



Co-funded by the
Erasmus+ Programme
of the European Union



LECTURE NOTE
MARINE ENVIRONMENTAL MODELLING
(In Vietnamese)

MÔ HÌNH HÓA MÔI TRƯỜNG BIỂN

GS. TS. NGUYỄN KỲ PHÙNG, PGS.TS. LÊ ANH TUẤN

The European Commission's support for the production of this publication does not constitute an endorsement of the contents, which reflect the views only of the authors, and the Commission cannot be held responsible for any use which may be made of the information contained therein.

TP.HCM, 2021

LỜI MỞ ĐẦU VÀ GIỚI THIỆU

MỤC LỤC

LỜI MỞ ĐẦU VÀ GIỚI THIỆU.....	ii
MỤC LỤC	ii
Danh sách hình.....	iv
Chương 1. NHẬP MÔN - CÁC KHÁI NIỆM CƠ BẢN	1
1.1 Vấn đề	1
1.2 Các định nghĩa và khái niệm cơ bản	1
1.2.1 Định nghĩa mô hình	1
1.2.2 Mục tiêu thành lập mô hình	3
1.2.3 Đặc trưng cơ bản của một mô hình.....	4
1.3 Mô hình môi trường	6
1.4 Lịch sử mô hình	6
1.5 Quan hệ môn học	8
Chương 2. PHÂN LOẠI VÀ TIẾN TRÌNH MÔ HÌNH	9
2.1 Phân loại mô hình	9
2.1.1 Mục đích phân loại mô hình	9
2.1.2 Các nhóm mô hình.....	9
2.2 Tiến trình vận hành mô hình.....	12
2.2.1 Thu thập dữ liệu	13
2.2.2 Mô hình khái niệm.....	13
2.2.3 Mô hình giải tích hoặc mô hình số.....	15
2.2.4 Hiệu chỉnh mô hình.....	15
2.2.5 Kiểm nghiệm mô hình	15
2.2.6 Tiên đoán hoặc tối ưu	16
2.3 Tiêu chuẩn chọn lựa mô hình.....	16
2.3.1 Khái niệm.....	16
2.3.2 Mô hình "tốt nhất"	17
2.3.3 Chọn mô hình theo cấu trúc và giá trị vào/ra.....	18
2.3.4 Chọn mô hình theo vấn đề thực tế	19
2.3.5 Đánh giá lại việc chọn lựa	20
Chương 3. HIỆU CHỈNH CÁC THÔNG SỐ MÔ HÌNH	21
3.1 Khái quát vấn đề	21

3.2	Các bước trong tiến trình hiệu chỉnh	23
3.2.1	Bước xác định thông tin quan trọng	23
3.2.2	Bước chọn tiêu chuẩn mô hình	24
3.2.3	Bước hiệu chỉnh mô hình	24
3.3	Các tiếp cận để hiệu chỉnh thông số mô hình	25
3.3.1	Tiếp cận tiên nghiệm (a priori approach)	25
3.3.2	Tiếp cận phù hợp đường cong (the curve fitting approach)	25
3.4	Các vấn đề khi thành lập các thông số trong các mô hình môi trường	27
3.4.1	Các vấn đề thường gặp khi thành lập thông số	27
3.4.2	Sự hiệu chỉnh là một đòi hỏi khắc khe về số liệu	28
3.4.3	Tương tác giữa các thông số	28
3.4.4	Sự tương tự lưu vực và các vấn đề chuyển dịch thông số	29
3.4.5	Giá trị thông số và vấn đề quy mô của mô hình	30
3.4.6	Vấn đề ngoại suy thông số	31
Chương 4.	THỂ HIỆN MÔ HÌNH	32
4.1	Kiểm nghiệm và định trị mô hình	32
4.2	Nghiên cứu kiểm nghiệm	32
4.2.1	Mục tiêu	32
4.2.2	Hàm mục tiêu	33
4.2.3	Các trị số thống kê dùng cho kiểm nghiệm	33
4.3	Vấn đề kiểm nghiệm mô hình	37
4.3.1	Các vấn đề thường gặp	37
4.3.2	Hậu kiểm việc phê chuẩn và kiểm nghiệm mô hình	38
Chương 5.	ỨNG DỤNG MÔ HÌNH HÓA MÔI TRƯỜNG BIỂN	39
5.1	Sơ đồ phát triển và ứng dụng mô hình	39
5.2	Xu thế phát triển mô hình hóa môi trường theo quy mô không gian	40
5.3	Giới thiệu một số mô hình môi trường	41
5.3.1	Mô hình biến đổi khí hậu toàn cầu	41
5.3.2	Mô hình quản lý lưu vực	42
5.3.3	Bộ mô hình thủy lực - thủy văn MIKE	43
5.3.4	Mô hình ô nhiễm môi trường sinh thái nước ngọt	45
5.4.	Mô hình hóa ô nhiễm biển	46
5.4.1	Giới thiệu bài toán lan truyền chất	46
5.4.2	Nghiệm giải tích bài toán ô nhiễm biển	49
5.4.3	Các phương pháp số giải phương trình khuếch tán rối tạp chất trong	

