3 hoặc mg/L); D_u là nồng độ oxy hòa tan (g/m^3 hoặc mg/L).

Một trong các công thức thực nghiệm sử dụng cho các sông có độ sâu từ 0,6 đến 3,4 mét là:

$$K_2 = \frac{5,23u}{H^{1,67}} \quad (5.22)$$

Với H là độ sâu trung bình (m) và u là vận tốc trung bình (m/s).

Công thức (5.18) có thể biến đổi về dạng:

$$K_1 = \frac{u}{x} \ln \frac{L_0}{L} \quad (5.23)$$

(5.23) thường được dùng để xác định hệ số K_1 trong dòng chảy đều nếu biết nồng độ L_0 và nồng độ L tại điểm X từ điểm xả.

Các hằng số K_1 và K_2 nói chung là hàm số của nhiệt độ và được xác định theo giá trị của hằng số này ở 20°C theo công thức:

$$K_{1,T} = K_{1,20} (1,047)^{(T-20)} \quad ; \quad K_{2,T} = K_{2,20} (1,022)^{(T-20)} \quad (5.24)$$

Với giả thiết xáo trộn đều (well-mixed) trên mặt cắt ngang ngay tại điểm xả, nồng độ L_0 được xác định như sau:

$$L_0 = \frac{Q_r L_r + q_w L_w}{Q_r + q_w} \quad (5.25)$$

Trong đó: L_r là nồng độ BOD ban đầu của nước sông với lưu lượng Q_r khi chưa có nước thải; L_w là nồng độ BOD trong nguồn thải với lưu lượng q_w . (5.25) có thể áp dụng cho DO hoặc nồng độ của một chất nào đó tại mặt cắt sông có nguồn thải.

Với (5.20) – (5.21) phương trình (5.13) có thể viết ở dạng vi phân sau đây:

$$\frac{\partial D_u}{\partial t} + u \frac{\partial D_u}{\partial x} = -K_1 L_0 e^{-K_1 T} + K_2 (D_s - D_u) \quad (5.26)$$

Trong trường hợp chỉ phụ thuộc vào tọa độ không gian x , dùng biến là độ thiếu hụt oxy $D = D_s - D_u$ và $dx = u.dT$ phương trình (5.26) có dạng:

$$\frac{dD}{dT} + K_2 D = K_1 L_0 e^{-K_1 T} \quad (5.27)$$

Tại $T = 0$ độ thiếu hụt oxy là D_0 khi đó nghiệm của (3.27) là :

$$D = \frac{K_1 L_0}{K_2 - K_1} (e^{-K_1 T} - e^{-K_2 T}) + D_0 e^{-K_2 T} \quad (5.28)$$

(5.28) là công thức cổ điển mô tả sự suy giảm Oxy theo mô hình Streeter-Phelps. Công thức này được sử dụng phổ biến để xem xét sơ bộ sự suy giảm của oxy hòa tan trong sông kênh có dòng chảy dừng và đều với một nguồn thải.

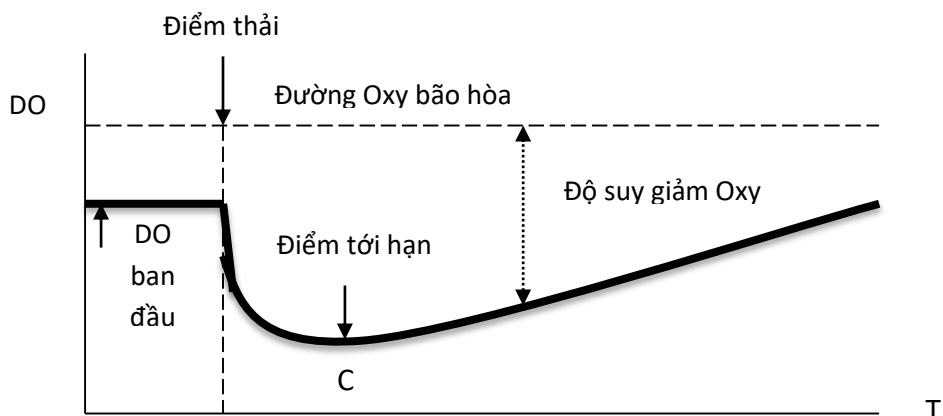
Hình 3.2 là biểu diễn đồ thị đường cong suy giảm oxy dựa theo phương trình (5.27) và (5.28). Sự phân hủy sinh học xảy ra sau khi có xả nước thải vào dòng sông. Sự phân hủy này có sử dụng oxy, do đó đường cong giảm dần (độ suy giảm tăng dần). Do độ thấm oxy từ không khí vào nước tỷ lệ với độ suy giảm, cho nên độ suy giảm tăng thì độ thấm khí cũng tăng và đến một điểm tới hạn X_c , tại đó tốc độ thấm vào bằng tốc độ tiêu thụ oxy, sau điểm này tốc độ oxy hòa tan bắt đầu tăng (độ suy giảm giảm), tốc độ thấm vào lớn hơn tốc độ tiêu thụ do đó đường cong trên đồ thị tăng dần. Tại điểm tới hạn X_c độ suy giảm đạt giá trị cực đại D_c tại đó trong phương trình (5.27) xảy ra $dD/dT = 0$, hay:

$$D_c = \frac{K_1}{K_2} L_0 e^{-K_1 T} \quad (5.29)$$

Trong đó: T là thời gian dịch chuyển với vận tốc u từ điểm xả tới điểm tới hạn. Giá trị T có thể xác định bằng cách vi phân phương trình (3.16) theo T và cho đạo hàm bằng 0. Kết quả là biểu thức:

$$T = \frac{1}{K_2 - K_1} \ln \left[\frac{K_2}{K_1} \left(1 - \frac{D_0(K_2 - K_1)}{K_1 L_0} \right) \right] \quad (5.20)$$

Từ công thức này có thể xác định tọa độ X_c của điểm tới hạn C tại đó xảy ra cực trị: $X_c = u.T$ (hình 6.2).



Hình 9.2. Đường cong suy giảm Oxy

V.3.3 ĐƯỜNG CONG SUY GIẢM OXY CÓ KỂ ĐẾN QUÁ TRÌNH NITROGEN

Các hợp chất Nitơ hữu cơ khi bị thủy phân trong dòng chảy cũng có vai trò quan trọng trong quá trình làm suy giảm Oxy hòa tan. Do tác động của các vi sinh vật sống trong nước Ammonia (NH_4^+) bị hấp thu và tạo ra Nitrite (NO_2^-) và Nitrate (NO_3^-). Quá trình này có tên là Nitrat hóa và lượng Oxy cần thiết cho quá trình này có tên là nhu cầu Oxy Nitơ (NOD) và mô phỏng bằng các phản ứng:



Đối với quá trình Nitơ cũng giả thiết tuân theo các phản ứng bậc 1 như BOD, tức là $N = N_0 e^{-K_n t}$, trong đó N là nồng độ NOD (mg/L) trong dòng chảy tại thời điểm t , còn N_0 là nồng độ NOD trong dòng chảy ngay tại điểm xả. K_n là hệ số suy giảm NOD (1/ngày). Nếu kể tới quá trình Nitrate hóa, phương trình suy giảm Oxy có dạng:

$$\frac{dD}{dt} = K_1 L_0 e^{-K_1 T} + K_n N_0 e^{-K_n T} - K_2 D \quad (5.32)$$

Nghiệm của (5.32) là

$$D = \frac{K_1 L_0}{K_2 - K_1} (e^{-K_1 T} - e^{-K_2 T}) + \frac{K_n N_0}{K_2 - K_n} (e^{-K_n T} - e^{-K_2 T}) + D_0 e^{-K_2 T} \quad (5.33)$$

Dễ thấy (5.28) là một trường hợp của (5.33) khi coi $K_n = 0$. Cũng từ (5.32) có thể tính được giá trị tới hạn D_c của độ suy giảm Oxy:

$$D_c = \frac{1}{K_2} (K_1 L_0 e^{-K_1 T} + K_n N_0 e^{-K_n T}) \quad (5.34)$$

V.3.4 ĐƯỜNG CONG SUY GIẢM OXY CÓ KỂ ĐẾN QUÁ TRÌNH PHÂN TÁN

Nếu gọi $C^*(y,z,t)$ là nồng độ một chất bất kỳ tại điểm (y,z) trên mặt cắt ngang $A(x_0,y,z,t)$ nằm tại điểm x_0 vuông góc với trục x của dòng chảy và $u(y,z,t)$ là vận tốc dòng chảy tại

điểm (y,z,t) này, thì tổng lượng vật chất qua phân tố diện tích dA trong một đơn vị thời gian sẽ là $u.C^*.dA$ và tổng lượng vật chất M qua cả diện tích A sẽ là:

$$M = \int_A^{+\infty} u.C^*.dA \quad (5.35)$$

Nói chung u và C^* không giống nhau tại các điểm thuộc mặt cắt A; gọi U và C là các giá trị trung bình tương ứng trên mặt cắt A của u và C^* , khi đó sẽ có $u = U + u'$ và $C^* = C + c'$ thay vào (5.35) sẽ được:

$$M = A.U.C + \int u'.c'.dA \quad (5.36)$$

Số hạng thứ 2 (tích phân) trong (5.36) là phần vật chất qua mặt cắt A do sự phân bố không đều của vận tốc và nồng độ so với giá trị trung bình trên mặt cắt ngang. Phần này có tên là độ phân tán (dispersion). Người ta giả thiết rằng phần khối lượng này tuân theo luật Fick, khi đó công thức (5.36) có dạng:

$$M = A.U.C - A.E.\frac{\partial C}{\partial x} \quad (5.37)$$

Trong đó E được gọi là hệ số phân tán (dispersion coefficient). Hệ số này nói chung là hàm số của vận tốc và mật độ. Cũng do ý nghĩa này đối với sông có mặt cắt ngang rộng và lớn với vận tốc và nồng độ tức thời khác không nhiều vận tốc và nồng độ trung bình mặt cắt, do đó phần đóng góp do sự phân tán sẽ nhỏ và kéo theo hệ số E sẽ nhỏ. Nếu C là nồng độ trung bình mặt cắt của một chất bất kỳ R_a là tốc độ sản sinh và R_s là tốc độ mất vật chất trong thể tích V, áp dụng nguyên lý cân bằng vật chất như đã nêu ở phần trên (với BOD và DO) ta có phương trình cân bằng sau cho trường hợp không dừng:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{1}{A}\frac{\partial}{\partial x}\left(AE\frac{\partial C}{\partial x}\right) + R_a - R_s \quad (5.38)$$

$$\text{Hay } \frac{\partial C}{\partial t} + U^*\frac{\partial C}{\partial x} = E\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + R_a - R_s \quad (5.39)$$

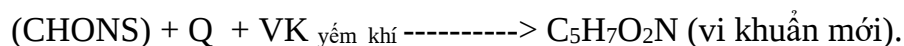
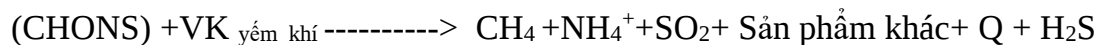
Với U^* là vận tốc trung bình mặt cắt đã được hiệu chỉnh. (5.39) là dạng thường gặp trong bài toán lan truyền chất có tính tới các quá trình chuyển hóa, tất nhiên các số hạng R_a và R_s sẽ có dạng cụ thể tùy thuộc vào vật chất cụ thể cần mô phỏng. Nói chung để giải (5.39) phải nhờ các mô hình số trên máy tính, tuy nhiên do (5.39) có dạng chung nên có thể áp dụng cùng thuật toán số.

V.3.5 NHẬN XÉT

Ưu điểm: Mô hình Streeter -Phelps dùng để diễn tả quá trình tiêu thụ oxy trong các phản ứng sinh hoá của chất ô nhiễm hữu cơ và quá trình gia tăng ôxy trong các phản ứng khuếch tán khí vào nước để cung cấp thêm oxy, tính toán tải lượng BOD tối đa cho phép đổ vào sông nhằm đánh giá khả năng tự làm sạch của các đoạn sông.

Hạn chế: Chất hữu cơ không phải lúc nào cũng ở trong trạng thái lơ lửng mà cũng có lắng đọng xuống đáy. Dưới tác động của dòng chảy một phần chất ô nhiễm bị oxy-hóa, nhưng phần lớn chất cặn bị yếm khí. Tuy nhiên khảo sát chi tiết phân hủy rất khó khăn nên nó được bỏ qua trong quá trình nghiên cứu. Thêm vào đó hiện tượng quang hợp của thực vật sinh ra oxy cung cấp oxy trong nước, tuy nhiên cơ chế này rất phức tạp vì thế cũng bỏ qua trong quá trình nghiên cứu.

