

Ứng dụng mô hình trong quản lý kiểm soát chất lượng nước

KS. VŨ CÔNG LÂN
Trung tâm Môi trường

I- VAI TRÒ CỦA MÔ HÌNH TOÁN TRONG KỸ THUẬT CỦA MÔI TRƯỜNG NƯỚC

Mô hình đã trở thành công cụ sử dụng quen thuộc đối với các nghiên cứu trong thủy lực và môi trường nước. Trong các thí nghiệm thuộc hai lĩnh vực kể trên, ở các nước Tây Âu có 80% hoặc hơn thế các công trình liên quan đến mô hình toán học. Bảng kê dưới đây chỉ ra những lĩnh vực ứng dụng của mô hình toán trong môi trường nước:

1. Hệ thống không chiều

- Hoạt động của đập, hồ chứa
- Mô hình phát triển và phân hủy

2. Dòng chảy một chiều trong hệ thống kênh

- Nghiên cứu dòng triều
- Điều tiết hệ thống tưới
- Mô phỏng sóng va đập
- Lan truyền lũ qua kênh, hồ chứa

3. Mô phỏng dòng chảy hai chiều

- Dòng triều
- Dòng chảy cù thê trong sông

- Hoàn lưu gần công trình
- Lập mô hình sóng ngắn

4. Vận chuyển và khuếch tán các chất nhiễm bẩn.

5. Vận chuyển và khuếch tán nhiệt

6. Mô hình dòng chảy ngầm

7. Tính toán hình thái

Một mô hình được cấu thành theo những bước sau đây:

- Định rõ mục tiêu

- Số đồ họa
- Mô tả dạng các phương trình và các điều kiện
- Định ra phương pháp giải
- Thu thập số liệu
- Hiệu chỉnh mô hình
- Công nhận mô hình

Việc lựa chọn mục tiêu cho mô hình xác định mức độ phức tạp của hệ thống và những tham số chủ yếu có liên quan. Những mục tiêu nghiên cứu trong khía cạnh môi trường nước có thể là:

- Ảnh hưởng của thảm nước lạnh vào cửa sông
- Sự lan truyền của chất phóng xạ bị rỉ ra trong môi trường
- Ảnh hưởng của các chế độ hoạt động khác nhau của đập tối phòng lũ và cung cấp nước.
- Gây lũ trong sông khi lũ cực đại
- Nghiên cứu các quá trình làm đầy bùn cát tại đập và cửa thoát nước
- Sự lan truyền chất nhiễm bẩn trong nước
- Dòng và chiều cao sóng ở vùng ven biển

Bước số đồ họa tiếp theo liên quan rất nhiều tới chi phí mô phỏng mô hình và việc định ra các tham số của mô hình. Bước này bắt đầu với sự lựa chọn như sau:

1. Những biến số độc lập

- Thời gian (ổn định, không ổn định hoặc những quá trình thời đoạn).
- Không gian (một chiều, hai chiều, hoặc ba chiều)

2. Những biến số phụ thuộc

Những biến phụ thuộc được mô tả như hàm số của biến độc lập, ví dụ: nhiệt độ là hàm của thời gian theo không gian một hoặc hai chiều; mực nước đập là hàm của thời gian. Chi phí cho mô phỏng mô hình tăng lên nhanh theo số lượng các chiều không gian liên quan. Mô hình không chiều của hồ đòi hỏi những bước tính toán ít hơn mô hình phân tầng (một chiều) và lại càng ít hơn mô hình ba chiều đầy đủ. Tất nhiên việc đưa ra thêm các chiều không gian chỉ có ý nghĩa nếu như những quá trình vật lý, hóa học hoặc sinh học có thể được mô tả hoàn toàn chính xác và các tham số ước tính hoàn toàn tin cậy được.