	biển nông.....	55
5.4.4	Mô hình hóa sự vận chuyển các chất ô nhiễm biển	60
5.4.5	Ảnh hưởng dòng chảy, khuếch tán rối và điều kiện biến tới kết quả tính.....	61

Chương 1. NHẬP MÔN - CÁC KHÁI NIỆM CƠ BẢN

1.1 Đặt vấn đề

Hiện nay, ô nhiễm môi trường đang là vấn đề báo động song hành với sự phát triển kinh tế xã hội, đặc biệt tại các quốc gia đang phát triển. Tại nhiều nơi, chất lượng nước, đất, không khí suy giảm nhanh chóng vượt qua khả năng tự làm sạch của tự nhiên. Trong lĩnh vực khoa học quản lý môi trường và kỹ thuật xử lý môi trường, việc quan trắc dự báo diễn biến môi trường mang tầm quan trọng cho các quyết định giải quyết vấn đề. Tuy nhiên, việc đo đạc, quan trắc môi trường rất tốn kém kinh phí và công sức của con người. Nhằm giảm thiểu các khó khăn này, các nhà khoa học đã và đang tiếp tục phát triển các ứng 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.

Việc mô phỏng môi trường cũng đang giúp con người tạo dựng các mô 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 không gian và thời gian nhằm tiên đoán khả năng lây truyền chất ô nhiễm hoặc khả năng hồi phục chất lượng tài nguyên. Môn học mô hình hóa môi trường được hình thành từ cơ sở này.

Môn mô hình hóa môi trường phục vụ cho tất cả các nhà khoa học, nhà kỹ thuật, nhà quản lý, kể cả các nhà xã hội làm việc liên quan đến lĩnh vực môi trường và tài nguyên thiên nhiên. Chữ “mô hình” (modeling) có nguồn gốc từ chữ La-tinh *modellus*. Từ này mang ý nghĩa là một kiểu cách do con người tạo ra để tiêu biểu cho một thực tại nào đó.

1.2 Các định nghĩa và khái niệm cơ bản

1.2.1 Định nghĩa mô hình

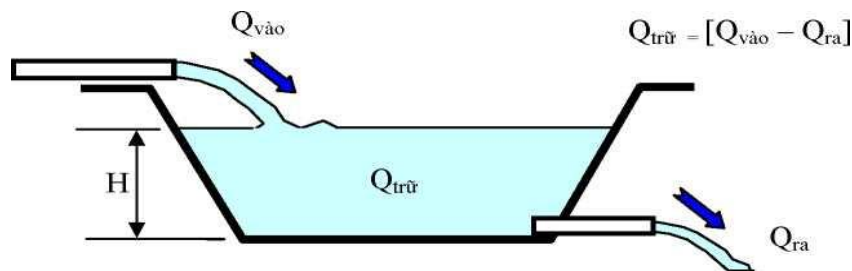
- *Mô hình là một cấu trúc mô tả hình ảnh đã được tối giản hóa theo đặc điểm hoặc diễn biến của một đối tượng, một hiện tượng, một khái niệm hoặc một hệ thống.*
- *Mô hình có thể là một hình ảnh hoặc một vật thể được thu nhỏ hoặc phóng đại, hoặc chỉ làm gọn bằng một phương trình toán học, một công thức vật lý, một phần mềm tin học để mô tả một hiện trạng thực tế mang tính điển hình.*
- *Mô hình hoá là một khoa học về cách mô phỏng, giản lược các thông số thực tế nhưng vẫn diễn tả được tính chất của từng thành phần trong mô hình. Mô hình không hoàn toàn là một vật thể hiện thực nhưng nó giúp cho chúng ta hiểu rõ hơn hệ thống thực tế.*
- *Mô hình hóa môi trường là ngành khoa học mô phỏng hiện tượng lan truyền chất ô nhiễm và các dự báo thay đổi môi trường theo không gian và thời gian.*

Ví dụ 1.1: Các nhà thiết kế tạo ra một mẫu xe hơi sử dụng năng lượng mặt trời thu nhỏ để thử nghiệm khả năng hoạt động cũng như các tiện ích và an toàn trước khi chế tạo hàng loạt (hình 1.1).