Hạn chế của mô hình là chưa có nêu rõ tốc độ sinh trưởng của các sinh vật yếm khí, vì nó cũng là một trong yếu tố giúp phân giải các chất ô nhiễm hữu cơ trong nước. Các chất hữu cơ bị lắng xuống đáy tạo thành và kết hợp một với xác động thực vật thủy sinh, phần lớn ở dưới đáy ít được tiếp xúc với oxy, do đó nhờ những vi sinh vật yếm khí phân hủy các hợp chất hữu cơ và được thực hiện bởi 2 quá trình:



Bên cạnh đó, các sinh vật thân mềm cũng tham gia vào quá trình lọc sạch nước, nhưng đã bỏ qua yếu tố này. Do đó đây cũng là một trong nhược điểm mô hình.

V.3.6 BÀI TẬP VẬN DỤNG MÔ HÌNH CỦA STREETER-PHELPS

Ví dụ 1: Nước thải của một nhà máy pha trộn với nước sông, kết quả là BOD = 10,9 mg/L, DO = 7,6 mg/L. Sự pha trộn diễn ra tại nhiệt độ 20°C, tốc độ phân hủy các chất hữu cơ trên sông được xác định là 0,2 ngày⁻¹. Vận tốc trung bình của dòng chảy là 0,3 m/s, độ sâu trung bình là 3m. Cho biết DO bão hòa = 9,1 mg/L.

- Hãy tính thời gian và khoảng cách theo dòng chảy tại đó độ thiếu hụt là cực đại?
- Hãy tìm giá trị nhỏ nhất của oxy hòa tan (DO)?

Bài làm:

Độ thiếu hụt ban đầu:

$$D_0 = 9,1 - 7,6 = 1,5 \text{ mg/L}$$

Đánh giá hệ số tốc độ hòa tan oxy qua mặt thoáng (ngày⁻¹)

$$K_a(T) = \frac{2,26v}{H^{\frac{2}{3}}} e^{\theta(T-20)} (\text{ngày}^{-1}) \leftrightarrow K_a(20) = \frac{2,26.0,3}{3^{\frac{2}{3}}} e^{\theta(20-20)} \approx 0,33 (\text{ngày}^{-1})$$

Tính thời gian khi độ thiếu hụt đạt cực đại với t_c :

$$t_c = \frac{1}{K_a - K_d} \ln \left\{ \frac{K_a}{K_d} \left[1 - \frac{D_0(K_a - K_d)}{K_d L_0} \right] \right\}$$

$$= \frac{1}{0,33 - 0,2} \ln \left\{ \frac{0,33}{0,2} \left[1 - \frac{1,5(0,33 - 0,2)}{0,2 \cdot 10,9} \right] \right\} = 3,13 \text{ (ngày)}$$

$$x_c = vt_c = 0,3 \text{ m/s} \cdot 86400 \text{ s/ngày} \cdot 3,13 \text{ ngày} = 81129 \text{ (m)}$$

Giá trị nhỏ nhất của DO cũng đạt được khi D_c là lớn nhất. Độ thiếu hụt DO cực đại là:

$$D_c = \frac{K_d}{K_a} L_0 e^{-K_d t} = \frac{0,2}{0,33} \cdot 10,9 \cdot e^{-0,2 \cdot 3,13} = 3,48 \text{ (mg/L)}$$

$$DO_{min} = 9,1 - 3,48 = 5,62 \text{ (mg/L)}$$

Ví dụ 2: Một khu công nghiệp xả nước thải vào sông. Lưu lượng dòng nước thải là 9600 m³/ngày, BOD₅ (ở 20°C) là 30 mg/l, nồng độ oxy hòa tan trong nước thải là 2 mg/l, nhiệt độ dòng thải là 22°C.

Dòng chảy của sông có lưu lượng là 1500 m³/giờ, BOD₅ (ở 20°C) là 2,5 mg/l, nồng độ oxy hòa tan là 7 mg/l, nhiệt độ dòng chảy là 20°C. Dòng chảy có vận tốc trung bình là 0,3 m/s, độ sâu trung bình là 2,5 m. Biết rằng sự hòa trộn hoàn toàn diễn ra tức thời. Lấy hệ số tốc độ phân hủy các chất hữu cơ K_1 tại nhiệt độ 20°C là 0,15 ngày⁻¹. Sử dụng công thức O'Connor - Dobbins tính K_a (20°C).

$$K_a^{20} = 3.93 \frac{\bar{u}^{0.5}}{H^{1.5}} \text{ (ngày}^{-1}\text{)}$$

(Cho biết DO_{bh} ở 20°C là 9,2 mg/l và ở 21°C là 9 mg/l)

Sử dụng mô hình Streeter – Phelps tính nồng độ oxy hòa tan tại khoảng cách 5 km so với nguồn thải.

Bài làm

Dòng nước thải: $Q_w = 9600 \text{ m}^3/\text{ngày} = 400 \text{ m}^3/\text{giờ};$

$$BOD_{5,w} = 30 \text{ mg/l};$$

$$DO_w = 7 \text{ mg/l};$$

$$T_w = 22^\circ\text{C}.$$

Dòng nước sông: $Q_r = 1500 \text{ m}^3/\text{giờ};$

$$BOD_{5,r} = 2.5 \text{ mg/l};$$

$$DO_r = 2 \text{ mg/l};$$

$$T_r = 20^\circ\text{C};$$

$$\bar{u} = 0.3 \text{ m/s}; \quad H = 2.5 \text{ m.}$$

$$K_1^{20} = 0,15 \text{ ngày}^{-1}.$$

$$DO(5000) = ?$$

Bài làm

Sử dụng các công thức tiến hành tính toán:

$$K_a^{20} = 3.93 \frac{\bar{u}^{0.5}}{H^{1.5}} = 3.93 \frac{0.3^{0.5}}{2.5^{1.5}} = 0.545 \text{ (ngày}^{-1}\text{)}$$

Lưu lượng pha trộn giữa nước thải và nước sông:

$$Q_0 = Q_w + Q_r = 400 + 1500 = 1900 \text{ (m}^3\text{/giờ)}$$

BOD₅ pha trộn ở 20°C:

$$BOD_{5,0} = \frac{BOD_{5,w}Q_w + BOD_{5,r}Q_r}{Q_w + Q_r} = \frac{30 \times 400 + 2.5 \times 1500}{1900} = 8.29 \text{ (mg/l)}$$

Nồng độ chất hữu cơ ở thời điểm ban đầu:

$$L_0 = \frac{BOD_{5,0}}{1 - e^{-K_1 t}} = \frac{8.29}{1 - e^{-0.15 \times 5}} = 15.71 \text{ (mg/l)}$$

Nồng độ oxy hòa tan pha trộn ban đầu:

$$DO_0 = \frac{DO_{w,w}Q_w + DO_{r,r}Q_r}{Q_w + Q_r} = \frac{7 \times 400 + 2 \times 1500}{1900} = 5.95 \text{ (mg/l)}$$

Nhiệt độ pha trộn giữa nước thải và nước sông:

$$T_0 = \frac{T_w Q_w + T_r Q_r}{Q_w + Q_r} = \frac{22 \times 400 + 20 \times 1500}{1900} = 20.42 \text{ (}^\circ\text{C)}$$

Hệ số tốc độ phân hủy chất hữu cơ sau khi pha trộn:

$$K_1^{20.42} = K_1^{20} \times K_T^{(20.42-20)} = 0.15 \times 1.05^{0.42} = 0.15 \text{ (ngày}^{-1}\text{)}$$

Hệ số thấm sau khi pha trộn:

$$K_a^{20.42} = K_a^{20} \times e^{\theta(20.42-20)} = 0.545 \times e^{0.57 \times 0.42} = 0.55 \text{ (ngày}^{-1}\text{)}$$

Thực hiện tính toán nội suy được nồng độ oxy hòa tan bão hòa DO_{bh}(20.42°C) là 9.12 mg/l.

Độ thiếu hụt oxy ban đầu sau khi pha trộn:

$$D_0 = DO_{bh} - DO_0 = 9.12 - 5.95 = 3.17 \text{ (mg/l)}$$

BOD toàn phần tại điểm cách nguồn thải 5000 m:

$$BOD(5000) = L_0 \times e^{-K_1 x / \bar{u}} = 15.71 \times e^{-0.15 \times 5000 / 0.3 \times 3600 \times 24} = 15.26 \text{ (mg/l)}$$

Độ thiếu hụt oxy và nồng độ oxy hòa tan tại vị trí 5000 m:

$$D = D_0 e^{-k_a x/\bar{u}} + \frac{k_1 L_0}{k_a - k_1} \left(e^{-k_1 x/\bar{u}} - e^{-k_a x/\bar{u}} \right) = 3.17 \times e^{-0.55 \times 5000 / 0.3 \times 3600 \times 24} + \left(e^{-0.15 \times 5000 / 0.3 \times 3600 \times 24} - e^{-0.55 \times 5000 / 0.3 \times 3600 \times 24} \right) = 3.27 \text{ (mg/l)}$$

Suy ra $DO(5000) = DO_{bh} - D(5000) = 9.12 - 3.17 = 5.85 \text{ (mg/l)}$

Ví dụ 3: Xét dòng chảy trong kênh nhỏ có lưu lượng $4\text{ m}^3/\text{s}$. Nồng độ BOD trong dòng chảy được cho phép sao cho duy trì nồng độ Oxy hòa tan không dưới $5,5 \text{ mg/L}$. Giá trị K_1 là $0,26 \text{ 1/ngày}$ ở nhiệt độ 25°C . Lưu lượng nước thải không vượt quá $1,5 \text{ m}^3/\text{s}$. Nhiệt độ của nước sông là 25°C và giá trị K_2 là $0,41 \text{ 1/ngày}$ ở 25°C . Ở nhiệt độ này nồng độ Oxy bão hòa trong nước là $8,2 \text{ mg/L}$. Xác định nồng độ BOD cho phép trong nước thải và tại điểm xả trên sông, nếu tại điểm xả trên sông sau khi xáo trộn với nước thải nồng độ Oxy hòa tan là $7,5 \text{ mg/L}$. Nồng độ BOD trong sông khi chưa có nguồn thải là 5mg/L .

Bài làm

Độ suy giảm Oxy tại điểm thải $D_0 = 8,2 - 7,5 = 0,7 \text{ mg/L}$

Độ suy giảm tới hạn $D_c = 8,2 - 5,5 = 2,7 \text{ mg/L}$

Để tìm nồng độ BOD tại điểm xả L_0 và thời gian tới hạn T_c phải dùng đồng thời (3.17) và (3.18).

$$2,7 = \frac{0,26}{0,41} L_0 e^{-0,26.T} ; T = \frac{1}{0,41 - 0,26} \ln \left[\frac{0,41}{0,26} \left(1 - \frac{0,7(0,41 - 0,26)}{0,26 L_0} \right) \right]$$

Dùng phương pháp giải gần đúng liên tục với giá trị T được chọn ngẫu nhiên.

Sau khi tính lặp ta có $T = 2,71 \text{ ngày}$.

Thay vào phương trình đầu tiên ta có $L_0 = 8,59 \text{ mg/L}$.

Dùng công thức (3.13):

$$8,59 = \frac{1,5 L_w + 4.5}{4 + 1,5}$$

Tính được: $L_w = 18,16 \text{ mg/L} \rightarrow$ đây là nồng độ BOD cho phép trong nước thải.

CHƯƠNG VI MỘT SỐ KIẾN THỨC CƠ BẢN LIÊN QUAN ĐẾN MÔ HÌNH CHẤT LƯỢNG NƯỚC

Các phản ứng trong đó một hóa chất chịu sự thay đổi là một khía cạnh quan trọng liên quan tới chất đó trong môi trường, nhưng điều quan trọng hơn là phải xem xét tốc độ lan truyền của hóa chất đó trong môi trường nước. Trong chương này, chúng ta sẽ thảo luận ba quá trình của lan truyền khối chất (mass transport) trong hệ thống sinh thái nước: sự lan truyền do dòng chảy của khối nước (sự chuyển tải -advection), sự lan truyền do sự hòa trộn bên

trong khối nước (sự phân tán - dispersion), và sự lan truyền các hạt trầm tích bên trong phạm vi cột nước và giữa nước - đáy.