Các phương trình nói chung được đưa ra từ sự cân bằng trong các yếu tố không chế, tức là cân bằng khối lượng, năng lượng, nhiệt và cân bằng dân số. Bài toán được đưa ra đúng chỗ khi đối với số biến phụ thuộc của mỗi phương trình được xác định và khi các biến mô hình (theo không gian, thời gian) những điều kiện bổ sung đầy đủ đã được cho trước. Số lượng những điều kiện bổ sung phụ thuộc vào tính chất bên ngoài ảnh hưởng như thế nào tới phần bên trong của mô hình. Một thí dụ đơn giản về những ảnh hưởng như vậy là nước chảy vào hồ mang theo chất độc. Điều kiện biên cần thiết ở đây là tổng lượng chất độc chảy vào hồ được xem như hàm số của thời gian.

Trong thủy lực, để giải các phương trình này, người ta thường dùng phương pháp sai phân hữu hạn. Khi đã chọn được phương pháp giải thì chương trình tính cũng được lập ra. Trong chương trình này máy tính được dùng để thực hiện mọi bước của phương pháp giải theo chuỗi chính xác cùng với việc đưa số liệu vào và lấy kết quả ra.

Việc thu thập số liệu là để định rõ giá trị tham số mô hình và xác định được chỉ rõ trong mô phỏng mô hình. Một số tham số mô hình có thể được đo đặc trực tiếp, trong khi một số khác lại dựa theo dạng mô hình (model behaviour). Quy trình cuối cùng này được gọi là hiệu chỉnh mô hình.

Một loạt các mô phỏng mô hình đối với các giá trị tham số khác nhau dẫn đến sự lựa chọn những giá trị tham số cho kết quả tốt nhất giữa do đặc và tính toán. Sau khi mô hình hoàn chỉnh thì cần tính thử để kiểm nghiệm nó đối với trường hợp đã biết nghiệm. Các kết quả tốt thu được trong việc tính thử đó sẽ làm tăng mức độ tin cậy của mô hình.

Đến đây mô hình sẵn sàng để ứng dụng cho mục đích nghiên cứu. Mục đích này có thể là sự thử nghiệm những mục đích khác nhau về mô hình nhằm tăng sự hiểu biết chúng và các mối tương quan của chúng. Đây là điều quan trọng để nhận biết độ chính xác của mô hình trước khi rút ra những kết luận. Những sai khác giữa thực tế và mô hình tác động với mức độ khác nhau trong quá trình xây dựng mô hình. Nguồn quan trọng thứ nhất về sai số nằm trong việc sơ đồ hóa (tức là mô hình chỉ sử dụng phương trình vận chuyển, bỏ qua ảnh hưởng của khuếch tán). Nguồn gây sai số khác nằm trong việc xác định các phương trình. Sự phụ thuộc của các biến số đôi khi bị bỏ qua để giảm bớt tính phức tạp của hệ thống, có khi lại không đủ số liệu để thử lại những giả thuyết. Một vấn đề khác là những kết quả mô hình rất nhạy với việc lựa chọn những giá trị tham số. Trong một phạm vi giá trị hợp lý, mô hình có thể dự báo những kết quả rất khác nhau.

II- MỘT MÔ HÌNH TOÁN ĐƯỢC DÙNG TRONG ĐÁNH GIÁ CHẤT LƯỢNG NUỐC

Dầu tiên chúng ta xem xét một trường hợp đơn giản về hoạt động của hồ chứa. Ở đây, mô hình một chiều được chọn và phương trình cân bằng lượng nước có dạng chung là:

Thay đổi lượng trữ (ΔV) = Dòng vào (I) - Dòng ra (O). Lượng trữ được thể hiện bằng thể tích nước trong hồ và là hàm số của mực nước ($V = V(h)$).

Ta có: $\Delta V = I - O$

$$\text{hoặc } \Delta V = (\Phi_{in} - \Phi_{out}) \cdot \Delta t$$

Ở dạng vi phân: $\frac{\Delta V}{\Delta t} \approx \frac{dV}{dt} = \Phi_{in} - \Phi_{out}$.

Đối với chất bền vững (không bị tương tác hoặc chìm lắng) và hệ thống hòa lẫn hoàn toàn (nồng độ C xem như không đổi trong toàn hồ tại bất cứ thời điểm nào) chúng ta có thể viết phương trình cân bằng bảo toàn vật chất như sau:

$$\frac{d(cV)}{dt} = C_{in} \Phi_{in} - C \Phi_{out} \quad (1)$$

C - nồng độ phân bố vật chất đồng nhất trong hồ

C_{in} - nồng độ vật chất dòng vào.