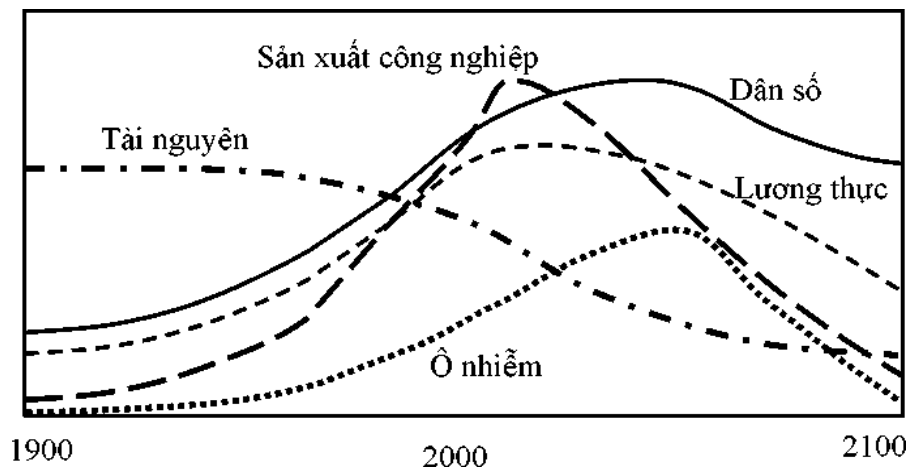
Hình 1.1. Mô hình xe hơi thử nghiệm sử dụng năng lượng mặt trời

Ví dụ 1.2: Để thể hiện sự thay đổi lượng nước trong một hồ chứa người ta đưa ra hình ảnh như hình 1.2. Biết kích thước hình học của hồ chứa, lưu lượng vào, lưu lượng ra, chúng ta có thể xác định dao động mực nước trong hồ.



Hình 1.2. Mô hình thể hiện sự thay đổi khối lượng nước trong hồ chứa

Ví dụ 1.3: Nhà khoa học Meadows và các cộng sự (1972) đã tìm được mối quan hệ giữa sự gia tăng dân số, việc sản xuất lương thực, sản xuất công nghiệp, nguồn tài nguyên và mức độ ô nhiễm đều có những quan hệ với nhau. Nhóm nghiên cứu đã đưa ra mô hình dự báo thế giới như hình 1.3.