VI.1 HIỆN TƯỢNG LAN TRUYỀN TRONG NƯỚC

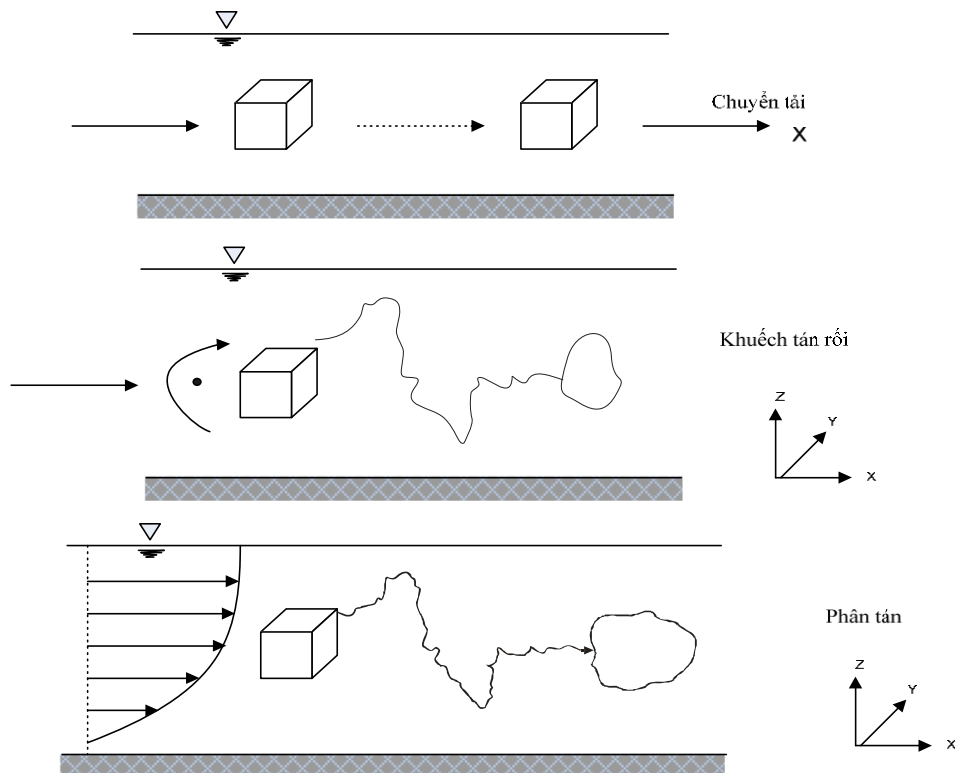
Chất ô nhiễm trong môi trường nước tồn tại ở dạng hòa tan và pha hấp thụ. Các chất hòa tan được lan truyền bởi sự di chuyển dòng nước với rất ít hoặc không có sự trượt liên quan tới nước. Chúng hoàn toàn được gia nhập vào trong dòng và di chuyển ở vận tốc nước. Tương tự, những hóa chất được hấp thụ vào vật liệu keo hoặc chất rắn lơ lửng mịn về cơ bản được nạp vào dòng nước, nhưng chúng có thể trải qua quá trình lan truyền bổ sung như: đóng cặn và lắng hoặc cọ xát tái thể rắn.

Sự lan truyền các chất ô nhiễm trong nước chủ yếu dựa vào hai hiện tượng: chuyển tải và phân tán (diffusion). Sự chuyển tải (advection) là sự di chuyển của chất hòa tan hay chất vật liệu hạt rất mịn ở một vận tốc dòng theo một trong ba hướng (dọc, ngang, thẳng đứng). Sự phân tán (dispersion) liên quan đến quá trình trong đó các chất này hòa trộn với nhau trong cột nước. Sự phân tán cũng diễn ra theo cả ba hướng như quá trình chuyển tải. Ba quá trình góp phần hòa trộn gồm:

_Khuếch tán phân tử (Molecular diffusion);

_Khuếch tán rối (Turbulent diffusion);

_Phân tán (Dispersion).



Hình 6.1 Biểu đồ các quá trình lan truyền

- (1) Chuyển tải, sự di chuyển của chất hoà tan hay hạt mịn theo dòng chảy;
- (2) Sự khuếch tán rối, sự lan tỏa của chất hoà tan do mạch động xoáy (eddy fluctuations);
- (3) Sự phân tán, sự lan tỏa của chất hoà tan do mạch động xoáy (eddy fluctuations) trong một trường gradian vận tốc vĩ mô.

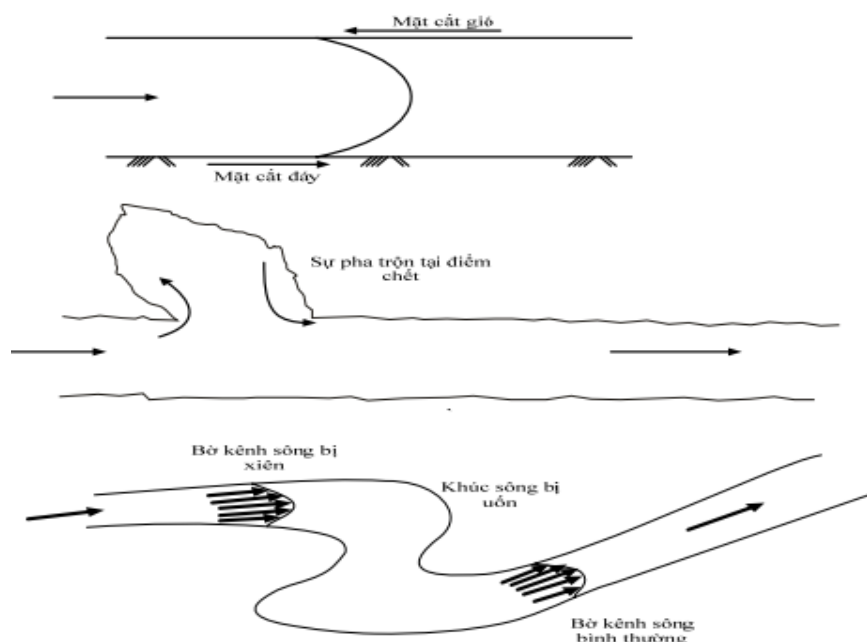
Khuếch tán rối (turbulent diffusion): khuếch tán hay xáo động (turbulent or eddy diffusion) có nghĩa là sự hòa trộn của các chất hòa tan và hạt mịn do sự rối trong phạm vi vĩ mô.

Tóm lại: **Khuếch tán rối** (Turbulent diffusion) là chuyển động hỗn loạn ở vĩ mô rộng.

Khuếch tán phân tử (Molecular diffusion) là sự hòa trộn của các chất hòa tan do chuyển động ngẫu nhiên của phân tử trong lưu chất. Nó được gây nên bởi năng lượng do chuyển động lắc (vibrational motion), tròn quay (rotational motion), tịnh tiến của phân tử (translational motion). Về bản chất khuếch tán phân tử tương tự như entropy ở nơi mà các chất hòa tan di chuyển từ nồng độ cao sang nồng độ thấp theo luật khuếch tán Fick.

Tóm lại: **Khuếch tán phân tử** (Molecular diffusion) là sự chuyển động Brownian của phân tử nước trong phạm vi nhỏ.

Phân tán (dispersion): sự tương tác giữa khuếch tán rối với gradian vận tốc do lực cắt trong khối nước một sự xáo trộn có bậc lớn hơn gọi là phân tán. Sự lan truyền độc chất trong dòng chảy và sông diễn ra chủ yếu là do sự chuyển tải, tuy nhiên sự lan truyền trong hồ và vùng cửa sông diễn ra do sự phân tán. Các gradian vận tốc được tạo bởi lực cắt tại biên các khối nước.



Hình 6-2. Sơ đồ biểu diễn gradian vận tốc khác nhau do ứng suất cắt tại nơi phân cách nước – không khí, đáy – nước, bờ - nước

VI.2 CHUYỂN TẢI

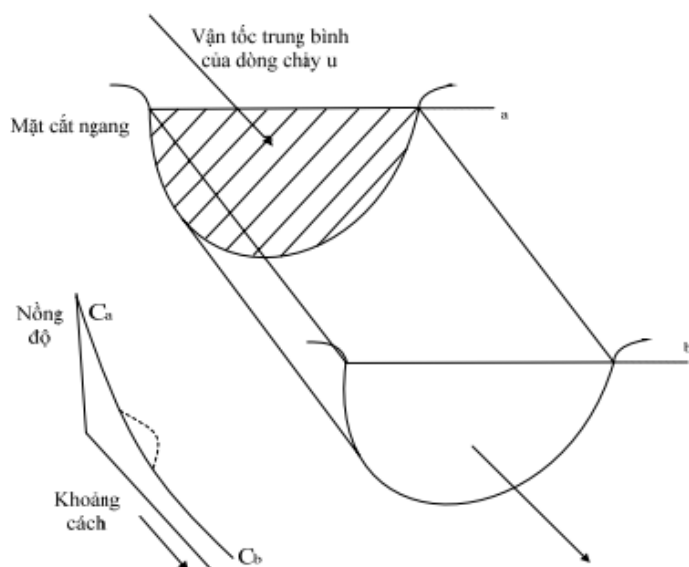
Sự lan truyền theo cơ chế chuyển tải là sự di chuyển của khối lượng được nạp vào trong một dòng chảy và đi từ điểm này đến điểm khác. Đối với một hóa chất di chuyển trong một dòng chảy hay ở sông, sự lan truyền theo cơ chế chuyển tải bằng tích của lưu lượng và nồng độ trung bình. Hình 6.2 minh họa sự di chuyển khối từ điểm a đến điểm b bởi chuyển tải.

$$J = u AC = QC \quad (6.2)$$

Trong đó

J là cường độ (tốc độ) xả thải trong một đơn vị thời gian (dưới đây gọi là tải lượng) có thứ nguyên là khối lượng/thời gian (MT-1)

u là vận tốc dòng trung bình có đơn vị (m/s) LT-1, C là nồng độ có đơn vị ML-3 (mg/m³) và Q là lưu lượng thể tích có đơn vị L³T-1 (m³/s).



Hình 6.2 Chuyển động chuyển tải từ a đến b

Tóm lại **chuyển tải** là phát sinh từ các dòng chảy theo một hướng từ nơi này sang nơi khác và không làm thay đổi thành phần vật chất của nó.

Ví dụ: Tính thông lượng khối lượng trung bình (kg/ngày) của thuốc trừ sâu alachlor đi từ một điểm trong một con sông tiêu nước cho lưu vực nông nghiệp rộng lớn. Nồng độ trung bình của thuốc trừ sâu là 1.0 µg L⁻¹, và dòng chảy trung bình là 50 m³/s. (không lưu ý tới chảy tràn).

Bài làm

$$J = Q.C$$

$$J = \frac{50 \text{ m}^3}{\text{s}} \cdot \frac{1 \text{ } \mu\text{g}}{\text{L}} = \frac{50.1000\text{L}}{\text{s}} \cdot \frac{10^{-9} \text{ kg}}{\text{L}} \cdot \frac{86400 \text{ s}}{\text{ngày}} = 4,320 \text{ kg/ngày}$$

VI.3 KHUẾCH TÁN/ PHÂN TÁN

Khuếch tán là dòng phân tán của các phân tử ô nhiễm từ khu vực có nồng độ cao hơn đến khu vực có nồng độ thấp hơn, nhưng sự khuếch tán cũng có thể xảy ra khi không có gradient nồng độ.

Sự giống và khác nhau của khuếch tán phân tử và khuếch tán rối:

_ Giống nhau: đều có khuynh hướng làm giảm gradient bằng cách chuyển dời từ nơi có nồng độ cao sang nơi có nồng độ thấp hơn.

_ Khác nhau

+ Chuyển động rối lớn hơn chuyển động phân tử => sự khuếch tán rối lớn hơn khuếch tán phân tử.

+ Trong khuếch tán phân tử các chuyển động của chúng được giả định là như nhau, còn khuếch tán rối thì phụ thuộc kích thước rối.

Khuếch tán phân tử xảy ra do sự dịch chuyển tịnh tiến, lúc lắc, quay tròn của các phân tử theo chất lưu, trong trường hợp này là nước. Đây là phản ứng tự phát một cách mạnh mẽ, và kết quả là tăng entropy. Fick xác định khối lượng chuyển đi bởi khuếch tán tỷ lệ với diện tích mặt cắt ngang dụng cụ và độ dốc của gradient nồng độ:

$$J_m \approx A \frac{dC}{dx} \quad (6.8)$$

Trong đó J_m là tốc độ biến đổi dòng thông lượng do khuếch tán, (có thứ nguyên là khối lượng/thời gian, được ký hiệu là MT^{-1}). A là diện tích mặt cắt ngang, dC/dx là gradient nồng độ (có thứ nguyên là khối lượng/thể tích.độ dài, ký hiệu là $ML^{-3}L^{-1}$).