Viết lại phương trình (1):

$$C \frac{dV}{dt} + V \frac{dc}{dt} = C_{in} \Phi_{in} - C \Phi_{out} \quad (2)$$

đối với trạng thái ổn định thì $\Phi_{in} = \Phi_{out} = Q$

do đó $\frac{dV}{dt} = 0$, như vậy (2) trở thành:

$$\frac{dC}{dt} = D (C_{in} - C) \quad (3)$$

với $D = \frac{\Phi}{V}$ - hệ số khuếch tán.

Ghi chú: trong trường hợp $C_{in} = 0$ thì (3) trở thành

$$\frac{dC}{dt} = -DC, \text{ đây là bài toán phân rã đơn giản.}$$

Phương trình (3) là phương trình vi phân có dạng:

$$\frac{dy}{dx} = ay + b$$

và có nghiệm là: $y = y_0 e^{ax} + \frac{b}{a} (e^{ax} - 1)$

Đối với chất không bền vững, phương trình (1) có thể khai triển số hạng phát triển/phân rã như:

$$\frac{d(CV)}{dt} = C_{in} \Phi_{in} - C \Phi_{out} - k CV$$

trong đó k - hệ số phát triển hoặc phân rã.

Trong đánh giá chất lượng nước thì ôxy hòa tan (DO) là tiêu chuẩn chủ yếu duy nhất. Do việc thảm của các dòng nhiễm bẩn nặng, nồng độ DO dòng chảy bị thiếu hụt nghiêm trọng; điều kiện yếm khí và những thay đổi liên tục về chất lượng nước diễn ra. Cần có một lượng DO đáng kể để tạo ra một môi trường dòng chảy thích hợp cho những vi sinh vật hiếu khí để làm ổn định chất nhiễm bẩn hữu cơ. Giải pháp toán học nhằm dự báo mức độ DO của dòng nhiễm bẩn hữu cơ phụ thuộc chủ yếu phụ thuộc vào sự trao đổi chất vi khuẩn. Những công trình thuộc lĩnh vực này đã được thực hiện do STREETER và PHELPS (1925), CHURCHILL và BUCKINGHAM (1956), THOMANN (1963), HANSEN và FRANKEL (1965), v.v.

Thí dụ này minh họa một phương pháp dự báo lượng DO của dòng nhiễm bẩn hữu cơ dựa trên tốc độ thay đổi của những tham số kiểm soát chủ yếu đã được nghiên cứu trong một dòng chảy mô phỏng ở những điều kiện thay đổi của dòng tải nhiễm bẩn, vi sinh vật, tốc độ, độ sâu dòng chảy và nhiệt độ. Dựa vào những yếu tố này, một mô hình toán học đã được xây dựng và thử nghiệm trên một đoạn sông tự nhiên bị nhiễm bẩn do một dòng thải. Mô hình này được thừa nhận là thành công trong việc dự báo mức độ DO tại các trạm hạ lưu ở Singapore và kết quả này đã được báo cáo tại hội nghị về kiểm soát nhiễm bẩn nước của các nước đang phát triển tổ chức tại Bangkok năm 1978.

Xem xét một nguồn đơn nhiễm bẩn, tốc độ thay đổi của nồng độ DO được biểu thị bằng:

$$\frac{dy}{dt} = K(Y_s - y) \cdot R_1 + R_2 \quad (4)$$

trong đó $\frac{dy}{dt}$ - tốc độ thay đổi của nồng độ DO

Y_s - nồng độ DO bão hòa

y - nồng độ DO tại thời điểm bất kỳ

K - hằng số tốc độ tái hòa tan khí quyển.

$R_1 = R_b + R_{bd}$

R_b - tốc độ hấp thụ ôxy sinh học chỉ của chất các bon

R_{bd} - tốc độ hấp thụ của ôxy do trầm tích đáy

R_2 - được xác định từ mối quan hệ ($R_p \sim R_r$)

R_p - tốc độ sản sinh ôxy do quang hợp

R_r - tốc độ hô hấp của tảo.