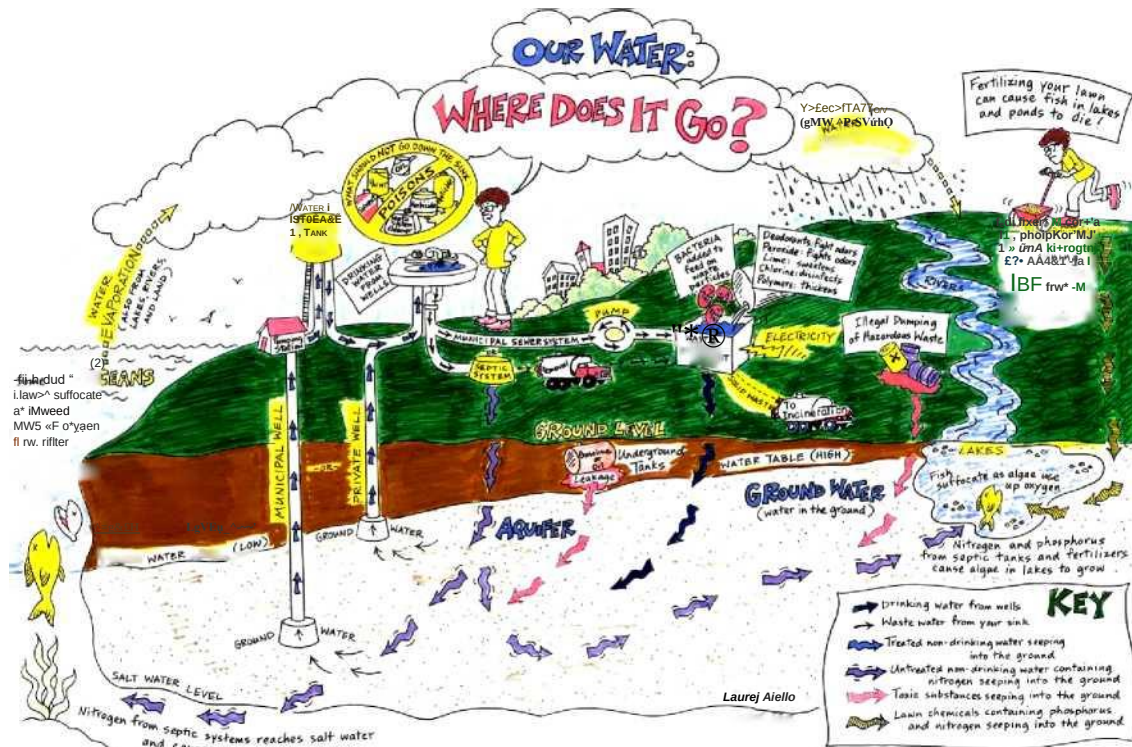


Hình 1.3. Mô hình dự báo tình hình thế giới đến năm 2100

1.2.2 Mục tiêu thành lập mô hình

Diễn biến mô trường rất phức tạp trong thực tế và liên quan đến nhiều lĩnh vực khoa học

khác (hình 1.3). Do nhu cầu hiểu rõ hơn bản chất tự nhiên của sự việc trong thực tế, các nhà khoa học mới tìm cách đơn giản hóa nhưng vẫn đề phức tạp ở mức có thể làm được nhưng không quá xa rời thực tế để có cơ sở giải thuật tìm hướng ra của vấn đề và tiến toán nhưng khả năng xảy ra trong tương lai.



Hình 1.4. Đường đi của các chất gây ô nhiễm trong vòng tuần hoàn nước

Có 3 mục tiêu khi thực hiện một mô hình:

- **Tạo cơ sở lý luận**

- Mô hình giúp ta dễ diễn tả hình ảnh sự kiện hoặc hệ thống;
- Mô hình mang tính đại diện các đặc điểm cơ bản nhất của sự thể;
- Mô hình giúp ta cơ sở đánh giá tính biến động một cách logic khi có tác động bên ngoài vào hoặc từ trong ra.

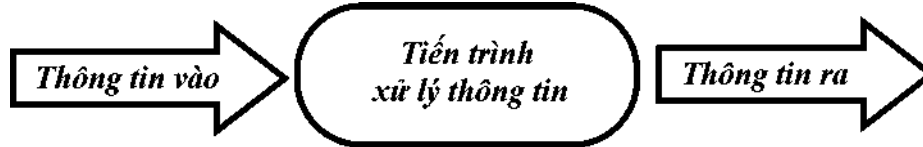
- **Tiết kiệm chi phí và nhân lực**

- Mô hình giúp ta thêm số liệu cần thiết;
- Mô hình giúp giảm chi phí lấy mẫu;
- Mô hình có thể được thử nghiệm với các thay đổi theo ý muốn.

- **Mô hình tạo mẫu cho những triển khai sản xuất hàng loạt.**

1.2.3 Đặc trưng cơ bản của một mô hình

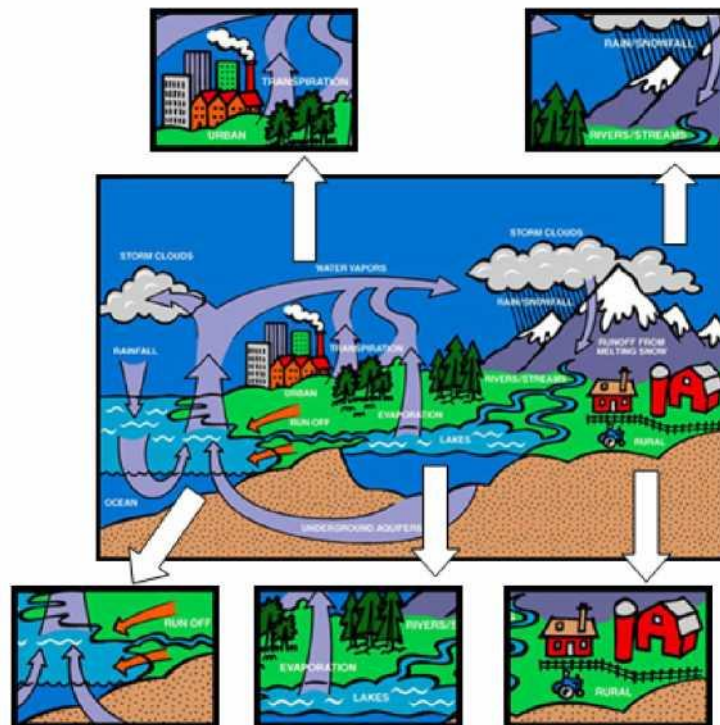
Một cách tổng quát, tất cả các mô hình phải có 3 thành tố chính như hình 1.5:



Hình 1.5. Ba thành tố chính của một mô hình

- **Thông tin vào:** bao gồm các dạng cơ sở dữ liệu đưa vào để mô hình 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.