Trong hình 6.5, nếu tăng diện tích mặt cắt ngang gấp đôi cho kết quả thông lượng sẽ tăng lên gấp đôi và nếu gradient nồng độ cũng tăng lên gấp đôi thì thông lượng cũng tăng tương tự.

Cần một hằng số tỷ lệ để thay đổi tính cân đối (phương trình (8)) vào phương trình sau:

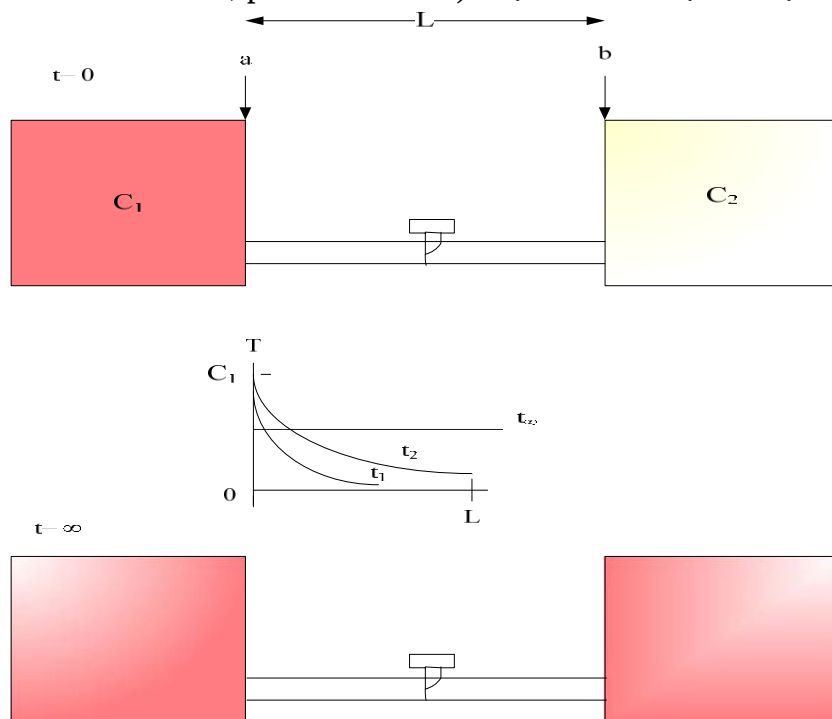
$$J_m = -DA \frac{dC}{dx} \quad (6.9)$$

Từ đó định luật đầu tiên của Fick về khuếch tán có thể được viết trên cơ sở diện tích:

$$F_m = -D \frac{dC}{dx} \quad (6.10)$$

Trong đó, D là hệ số khuếch tán phân tử (có thứ nguyên là độ dài²/thời gian, ký hiệu là L^2T^{-1}), và tốc độ biến thiên thông lượng khối lượng có thứ nguyên là $ML^{-2}T^{-1}$. Dấu trừ bên phải phương trình (6.9) và (6.10) là cần thiết để biến đổi 1 gradient nồng độ (-) sang 1 thông lượng (+) trong hướng x theo quy ước toán học. Chú ý rằng hệ số tỷ lệ D , hệ số khuếch tán phân tử, có đơn vị là L^2T^{-1}

Hệ số khuếch tán phân tử là thuộc tính cơ bản của hóa chất và dung môi (nước). Các hệ số khuếch tán phân tử cho nhiều loại hóa chất trong nước đã được lập thành bảng trong cuốn Sổ tay Hóa học và Vật lý, và chúng có thể được ước lượng từ hóa chất và thuộc tính nhiệt động lực. Ở mức độ $10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$, hệ số khuếch tán phân tử cho biết sự di chuyển rất chậm của khối lượng. Khuếch tán phân tử xuất hiện trong tự nhiên khi chất hóa học vận chuyển qua các lớp biên phân tầng, mỏng, ví dụ như có thể xuất hiện ở mặt phân cách (khí – nước, trầm tích – nước, phân tử – nước) hoặc ở nước đục do cặn



Hình 6.5 Thí nghiệm về định luật 1 của Fick.

Trên Hình 6-5 thể hiện thí nghiệm về sự lan truyền khuếch tán từ a đến b. Bắt đầu thí nghiệm, $t = 0$, tất cả chất hoà tan trong ống nghiệm ở bên tay trái. Khi thí nghiệm bắt đầu, khối chất di chuyển từ khu vực nồng độ cao sang nồng độ thấp theo định luật Fick và khuếch tán cho đến khi trạng thái cân bằng được thiết lập.

Ví dụ: Tính sự biến thiên thông lượng khối (mg/ngày) cho một hoá chất đang khuếch tán giữa hai ống nghiệm. Cho rằng hoá chất đó đang khuếch tán qua khoảng cách 10 cm với gradient nồng độ bằng -1 ($\text{mg} \cdot \text{L}^{-1} \text{ cm}^{-1}$). Cho biết hệ số khuếch tán và diện tích mặt cắt: $D = 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$, $A = 3.14 \text{ cm}^2$

Bài làm

$$J = +D \cdot \frac{C_2 - C_1}{l} A c$$

$$J = \frac{10^{-5} \text{ cm}^2}{\text{s}} \cdot \frac{-1 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}}{10 \text{ cm}^2} \cdot 3.14 \text{ cm}^2 = 0.00271 \text{ mg/ngày}$$

CHƯƠNG VII LÝ THUYẾT VỀ LAN TRUYỀN CHẤT Ô NHIỄM

VII.1 PHƯƠNG TRÌNH VỀ SỰ LAN TRUYỀN CHẤT Ô NHIỄM

Mô hình tính toán sự lan truyền, phân bố các chất ô nhiễm trong dòng chảy là mô phỏng sự biến đổi các chỉ tiêu chất lượng nước theo thời gian trong không gian của dòng chảy. Việc thiết lập mô hình dựa trên cơ sở giải phương trình tải và tải-phân tán các chất ô nhiễm trong dòng chảy. Các yếu tố đặc trưng về dòng chảy được xác định từ các mô hình thủy lực, các số liệu thống kê hoặc đo thực nghiệm như các mô hình Qual I, Qual II; Stream I.

Các mô hình dựa trên cơ sở định luật bảo toàn khối lượng của các chất ô nhiễm mà chúng ta đang xét trong dòng chảy. Thiết lập mô hình vận chuyển-khuếch tán các chất trong dòng chảy dựa trên cơ sở các nguyên lý cơ bản là sự thay đổi theo thời gian của các chất hữu cơ trong một đơn vị thể tích V cho trước nằm trong dòng chảy do các nguyên nhân sau:

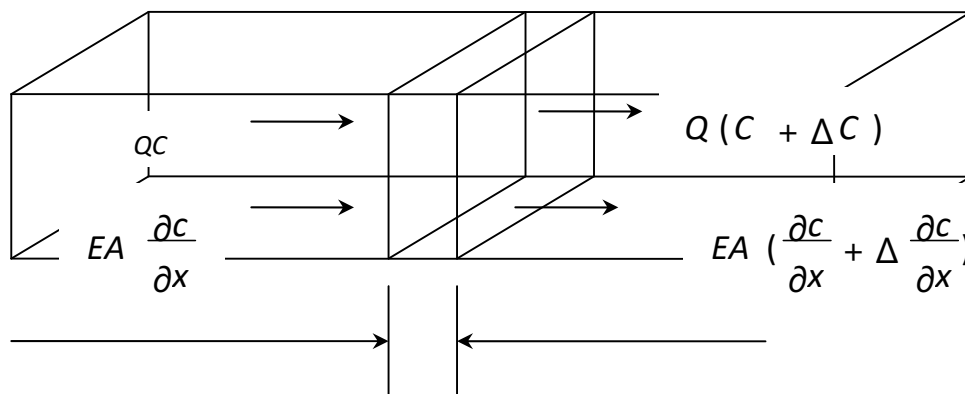
_Trao đổi khối lượng do quá trình khuếch tán vật chất qua diện tích mặt cắt ngang. Đó là quá trình dịch chuyển của vật chất dưới tác động của gradient nồng độ và định luật Fick;

_Sự thay đổi, chuyển hóa các chất trong dòng chảy do các quá trình chuyển hóa sinh hóa và trao đổi vật chất trong dòng chảy. Cơ sở là các phản ứng trao đổi ion, các phản ứng oxy hóa-khử, các quá trình sinh địa hóa, sự thủy phân các chất, các quá trình vật lý, hóa học và sinh học.

Khi xét một đơn vị thể tích V trong dòng chảy, giả thiết rằng sự xáo trộn trong hệ thống là lý tưởng, trên cơ sở định luật bảo toàn khối lượng ta có:

Sự tích lũy vật chất = (lượng vật chất tải vào + lượng vật chất khuếch tán vào) - (lượng vật chất tải ra + lượng vật chất khuếch tán ra) $\pm$ phản ứng chuyển hóa.

Giả thuyết đó được mô phỏng qua hình:



Sơ đồ cân bằng vật chất trong một đơn vị thể tích, ta có:

$$V \frac{\partial C}{\partial t} = \left[QC + \left(-EA \frac{\partial C}{\partial x} \right) \right] - \left\{ Q(C + \Delta C) + \left[-EA \frac{\partial C}{\partial x} \right] \right\} - kCV$$

$$V \frac{\partial C}{\partial t} = -Q \frac{\partial C}{\partial x} \Delta x + EA \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right) \Delta x - kCV$$

Trong đó:

E: Hệ số phân tán dọc dòng chảy, $L^2.T$

$V = A\Delta x$

A: Diện tích mặt cắt ướt, L^2

K: Hằng số tốc độ phân hủy, T^{-1}

Phương trình vi phân một chiều mô phỏng sự thay đổi nồng độ các chất ô nhiễm trên đoạn sông tính toán.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{Q}{A} \frac{\partial C}{\partial x} + E_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right) - kC$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = E_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - kC$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{1}{A(x,t)} \frac{\partial [Q(x,t)C(x,t)]}{\partial x} + \frac{1}{A(x,t)} \frac{\partial}{\partial x} \left[E(x,t)A(x,t) \frac{\partial C}{\partial x} \right] - \frac{dC}{dt}$$

$$\frac{\partial AC}{\partial t} + \frac{\partial AC}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(E_x A \frac{\partial C}{\partial x} \right) - kAC$$

Trong đó:

C: Nồng độ chất ô nhiễm (mg/l)

K: Hằng số tốc độ chuyển hóa các chất ô nhiễm trong quá trình lan truyền ($ngày^{-1}$)

A: Diện tích mặt cắt ướt (m^2).

VII.2 TÍNH TOÁN LAN TRUYỀN CHẤT Ô NHIỄM TRÊN DÒNG SÔNG

Cơ sở toán học của mô hình gồm hai bài toán:

Bài toán thủy động lực một chiều vận chuyển vật chất các chất ô nhiễm dựa trên cơ sở phương trình bảo toàn khối lượng và động lượng và bài toán chuyển hóa các chất ô nhiễm

trong dòng chảy dựa trên cơ sở phương trình cân bằng vật chất. Các giả thiết khi thiết lập mô hình toán học sự lan truyền các chất hữu cơ để phân hủy sinh học theo BOD & DO được coi như là một hệ thống vận chuyển, tải - khuếch tán một chiều các phản ứng sinh hóa xảy ra trong thủy vực dòng chảy là phản ứng bậc một.

VII.2.1 CÁC PHƯƠNG TRÌNH TOÁN CỦA MÔ HÌNH

VII.2.1.1 BÀI TOÁN THỦY ĐỘNG HỌC MỘT CHIỀU

Các phương trình thủy động học một chiều là các phương trình vi phân đạo hàm riêng phi tuyến mô tả các quá trình chảy trong kênh hở do Saint-Venant đề xuất. Dựa trên cơ sở định luật bảo toàn khối lượng và động lượng dựa trên cơ sở một số giả thiết sau :

_ Trong khuôn khổ lý thuyết nước nông, coi áp lực phân bố là thủy tĩnh, tức áp lực tăng tuyến tính với chiều sâu cột nước.

_ Mật độ nước là hằng số, không phụ thuộc vào nồng độ vật chất và độ muối. Từ đó dẫn đến sự bảo toàn khối lượng và thể tích tương đương.

_ Ảnh hưởng của ma sát và quá trình chảy rối có thể biểu thị

_ Lực cản của đáy sông là nhỏ và có thể bỏ qua. Bài toán thủy động lực một chiều trong dòng chảy được viết như sau :

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial t} = q$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{Q^2}{A} \right) + gA \frac{Q|Q|}{K^2} = 0$$

Với: $K = \frac{AR^{\frac{2}{3}}}{n}$

Trong đó:

A: Diện tích mặt cắt ướt (m²).