Các số hạng R_b , R_{bd} , R_p và R_r được xem như không thay đổi trong thời gian ngắn.

Tích phân (4) ta được (theo AZIZ, 1970)

$$y_t = Y_s - (Y_s - y_o) e^{-Kt} - \frac{R_1 - R_2}{K} (1 - e^{-Kt}) \quad (5)$$

Trong đó: y_t - nồng độ DO (mg/l) tại một trạm sau thời gian chảy t (giờ)

y_o - nồng độ DO ban đầu

Y_s biểu thị bằng mg/l, R_1 , và R_2 biểu thị bằng mg/l.giờ và K biểu thị bằng giò⁻¹.

Kết quả thực nghiệm cho thấy R_b được viết theo công thức (ISAACS và GAUDI, 1967):

$$R_b = \pm \Delta y_d + \Delta y_c \quad (6)$$

Trong đó Δy_d - tốc độ thay đổi của DO (mg/l.giờ)

Δy_c - tốc độ tái hòa tan khí quyển (mg/l.giờ)

Tốc độ thay đổi DO bằng chênh lệch nồng độ DO tại điểm bắt đầu và kết thúc trong khoảng thời gian ngắn; giá trị được coi là dương với sự giảm DO xảy ra trong thời khoảng đó. Δy_c được tính theo:

$$\Delta y_c = 2,3026 K_2 (D_{av}) \Delta t$$

K_2 - logarithm cơ số 10 hằng số tái hòa tan (giò⁻¹)

D_{av} - độ thiếu hụt DO trung bình (mg/l)

Δt - thời gian (giờ)

K_2 được tính theo ADENEY và BECKER, 1919:

$$\ln \frac{di}{dt} = -Kt$$

Trong đó: di, dt - độ thiếu hụt DO tại điểm bắt đầu và kết thúc.

K- hằng số tái hòa tan ($K = 2,3026 K_2$)

Mọi thực nghiệm được tiến hành trong khoảng: nhiệt độ 15-25°C, tốc độ 0,1-0,4m/s, dòng nhiễm bẩn 25-85mg/l và có những nhận xét sau:

- Tốc độ hấp thụ DO sinh hóa tỷ lệ thuận với số các vi khuẩn tại bất cứ thời điểm nào. Công thức:

$$R_b (T^\circ C) = 0,532N (1,087)^{T-20}$$

được coi là thích hợp để tính giá trị R_b .

- Công thức

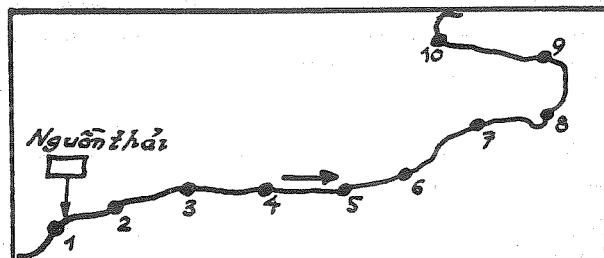
$$K_2 = 2,764 \cdot \frac{V}{h^{1.5}} \cdot (1,0237)^{T-20}$$

cũng thích hợp trong dự báo K_2 .