Trong điều kiện chưa thể giải quyết toàn bộ bài toán phức tạp của tự nhiên, người ta có thể chia hiện tượng thực tế thành các mảng đề tài khác nhau và mỗi phần chia được xem như một bài toán riêng rẽ và có mô hình tương ứng của nó. Ví dụ chúng ta có thể chia các diễn biến dòng chảy quá trình trong một chu trình nước thành từng đề tài nhỏ hơn như hình 1.6.



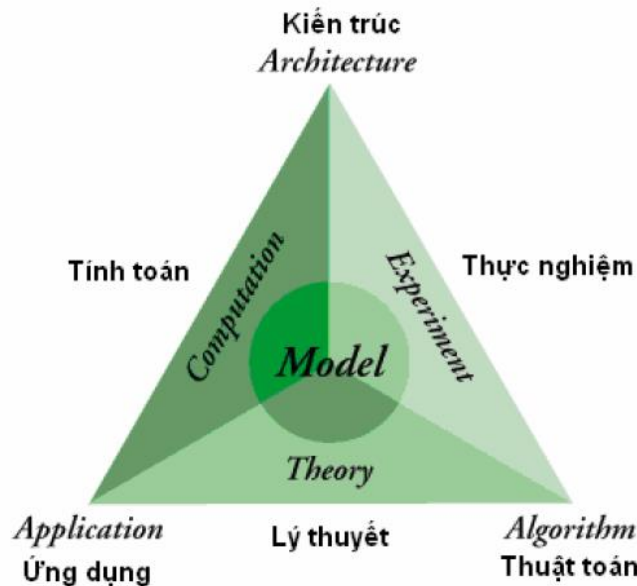
Hình 1.6: Chia vấn đề lớn thành từng vấn đề riêng rẽ

Một 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 **A**pplication (ứng dụng), **A**lgorithm (thuật toán), và **A**rchitecture (kiến trúc) theo hình vẽ 1.7 sau:



Hình 1.7: 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).

1.3 Mô hình môi trường

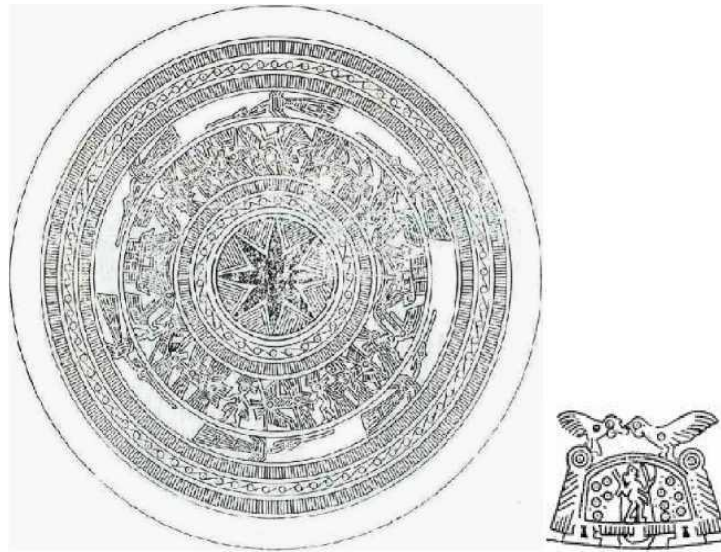
- > Mô hình hóa môi trường là ngành khoa học cung cấp các công cụ ở dạng hình ảnh, sơ đồ, biểu đồ, phần mềm, hay sa bàn, ... để chuyển các hiểu biết từ các đo đạc thực tế của một khu vực nghiên cứu thành các lý giải cần thiết cho nhu cầu thông tin và tiên đoán diễn biến của môi trường - sinh thái.
- > Mô hình môi trường là một mô tả đơn giản cho các quan hệ phức tạp về môi trường sinh thái ở ngoài thực tế nhưng vẫn có thể cho các kết quả chính xác ở mức độ chấp nhận được.
- > Một mô hình môi trường phải cung cấp một đại lượng dữ liệu thể hiện theo sự thay đổi thời gian qua:
 - (i) sự quan sát (*observation*);
 - (ii) sự phân tích (*analysis*); và
 - (iii) sự tiên đoán (*prediction*).
- > Một mô hình môi trường có thể là một giao tiếp giữa dữ liệu và tạo quyết định. Mô hình tạo ra các thông tin từ dữ liệu quan trắc và cải tiến kiến thức giúp cho việc ra quyết định liên quan đến việc quy hoạch, thiết kế, vận hành và quản lý.
- > Một mô hình môi trường thường kết hợp các định luật và phương trình sau:
 - Định luật vật lý (như định luật Darcy, định luật bảo toàn khối lượng, .)
 - Phương trình toán học quan hệ (như phương trình Penmen về bốc thoát hơi, phương trình cân bằng nước)
 - Các quan hệ thực nghiệm (như các công thức kinh nghiệm, .)