T: thời gian, T

Q: lưu lượng dòng chảy. L³.T⁻¹

G: Gia tốc trọng trường, L.T⁻²

q: Lưu lượng dòng gia nhập và lấy đi trên một đơn vị chiều dài dòng chảy, L³.L⁻¹.T⁻¹

n: Hệ số maning's

L: Bán kính thủy lực

VII.2.1.2 BÀI TOÁN LAN TRUYỀN CÁC CHẤT HỮU CƠ TRONG DÒNG CHẢY

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = E_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{dC}{dt} + L_{bs}$$

Trong đó:

E_x : Hệ số phân tán dọc dòng chảy (m^2/s)

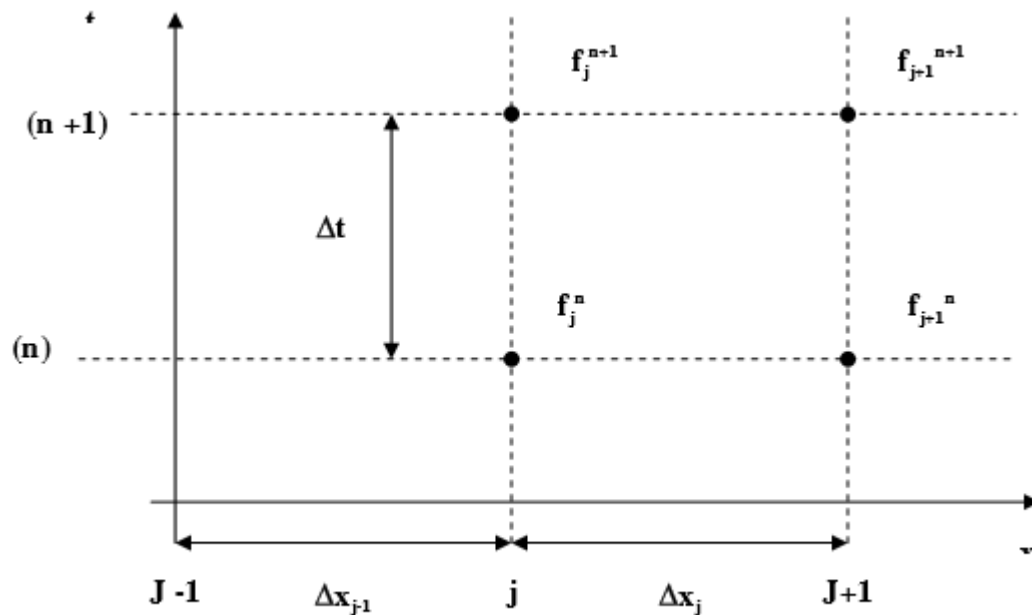
L : Nồng độ chất hữu cơ theo BOD (mg/l)

L_{BS} : Nồng độ các chất hữu cơ theo BOD trong dòng gia nhập q (mg/L)

VII.2.2 TÍNH TOÁN LAN TRUYỀN CHẤT TRONG DÒNG CHẢY

Phương pháp số bài toán dòng chảy không dừng một chiều

Giải hệ phương trình Saint- Venant bằng phương pháp sai phân hữu hạn sơ đồ 4 điểm preissman



Hình 7.1 .Lưới tính cho sơ đồ sai phân 4 điểm Preissmann

Hàm liên tục $f(x,t)$ các đạo hàm theo thời gian t và theo không gian x của hàm $f(x,t)$ được xấp xỉ bằng các biểu thức sai phân theo sơ đồ 4 điểm Preissman như sau:

$$\frac{\partial f}{\partial t} \approx \frac{(f_{j+1}^{n+1} + f_j^{n+1}) - (f_{j+1}^n + f_j^n)}{2\Delta t}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} \approx \frac{\theta(f_{j+1}^{n+1} - f_j^{n+1}) + (1 - \theta)(f_{j+1}^n - f_j^n)}{\Delta x}$$

Trong đó:

f_j^n : giá trị của f tại thời điểm $(x,t=n)$

$\Delta t, \Delta x$: Bước thời gian và kích thước mắt lưới sai phân

θ : Trọng số cân bằng giao động trong khoảng thời gian khoảng từ 0.5-1.

Hệ phương trình tuyến tính cho đoạn sông $j = \Delta x = x_{j+1} - x_j$ bất kì cho dòng chảy nào của sông, ta có:

$$A\Delta Z_{i+1} + B\Delta Z_i + C\Delta Q_{i+1} + D\Delta Q_i + G = 0$$

$$A'\Delta Z_{i+1} + B'\Delta Z_i + C'\Delta Q_{i+1} + D'\Delta Q_i + G' = 0$$

Trong đó:

A,B,C,D,A',B',C',D': các hệ số phương trình được nêu

$\Delta Z_{i+1}, \Delta Z_i$: Mức tăng mực nước ở thời điểm i+1 và thời điểm i

$\Delta Q_{i+1}, \Delta Q_i$: Mức tăng lưu lượng ở thời điểm i+1 và thời điểm i

Như vậy :

_Với 1 đoạn sông ta có 2 phương trình với 4 ẩn số là lưu lượng và mực nước ở hai thời điểm liên tiếp i và i+1

_Với n đoạn sông ta có 2n phương trình với 2n+2 ẩn số

_Đoạn sông đầu tiên và cuối cùng các ẩn số luôn luôn được xác định (điều kiện biên). Như vậy số ẩn của hệ là (2n+2)-2. Phương pháp giải hệ phương trình được dùng là phương pháp khử Gauss để đưa hệ phương trình về dạng ma trận 3 đường chéo để tính toán các ẩn.

VII.3 TRÌNH TỰ THIẾT LẬP MÔ HÌNH CHẤT LƯỢNG NƯỚC

Trình tự tiến hành xây dựng mô hình chất lượng nước cho dòng chảy sông Hương theo chất hữu cơ dễ bị phân hủy sinh học được tiến hành theo các bước sau :

Mô hình thủy lực :

_Xác định các yếu tố ảnh hưởng đến chế độ thủy lực của dòng chảy.

_Phân đoạn dòng chảy, xác định các điểm cần tính toán trên lưới tính sai phân.

_Giải hệ phương trình, tính toán các thông số :

+Lưu lượng dòng chảy trung bình tại các đoạn sông cần tính toán. Vận tốc dòng chảy trung bình trên các đoạn sông.

+Các đoạn sông chịu ảnh hưởng của triều vận tốc được lấy theo giá trị trung bình cho một chu kỳ triều.

+Diện tích mặt cắt ướt được xác định bằng các số liệu thực đo làm cơ sở cho các số liệu hiệu chỉnh mô hình thủy lực.

Mô hình lan truyền chất dễ phân hủy sinh học:

_Xác định các đặc trưng cơ bản của quá trình lan truyền chất trên các đoạn sông cần tính toán. Các yếu tố đặc trưng cơ bản bao gồm :

_Hệ số phân tán trên các vùng sông có chế độ thủy lực đặc trưng :

+ Dòng chảy ổn định tương đối, dòng chảy thay đổi chậm dần và dòng chảy chịu ảnh hưởng của triều.

+Hằng số tốc độ phân huỷ, chuyển hoá các chất hữu cơ trong dòng chảy.

+Xác định vị trí các nguồn thải, nồng độ các chất hữu cơ bổ sung trên các đoạn sông.

+Giải phương trình vi phân bằng phương pháp sai phân. Sơ đồ tính toán tổng quát bài toán lan truyền các chất ô nhiễm trong dòng chảy.

CHƯƠNG VIII CƠ SỞ LÝ THUYẾT LỰA CHỌN MÔ HÌNH CHẤT LƯỢNG NƯỚC

VIII.1 CÁC BƯỚC THIẾT LẬP MÔ HÌNH CHẤT LƯỢNG NƯỚC

VIII.1.1 BƯỚC ĐẦU

_Mục đích của việc xây dựng mô hình, vấn đề đặt ra để nghiên cứu là vấn đề gì, tính cấp thiết của vấn đề cần nghiên cứu.

_Vấn đề nghiên cứu: cái gì sẽ chuyển biến, thay đổi và sẽ xảy ra trong dòng chảy mà chúng ta nghiên cứu.

_Khả năng cho phép chúng ta nghiên cứu. Các yếu tố cần xác định cũng như khả năng và điều kiện cho phép chúng ta có thể xác định được.

_Các vấn đề chính cần xác định: độ nhớt, tỷ trọng, dòng chảy, hệ số chuyển hoá hay là các quá trình phú dưỡng hoá cần xem xét...Các vấn đề cần đi sâu nghiên cứu, các vấn đề cần giới hạn.

Tóm lại: Cần phải xác định mục đích của việc xây dựng mô hình, việc sử dụng mô hình chất lượng nước có mang ý nghĩa hay tính cấp thiết hay không, và có thể sử dụng kết quả mô hình để đưa ra những phương án giải quyết hay không, thì bước đầu xây dựng mô hình phải được suy xét kỹ càng tránh lãng phí thời gian, công sức, tiền bạc.

VIII.1.2 BƯỚC TIẾP THEO

_Cần nhắc lựa chọn mô hình để nghiên cứu : mô hình vật lý hay mô hình số (numerical model).

Mô hình vật lý: tốn kém do việc phải xây dựng một mô hình thu nhỏ, chi phí vận hành và hiệu chỉnh các thông số mô phỏng điều kiện tự nhiên nhưng tốn kém và đòi hỏi các nhóm chuyên gia có kinh nghiệm lâu năm trong lĩnh vực này.

Mô hình số: cần nhắc lựa chọn giữa mô hình 1D, 2D và 3D. Khoảng thời gian tính toán với

các hệ số. Trung bình trong một chu kỳ thời gian hay tức thời.

Mô hình 1 chiều (1D) : kinh tế thoả mãn yêu cầu. Việc tính toán đơn giản và có thể tính tay. Giúp chúng ta có thể xác định nhanh và có thể sơ bộ xác định được các các hệ số trong quá trình khảo sát và đo đạc thực nghiệm để hiệu chỉnh mô hình loại mô hình này rất phổ biến do số liệu đầu vào đơn giản hơn rất nhiều. Thích hợp cho các nghiên cứu ban đầu.

Khi vấn đề nghiên cứu trở nên phức tạp hơn rất nhiều, mô hình 1D không đáp ứng được yêu cầu của vấn đề đặt ra thì trên cơ sở mô hình 1D có thể dễ dàng phát triển lên 2D, 3D.

Nếu cảm thấy đủ sử dụng rồi thì có thể dừng lại ở đây. Hay nói một cách khác mô hình một chiều là mô hình cơ sở của mô hình chất lượng nước. Đặc biệt đối với các dòng chảy sông, khi không có sự phân vùng trong dòng chảy theo các mặt cắt ngang. Còn theo chiều thẳng đứng ở đây thì thường có thể bỏ qua do chiều sâu thường nhỏ hơn rất nhiều so với chiều rộng.

Mô hình 2D, 3D: kết quả cho chi tiết hơn, tuy nhiên khi xây dựng thường rất khó xác định các hệ số. Khi sử dụng đòi hỏi rất nhiều các hiểu biết sâu và cụ thể về vấn đề mà chúng ta nghiên cứu. Chưa chắc cho chúng ta các kết quả nghiên cứu tốt hơn nhưng chắc chắn cho chúng ta hình ảnh sẽ đẹp hơn và dễ nhìn hơn.

Tóm lại: việc sử dụng mô hình phụ thuộc vào cơ sở dữ liệu đầu vào của mô hình, kinh phí, kinh nghiệm đòi hỏi các chuyên gia, kỹ sư mô hình hiểu sâu và cụ thể vấn đề nghiên cứu.

VIII.2 LỰA CHỌN MÔ HÌNH CHẤT LƯỢNG NƯỚC

VIII.2.1 LỰA CHỌN MÔ HÌNH

Việc lựa chọn mô hình chất lượng nước: cần xem xét mô hình nào là thích hợp cho đối tượng mà chúng ta nghiên cứu dựa trên cơ sở lý thuyết.

Thường vấn đề này đã có người khác lựa chọn vấn đề này giúp chúng ta rồi. Đó là các mô hình đã sử dụng rất rộng rãi gần hơn 100 năm của lịch sử phát triển MHCLN.

Tuy nhiên cần lưu ý: trong các mô hình chất lượng nước đã sử dụng rộng rãi thì các hệ số, các sai số trong điều kiện thực tế của họ đã được hiệu chỉnh trong điều kiện cụ thể của họ.