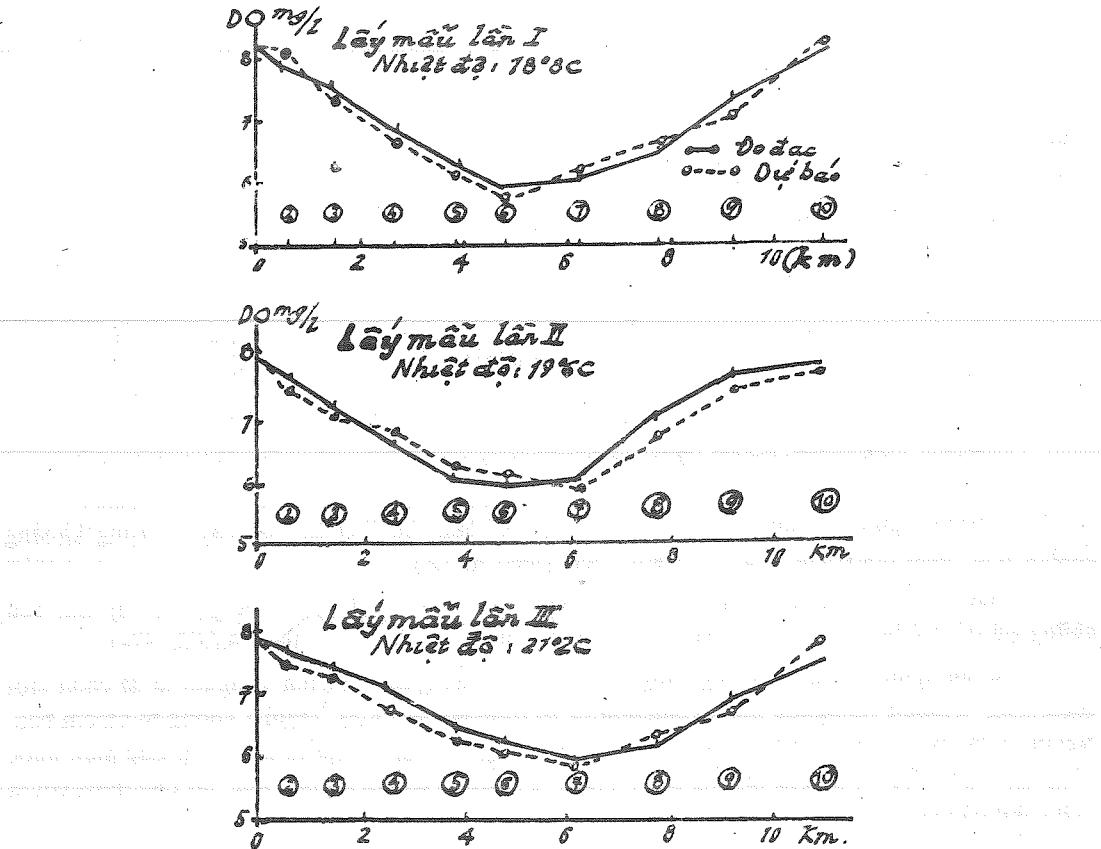
- Trong phạm vi nhiệt độ 15°C - 25°C, giá trị hấp thụ DO độ bùn đáy là trong khoảng 5,60-8,70 m².ngày đối với độ sâu từ 2,5 đến 7,5cm (theo AZIZ)

- Sản lượng ôxy quang hợp ở trong khoảng 0,65 - 0,93 mg/l.ngày. Các giá trị này cao hơn những giá trị thu được ngoài thực địa bằng kỹ thuật chai tối và chai sáng (theo AZIZ,1974)

Để thử nghiệm khả năng ứng dụng của mô hình toán (phương trình 4) người ta đã chọn một đoạn sông tự nhiên với nguồn nhiễm bẩn đơn và 10 trạm đo đặc (h.1). Trạm 1 không bị nhiễm bẩn. Người ta đã lấy 3 mẫu, mỗi trạm đều đo mặt cắt ngang, tốc độ, độ sâu và nhiệt độ. Các mẫu nước đều phân tích DO, BOD, pH và tổng số vi khuẩn. Giá trị đo đặc và dự báo mức độ DO được coi là tương đối phù hợp (h.2).



Hình 1- Sơ họa tuyến sông, vị trí trạm đo



Hình 2- Kết quả đo đặc, dự báo DO

Ở nước ta hiện nay có một số sông tự nhiên bị ảnh hưởng bởi các nguồn thải gây nhiễm bẩn nên việc quản lý và kiểm soát chất lượng nước trở thành cấp thiết và phương pháp như đã giới thiệu trên có thể được dùng như là cơ sở của việc quản lý và kiểm soát nhiễm bẩn dòng chảy với những điều kiện thay đổi của dòng chảy và dòng tải chất nhiễm bẩn.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Mathematical Modelling for Hydrologists (Lecture notes) - A. Werwey, A.X Minors - IHE, Delft, the Netherlands.
2. New approach for predicting dissolved oxygen levels of polluted streams. M.A.AZIZ - University of Singapore - Singapore.