Như vậy, chúng có sự thừa nhận trong con mắt của rất nhiều người (những người thừa nhận mô hình). Nhưng khi áp dụng vào điều kiện thực tế của chúng ta sẽ xuất hiện các vấn đề:

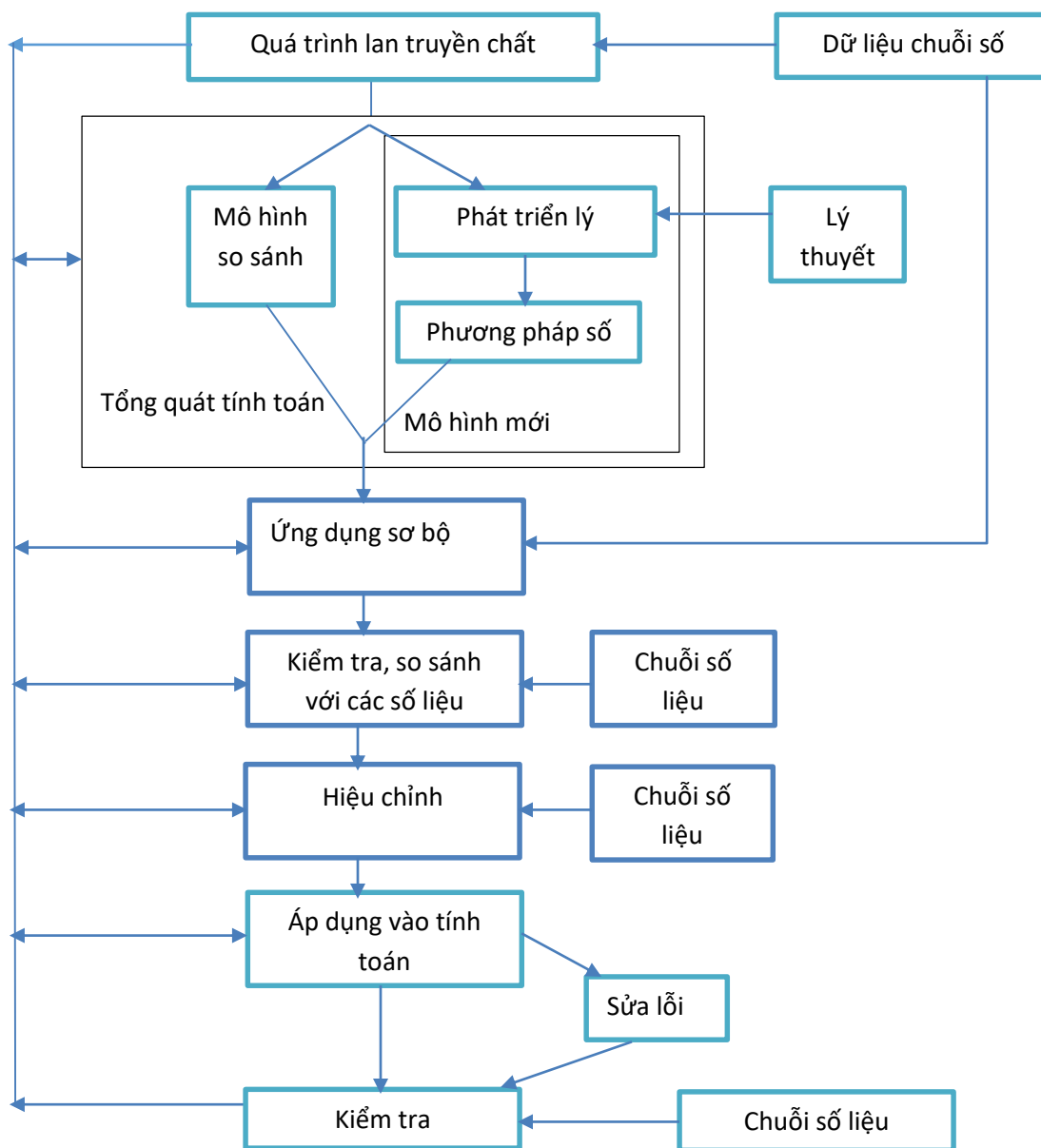
_Kinh phí đầy đủ để mua toàn bộ chương trình tính toán.

_Các dữ liệu, các hệ số có thể thu thập và xác định trong điều kiện cụ thể trên đối tượng của bạn hay không. Nếu không có đủ sẽ xảy ra vấn đề là : đối tượng nghiên cứu của bạn một phần sẽ trong điều kiện của địa phương nghiên cứu và một phần sẽ nằm tại địa điểm của người xây dựng chương trình này.

Vấn đề này, có thể ví dụ như một chiếc ô tô có thể là rất thích hợp, rất tốt trong điều kiện ôn đới nhưng nó có thể trở thành không có giá trị trong điều kiện nhiệt đới. Không có sản phẩm thương mại nào mà có thể áp dụng cho mọi đối tượng.

Như vậy khi muốn sử dụng một chương trình có sẵn cần thiết phải có hiểu rất sâu về các giới hạn, các điều kiện biên, các hệ số của chương trình để có thể cải tiến và hiệu chỉnh cần thiết.

Điều kiện tiên quyết ở đây là: bạn phải xây dựng và lựa chọn các hệ số trong điều kiện cụ thể của bạn.



Hình 7.1 Sơ đồ thiết lập mô hình chất lượng nước

VIII.2.2 SỰ PHÁT TRIỂN LÝ THUYẾT VẤN ĐỀ

Việc đầu tiên cần phát triển lý thuyết của vấn đề của bạn với đối tượng cụ thể mà cần xem xét và đánh giá. Phát triển lý thuyết các vấn đề: phương trình chuyển động, phương trình liên tục và phương trình lan truyền chất.

Quan điểm của Albert Einstein: mỗi mô hình cần phải thoả mãn yêu cầu của thực tiễn và càng đơn giản càng tốt, trừ phi không thể đơn giản hơn.

VIII.2.3 KIỂM ĐỊNH VÀ HIỆU CHỈNH

Bằng các chuỗi số liệu thực đo.

Ví dụ: mô hình tính toán sự lan truyền các chất từ các nguồn thải điểm vào dòng chảy, điều kiện chọn lựa là mùa hè. Các chuỗi số liệu được kiểm định, các hệ số sẽ thay đổi so với điều kiện các mùa khác sẽ không cho chúng ta giá trị xấp xỉ tốt để hiệu chỉnh.

Sau khi sử dụng các chuỗi số liệu để hiệu chỉnh các hệ số sẽ thay đổi. Khi hiệu chỉnh cần lựa chọn một vài hệ số ổn định để hiệu chỉnh các hệ số khác và sau đó tiến hành hiệu chỉnh các hệ số cố định hoặc hiệu chỉnh tất cả các hệ số đồng thời.

Các điều kiện cần làm rõ khi hiệu chỉnh:

_ Điều kiện biên và tải trọng.

_ Điều kiện ban đầu.

Các quá trình đặc trưng cho đối tượng (quá trình mà chúng ta cần mô tả và làm rõ). Các chất hữu cơ : quá trình vật lý, hoá học hay sinh học trong dòng chảy.

Các hệ số cần kiểm định: động học, hệ số, các hệ số đặc trưng cho quá trình chuyển hoá các chất trong dòng chảy.

CHƯƠNG IX TRÌNH BÀY MÔ HÌNH SỐ CHO CHẤT LƯỢNG NƯỚC

Mô hình MIKE11 là một phần mềm kỹ thuật chuyên dụng do Viện Thủy lực Đan Mạch (DHI) xây dựng và phát triển, được ứng dụng để mô phỏng chế độ thủy lực, chất lượng nước và vận chuyển bùn cát vùng cửa sông, trong sông, hệ thống tưới, kênh dẫn và các hệ thống dẫn nước khác. MIKE11 là công cụ lập mô hình động lực một chiều, thân thiện với người sử dụng nhằm phân tích chi tiết, thiết kế, quản lý và vận hành cho sông và hệ thống kênh dẫn đơn giản và phức tạp. Với môi trường đặc biệt thân thiện với người sử dụng, linh hoạt và tốc độ, MIKE11 cung cấp một môi trường thiết kế hữu hiệu về kỹ thuật công trình, tài nguyên nước, quản lý chất lượng nước và các ứng dụng quy hoạch.

Mô đun thủy động lực (HD) là một phần trung tâm của hệ thống lập mô hình MIKE11 và là cơ sở cho hầu hết các mô đun khác: dự báo lũ, tải khuếch tán, chất lượng nước và các mô đun vận chuyển bùn cát.

MIKE11 Mô đun thủy động lực là phần quan trọng nhất trong bộ mô hình MIKE11, được xây dựng từ hệ phương trình Saint - Venant cho dòng một chiều, không ổn định.

_Phương trình liên tục:

$$\frac{\partial Q}{\partial x} + \frac{\partial A}{\partial t} = q$$

_Phương trình động lượng:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\alpha \frac{Q^2}{A} \right) + gA \left(\frac{\partial z}{\partial x} \right) + g \frac{Q \cdot |Q|}{C^2 AR} = 0$$

Trong đó:

Q: lưu lượng mặt cắt

A: diện tích mặt cắt ướt

α : hệ số điều chỉnh

g : Gia tốc trọng trường (ms⁻²)

R : Bán kính thủy lực (m)

C : Hệ số Chezy,

C = Ry/n n - hệ số nhám

y : hệ số thủy lực, theo Maning y = 1/6

Z : Cao trình mực nước ở thời điểm tính toán (m)

q : Lưu lượng nhập lưu trên một đơn vị chiều dài dọc sông (m²s⁻¹)

t : Thời gian (s)

x : Khoảng cách giữa các mặt cắt (m)

Sử dụng sơ đồ sai phân sáu điểm của Abott, để giải hệ phương trình Saint - Venant. Đầu vào là số liệu về đặc tính hệ thống cùng số liệu của nguồn nước vào ra trên toàn hệ thống. Hệ phương trình 4.1 và 4.2 là hệ phương trình vi phân phi tuyến, có hệ số biến đổi. Các nghiệm cần tìm là Q và Z là hàm số của các biến độc lập x, t. Từ hệ phương trình Saint - Venant (1) và (2), ta có thể viết lại theo biến Q và h:

$$\frac{\partial Q}{\partial x} + B \frac{\partial h}{\partial t} = q$$

$$\alpha \frac{\partial Q}{\partial t} + B \frac{\partial}{\partial x} \left(\beta \frac{Q^2}{A} \right) + gA \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right) + g \frac{Q \cdot |Q|}{C^2 AR} = 0$$

Giải hệ phương trình vi phân trên sẽ xác định được giá trị lưu lượng, mực nước (dạng cóc nhảy), tại các mặt cắt ngang trong mạng sông ở mọi thời điểm trong khoảng thời gian nghiên cứu.

Mô đun chất lượng nước MIKE11 Mô đun truyền tải khuếch tán (AD) có chức năng tính toán sự lan truyền của các chất huyền phù hoặc hòa tan (phân hủy) dưới tác động của dòng chảy. Bài toán đặt ra trong nghiên cứu này là bài toán có liên quan đến các chu trình sinh hóa diễn ra trong dòng sông, do đó tác giả không những chỉ sử dụng mô đun truyền tải khuếch tán mà còn phải kết hợp với mô đun sinh hóa (Ecolab) để giải quyết vấn đề.

Phương trình cơ bản trong hai mô đun này là phương trình truyền tải khuếch tán

a) Mô hình mô đun khuếch tán

$$\frac{\partial AC}{\partial t} + \frac{\partial QC}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(AD \frac{\partial C}{\partial x} \right) = -AKC + C_2 Q$$

Trong đó:

A : Diện tích mặt cắt (m²)

C : Nồng độ (kg/m³)

D : Hệ số khuếch tán

Q : Lưu lượng dòng chảy, m³/s

q : Lưu lượng dòng gia nhập trên một đơn vị chiều dài sông, m²/s

K : Hệ số phân hủy sinh học, K chỉ được dùng khi các hiện tượng hay quá trình xem xét có liên quan đến các phản ứng sinh hoá.

Phương trình tải khuếch tán phản ánh hai cơ chế vận chuyển:

- Quá trình vận chuyển chất do dòng chảy (advection)
- Quá trình khuếch tán các chất do dòng chảy rối (turbulent diffusion)

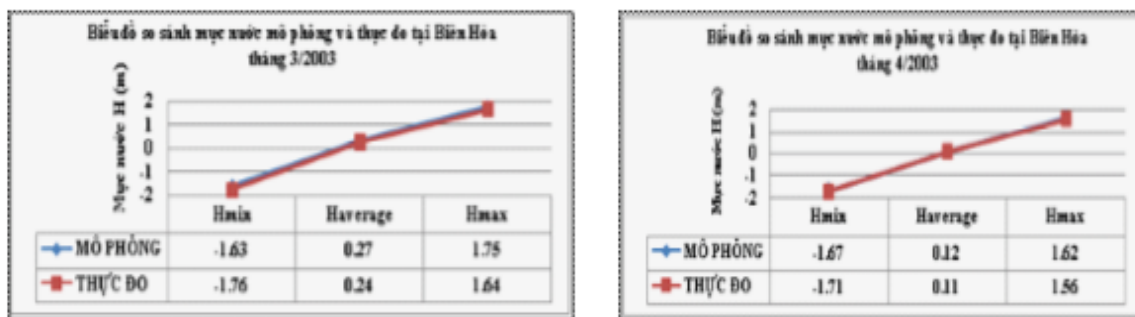
b) Mô đun sinh thái (Ecolab) Mô đun sinh thái trong mô hình MIKE11 giải quyết khía cạnh chất lượng nước trong sông tại những vùng bị ảnh hưởng bởi các hoạt động dân sinh kinh tế.v.v. Mô đun này phải được đi kèm với mô đun tải - khuếch tán, điều này có nghĩa là mô

đun chất lượng nước giải quyết các quá trình biến đổi sinh học của các hợp chất trong sông còn mô đun tải - khuếch tán được dùng để mô phỏng quá trình truyền tải khuếch tán của các hợp chất đó.

Kết quả ứng dụng mô hình MIKE11.

Kết quả tính toán hiệu chỉnh mô hình thủy lực

Mục tiêu của tính toán thủy lực để xác định bộ thông số thủy lực phù hợp nhất đối với lưu vực nghiên cứu, phục vụ cho mô hình chất lượng nước. Căn cứ vào nhiệm vụ tính toán, tài liệu mặt cắt và các tài liệu cơ bản đã thu thập được, sơ đồ tính toán thủy lực cho mạng sông Đồng Nai đoạn chảy qua thành phố Biên Hòa như hình 4.



Hình 4: So sánh mực nước mô phỏng và thực đo tại Biên Hòa vào tháng 3, 4/2003

CHƯƠNG X BÀI TẬP VẬN DỤNG

X.1 BÀI TẬP 1

Calibrate C value with measured water level. Try Ci value between 30, 40, 60 $m^{1/3}/s$. What is your calibrate C? Compute EI, R and other error parameters which are your choice?

No.	Measured	Computed		
	Xi	Y1: Ci = 30	Y2: Ci = 40	Y3: Ci = 60
1	9.2	8.528	9.17	9.17
2	8.23	7.872	8.333	8.235
3	7.35	7.247	7.527	7.323
4	64.9	6.611	6.723	6.413
5	5.5	5.980	5.933	5.513

6	4.7	5.368	5.174	4.634
7	34.7	4.839	4.492	3.788
8	4.1	4.539	4.061	3.149
9	2.92	4.494	3.946	2.927
10	3.2	4.662	4.088	3.066
11	3.1	4.989	4.386	3.315
12	3.5	5.449	4.799	3.63
13	4.47	6.060	5.337	4.033
14	4.1	6.464	5.709	4.38
15	5.2	6.390	5.586	4.2
16	3.9	6.123	5.286	3.886
17	3.7	5.815	4.954	3.553
18	3.1	5.590	4.738	3.4
19	3.4	5.432	4.611	3.348
20	541	5.329	4.54	3.332
21	4.8	5.261	4.504	3.328
22	4.2	5.220	4.486	3.327
23	3.9	5.194	4.476	3.327
24	3.9	5.178	4.472	3.327
25	3.8	5.169	4.469	3.326
26	4.2	5.163	4.468	3.327
27	3	5.161	4.468	3.327
28	4.1	5.158	4.468	3.326
29	3.9	5.157	4.467	3.327
30	4	5.156	4.467	3.327

Bài làm

_Tính toán các thông số thống kê tại C=30, C=40, C=60.

- a) Hệ số hiệu quả. Chỉ số EI càng gần 1 thì số liệu tính toán từ mô hình càng phù hợp với số liệu thực tế

$$EI = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2 - \sum_{i=1}^n (X_i - Y_i)^2}{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}$$

Với X_i là kết quả đo từ thực tế

Y_i là kết quả tính từ mô hình.

n là số mẫu

- b) Khoảng lệch quân phương/ độ lệch chuẩn

Với số liệu do đạc :

$$S_x = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}$$

Với số liệu tính toán từ mô hình:

$$S_y = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}$$

c) Sai số tiêu chuẩn trung bình $RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - Y_i)^2}$

d) Sai số tuyệt đối $MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |X_i - Y_i|$

e) RMSEM $RMSEM = \frac{RMSE}{\bar{X}}$

f) RMSES $RMSES = \frac{RMSE}{S_x}$

- g) Sai số tương đối

$$MPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{X_i - Y_i}{X_i} \right) \times 100$$

- h) Sai số tương đối

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{X_i - Y_i}{X_i} \right| \times 100 = |MPE|$$

- i) Hệ số tương quan: Hệ số tương quan càng gần 1 thì 2 chuỗi số liệu càng có sự liên kết chặt chẽ với nhau.

$$R = \frac{\text{cov}XY}{s_x s_y} \quad \text{cov}XY = \frac{\sum_{i=1}^n ((X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y}))}{(n-1)}$$

Sau khi tính ta được bảng kết quả như sau:

Thông số	C=30	C=40	C=60
EI	0.103	0.663	0.810
Sx	1.527	1.527	1.527
Sy	5.460	6.036	7.086
R	0.150	0.193	0.209
COV XY	1.255	1.779	2.265
RMSE	1.422	0.872	0.655
MAE	1.159	0.643	0.343
RMSEM	0.316	0.194	0.146
RMSES	0.931	0.571	0.429
MPE	-0.322	-0.180	0.074
MAPE	0.322	0.180	0.074

Nhận xét

Nhìn vào bảng ta dễ thấy các thông số của Yi (60) đều có kết quả tốt hơn 2 cái còn lại: EI và R rất gần 1; các tham số MAE, RMSE đều có giá trị nhỏ hơn của Yi(30) và Yi(40). Kết luận, ta nên chọn C=60 vì bộ số liệu được hiệu chỉnh với C = 40 có kết quả phù hợp với thực tế nhất.

X.2 BÀI TẬP 2

The following table three input number and their old output before modifying and new output after modifying each input by increasing 10% (+10%). Compute the input sensitivity index for each input number by applying +10%.

TABLE 1. Input number 1

Pattern number	Old Input	New Input	Old Output	New Output
1	2	2.2	2.51	4.59
2	5	5.5	9.47	10.7
3	0.8	0.88	1.07	1.2

4	0.5	0.55	0.61	0.45
5	0.5	0.55	0.44	0.35
6	0.4	0.44	0.35	0.4
7	0.5	0.55	0.28	0.3
8	0.5	0.55	0.64	0.65

TABLE 2. Input number 2

Pattern number	Old Input	New Input	Old Output	New Output
1	1	1.1	2.51	4.4
2	2	2.2	9.47	10.5
3	2.5	2.75	1.07	1
4	0.2	0.22	0.61	0.5
5	0.2	0.22	0.44	0.4
6	0.2	0.22	0.28	0.25
7	0.2	0.22	0.64	0.7
8	0.3	0.33	0.68	0.75

TABLE 3. Input number 3

Pattern number	Old Input	New Input	Old Output	New Output
1	1	1.1	2.51	2
2	6	6.6	9.47	8
3	3	3.3	1.07	0.2
4	0.9	0.99	0.61	1
5	1	1.1	0.44	0.2
6	0.1	0.01	0.28	0.4
7	0.2	0.02	0.64	0.6
8	0.3	0.33	0.68	0.72

Bài Làm

INPUT NUMBER 1

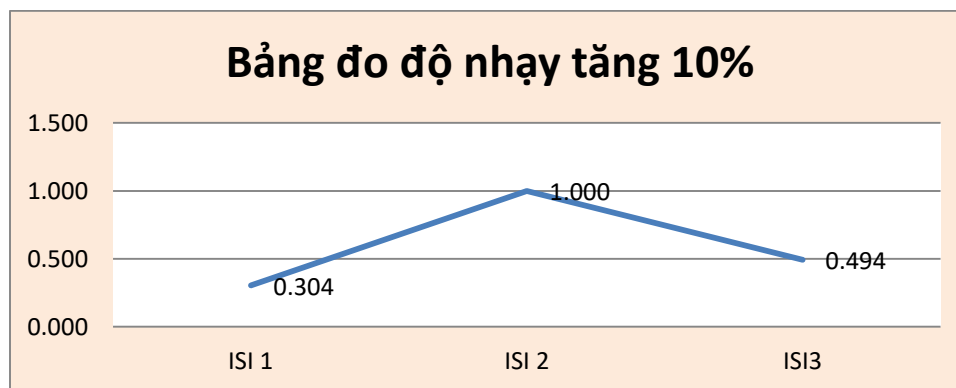
Pattern number	Old Input	New Input	Old OutPut	New Output	(3)-(2)	(5)-(4)	(7)/(6)	(8)^2
-1	-2	-3	-4	-5	-6	-7	-8	-9
1	2	2.2	2.51	4.59	0.2	2.08	10.4	108.160
2	5	5.5	9.47	10.7	0.5	1.23	2.46	6.052
3	0.8	0.88	1.07	1.2	0.08	0.13	1.625	2.641
4	0.5	0.55	0.61	0.45	0.05	-0.16	-3.2	10.240
5	0.5	0.55	0.44	0.35	0.05	-0.09	-1.8	3.240
6	0.4	0.44	0.35	0.4	0.04	0.05	1.25	1.563
7	0.5	0.55	0.28	0.3	0.05	0.02	0.4	0.160
8	0.5	0.55	0.64	0.65	0.05	0.01	0.2	0.040
Total								132.095
INPUT NUMBER 2								
Pattern number	Old Input	New Input	Old OutPut	New Output	(3)-(2)	(5)-(4)	(7)/(6)	(8)^2
-1	-2	-3	-4	-5	-6	-7	-8	-9
1	1	1.1	2.51	4.4	0.1	1.89	18.9	357.210
2	2	2.2	9.47	10.5	0.2	1.03	5.15	26.522
3	2.5	2.75	1.07	1	0.25	-0.07	-0.28	0.078
4	0.2	0.22	0.61	0.5	0.02	-0.11	-5.5	30.250
5	0.2	0.22	0.44	0.4	0.02	-0.04	-2	4.000
6	0.2	0.22	0.28	0.25	0.02	-0.03	-1.5	2.250
7	0.2	0.22	0.64	0.7	0.02	0.06	3	9.000
8	0.3	0.33	0.68	0.75	0.03	0.07	2.333	5.444
Total								434.755
INPUT NUMBER 3								
Pattern number	Old Input	New Input	Old OutPut	New Output	(3)-(2)	(5)-(4)	(7)/(6)	(8)^2
-1	-2	-3	-4	-5	-6	-7	-8	-9
1	1	1.1	2.51	2	0.1	-0.51	-5.100	26.010
2	6	6.6	9.47	8	0.6	-1.47	-2.450	6.003
3	3	3.3	1.07	0.2	0.3	-0.87	-2.900	8.410
4	0.9	0.99	0.61	1	0.09	0.39	4.333	18.778
5	1	1.1	0.44	0.2	0.1	-0.24	-2.400	5.760
6	0.1	0.11	0.28	0.4	0.01	0.12	12.00	144.000

							0	
7	0.2	0.22	0.64	0.6	0.02	-0.04	-2.000	4.000
8	0.3	0.33	0.68	0.72	0.03	0.04	1.333	1.778
Total								214.738

Sau đó tính từng ISI bằng cách lấy từng tổng ở cột (9) chia số lớn nhất ở cột (9). Ta có kết quả sau:

ISI 1	0.303837
ISI 2	1
ISI3	0.493929

Ta vẽ được sơ đồ:



Nhận xét ta thấy ở bảng và biểu đồ trên khi tăng số liệu đầu vào trên 10%, thì số liệu đầu vào ở bảng 2 có độ nhạy nhất.

X.3 BÀI TẬP 3

The table 1 shows three input numbers and their old output before modifying and new output after modifying each input number by increasing 10% (+10%). Table 2 shows the same three input number and their output before modifying and new output after modifying each input number by decreasing 10% (-10%). Compute the input sensitivity index for each input number by applying +10% and -10%.

TABLE 1

Pettern number	Old Input 1	Old Input 2	Old Input 3	old Output	New Output 1	New Output 2	New Output 3
-1	-2	-3	-4	-5	-6	-7	-8

1	2	1	1	2.51	4.59	4.4	2
2	5	2	6	9.47	10.7	10.5	8
3	0.8	2.5	3	1.07	1.2	1	0.2
4	0.5	0.2	0.9	0.61	0.45	0.5	1
5	0.5	0.2	1	0.44	0.35	0.4	0.2
6	0.5	0.2	0.1	0.28	0.3	0.25	0.4
7	0.5	0.2	0.2	0.64	0.65	0.7	0.6

TABLE 2

Pettern number	Old Input 1	Old Input 2	Old Input 3	old output	New Output 1	New Output 2	New Output 3
-1	-2	-3	-4	-5	-6	-7	-8
1	2	1	1	2.51	3.2	1	2.9
2	5	2	6	9.47	9.5	6	8
3	0.8	2.5	3	1.07	1	1	2
4	0.5	0.2	0.9	0.61	0.7	0.5	0.5
5	0.5	0.2	1	0.44	0.5	0.3	0.1
6	0.5	0.2	0.1	0.28	0.7	0.1	0.4
7	0.5	0.2	0.2	0.64	1.4	0.7	1

Bài Làm

INPUT NUMBER 1 (-10%)

Pettern number	Old Input	New Input	Old OutPut	New Output	(3)-(2)	(5)-(4)	(7)/(6)	(8)^2
-1	-2	-3	-4	-5	-6	-7	-8	-9
1	2	1.8	2.51	3.2	-0.2	0.69	-3.45	11.903
2	5	4.5	9.47	9.5	-0.5	0.03	-0.06	0.004
3	0.8	0.72	1.07	1	-0.08	-0.07	0.875	0.766
4	0.5	0.45	0.61	0.7	-0.05	0.09	-1.8	3.240
5	0.5	0.45	0.44	0.5	-0.05	0.06	-1.2	1.440
6	0.5	0.45	0.28	0.7	-0.05	0.42	-8.4	70.560
7	0.5	0.45	0.64	1.4	-0.05	0.76	-15.2	231.040
Total								318.952

INPUT NUMBER 2 (-10%)

Pettern number	Old Input	New Input	Old OutPut	New Output	(3)-(2)	(5)-(4)	(7)/(6)	(8)^2
-1	-2	-3	-4	-5	-6	-7	-8	-9
1	1	0.9	2.51	1	-0.1	-1.51	15.1	228.010
2	2	1.8	9.47	6	-0.2	-3.47	17.35	301.023
3	2.5	2.25	1.07	1	-0.25	-0.07	0.28	0.078
4	0.2	0.18	0.61	0.5	-0.02	-0.11	5.5	30.250
5	0.2	0.18	0.44	0.3	-0.02	-0.14	7	49.000
6	0.2	0.18	0.28	0.1	-0.02	-0.18	9	81.000
7	0.2	0.18	0.64	0.7	-0.02	0.06	-3	9.000
Total								698.361

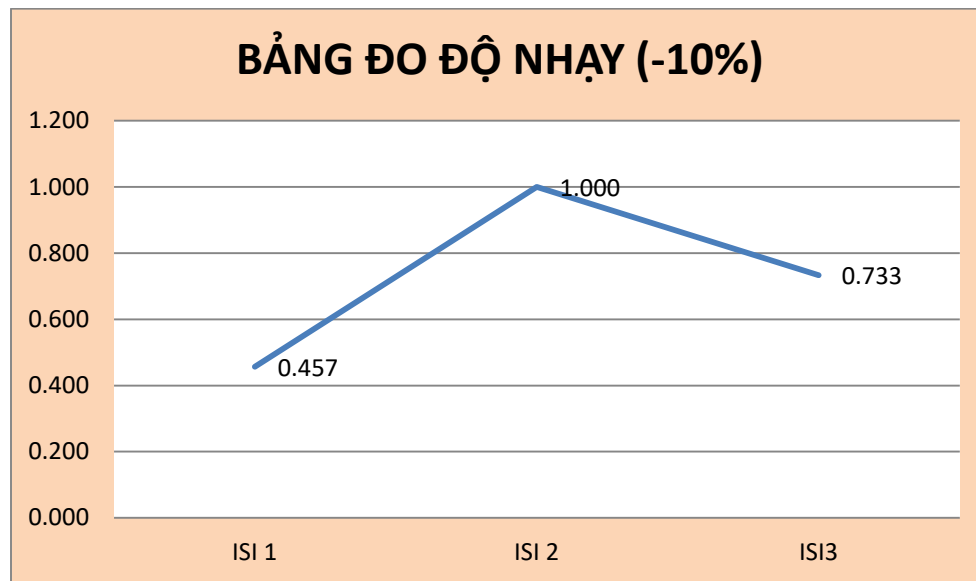
INPUT NUMBER 3 (-10%)

Pettern number	Old Input	New Input	Old OutPut	New Output	(3)-(2)	(5)-(4)	(7)/(6)	(8)^2
-1	-2	-3	-4	-5	-6	-7	-8	-9
1	1	0.9	2.51	2.9	-0.1	0.39	-3.900	15.210
2	6	5.4	9.47	8	-0.6	-1.47	2.450	6.003
3	3	2.7	1.07	2	-0.3	0.93	-3.100	9.610
4	0.9	0.81	0.61	0.5	-0.09	-0.11	1.222	1.494
5	1	0.9	0.44	0.1	-0.1	-0.34	3.400	11.560
6	0.1	0.09	0.28	0.4	-0.01	0.12	12.000	144.000
7	0.2	0.18	0.64	1	-0.02	0.36	18.000	324.000
Total								511.876

Sau đó tính từng ISI bằng cách lấy từng tổng ở cột (9) chia số lớn nhất ở cột (9). Ta có kết quả sau:

ISI 1	0.456715
ISI 2	1
ISI3	0.732968

Sau đó ta vẽ được biểu đồ:



Nhận xét: ta thấy ở bảng và biểu đồ trên khi giảm số liệu đầu vào trên 10%, thì số liệu đầu vào ở bảng 2 có độ nhạy nhất.

Tương tự cách làm ở bảng giảm 10%, ta có bảng tăng 10% số liệu đầu vào, được thể hiện dưới đây:

INPUT NUMBER 1 (+10%)

Pettern number	Old Input	New Input	Old OutPut	New Output	(3)-(2)	(5)-(4)	(7)/(6)	(8)^2
-1	-2	-3	-4	-5	-6	-7	-8	-9
1	2	2.2	2.51	4.59	0.2	2.08	10.4	108.16
2	5	5.5	9.47	10.7	0.5	1.23	2.46	6.0516
3	0.8	0.88	1.07	1.2	0.08	0.13	1.625	2.64062
4	0.5	0.55	0.61	0.45	0.05	0.16	-3.2	10.24
5	0.5	0.55	0.44	0.35	0.05	0.09	-1.8	3.24
6	0.5	0.55	0.28	0.3	0.05	0.02	0.4	0.16
7	0.5	0.55	0.64	0.65	0.05	0.01	0.2	0.04
Total								130.532

INPUT NUMBER 2 (+10%)

Pettern number	Old Input	New Input	Old OutPut	New Output	(3)-(2)	(5)-(4)	(7)/(6)	(8)^2
-1	-2	-3	-4	-5	-6	-7	-8	-9
1	1	1.1	2.51	4.4	0.1	1.89	18.9	357.21
2	2	2.2	9.47	10.5	0.2	1.03	5.15	26.5225

3	2.5	2.75	1.07	1	0.25	-	0.07	-0.28	0.0784
4	0.2	0.22	0.61	0.5	0.02	-	0.11	-5.5	30.25
5	0.2	0.22	0.44	0.4	0.02	-	0.04	-2	4
6	0.2	0.22	0.28	0.25	0.02	-	0.03	-1.5	2.25
7	0.2	0.22	0.64	0.7	0.02	-	0.06	3	9
Total									429.311

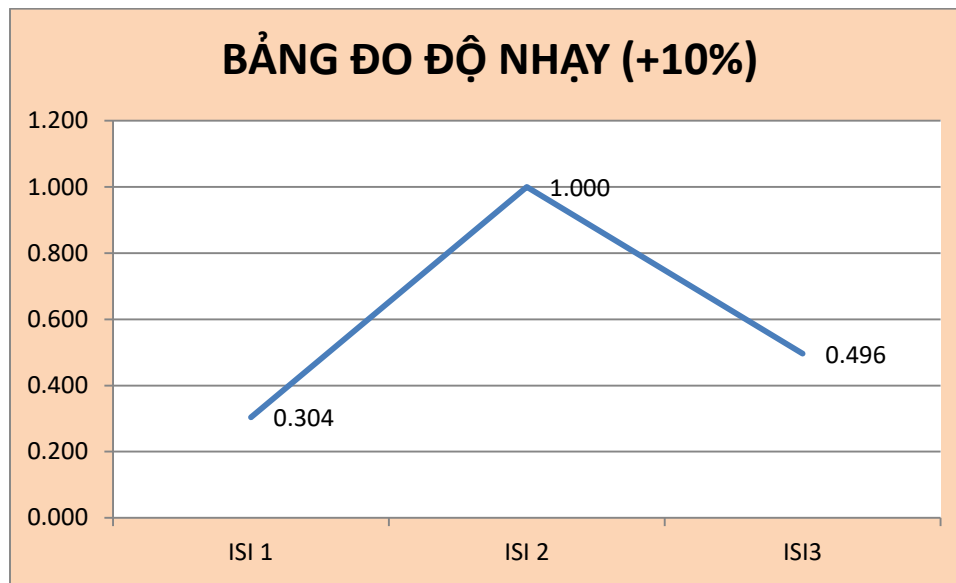
INPUT NUMBER 3 (+10%)

Pettern number	Old Input	New Input	Old OutPut	New Output	(3)-(2)	(5)-(4)	(7)/(6)	(8)^2
-1	-2	-3	-4	-5	-6	-7	-8	-9
1	1	1.1	2.51	2	0.1	- 0.51	-5.1	26.01
2	6	6.6	9.47	8	0.6	- 1.47	-2.45	6.0025
3	3	3.3	1.07	0.2	0.3	- 0.87	-2.9	8.41
4	0.9	0.99	0.61	1	0.09	0.39	4.33333	18.7778
5	1	1.1	0.44	0.2	0.1	- 0.24	-2.4	5.76
6	0.1	0.11	0.28	0.4	0.01	0.12	12	144
7	0.2	0.22	0.64	0.6	0.02	- 0.04	-2	4
								212.96

Sau đó tính từng ISI bằng cách lấy từng tổng ở cột (9) chia số lớn nhất ở cột (9). Ta có kết quả sau:

ISI 1	0.304051
ISI 2	1
ISI 3	0.496051

Ta vẽ được biểu đồ sau:



Nhận xét: ta thấy ở bảng và biểu đồ trên khi tăng số liệu đầu vào trên 10%, thì số liệu đầu vào ở bảng 2 có độ nhạy nhất.

CHƯƠNG XI TÀI LIỆU THAM KHẢO

Lê Anh Tuấn, 2008. Bài giảng môn học Mô hình hóa Môi trường. Đại học Cần Thơ.

Bùi Tá Long, 2008. Mô hình hóa Môi trường. Nhà xuất bản Đại học Quốc gia, Thành phố Hồ Chí Minh, 459 trang.

Mustafa M. Aral, 2010. Principles of Environmental Modeling. In: Environmental Modeling and Health Risk Analysis (Acts/Risk). Springer, New York, USA, pp 37-59.

Nguyễn Hữu Khải, Nguyễn Thanh Sơn, 2003. Mô hình toán thủy văn. Đại Học Quốc Gia Hà Nội. 195 trang.

Abdel-Magid IS, Mohammed A-WH et al (1997) Modeling methods for environmental engineers. CRC Lewis, Boca Raton, FL

https://www.scribd.com/doc/86445007/Mo-hinh-hoa-moi-tr%C6%B0%E1%BB%9Dng#fullscreen&from_embed

<http://doc.edu.vn/tai-lieu/chuyen-de-mo-hinh-chat-luong-nuoc-51616/>

<http://luanvan.net.vn/luan-van/ap-dung-mo-hinh-do-phuong-phap-streeter-phelps-vao-viec-danh-gia-chat-luong-o-nhiem-nuoc-song-53296/>

<http://www.cantholib.org.vn/Database/Content/2055.pdf>

<http://doc.edu.vn/tai-lieu/chuyen-de-mo-hinh-chat-luong-nuoc-51616/>