1.4 Lịch sử 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 hình ảnh những khuôn dạng người để có một sắp xếp xem xét sự tiến hóa của của các nhóm chủng người. Những bức phát họa con người và các cách sinh hoạt của họ ở các 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 đếm 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 những 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 hóa 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 bắt của người Việt Cổ trong khoảng thời gian từ thế kỷ thứ 6 đến thế kỷ thứ 7 trước Công nguyên (Hình 1.8).



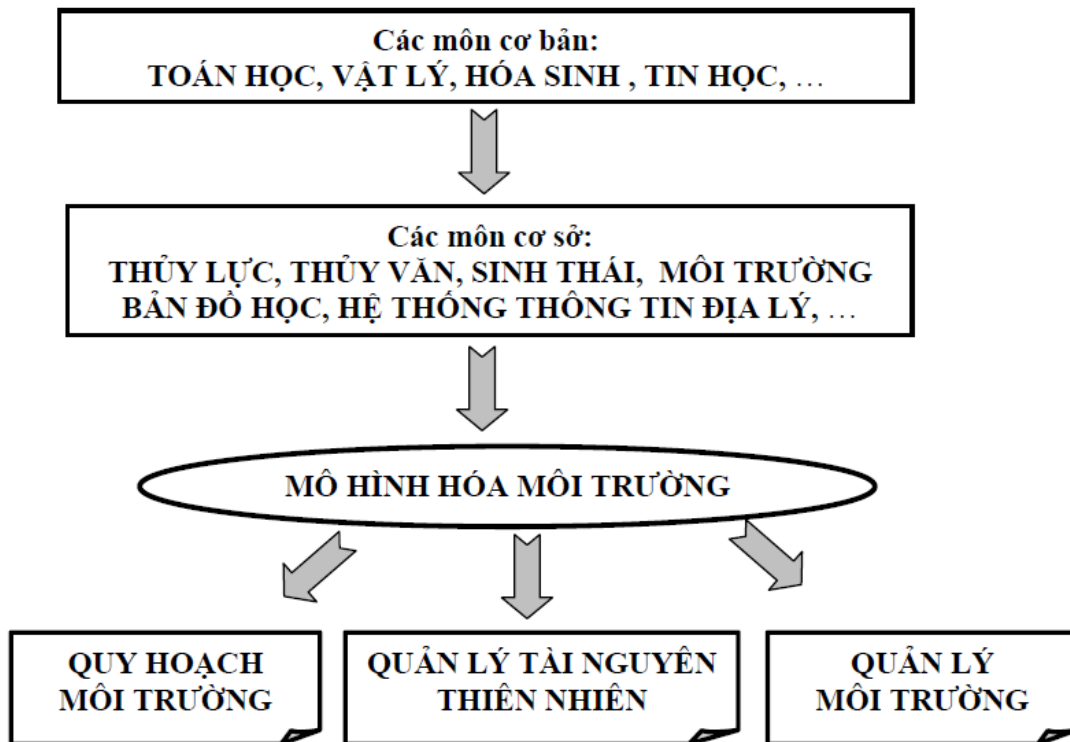
Hình 1.8: Mặt trên của trống đồng Đông Sơn (hình trái); một hình khắc mô phỏng hình ảnh hai con chim đậu trên mái nhà của con người (hình phải)

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 cái bóng của vật thể in trên nền đất. Vào khoảng năm 250 trước Công nguyên, Euclid đã dùng một mô hình toán hình học để tìm khoảng cách từ Trái đất đến Mặt trời và khoảng cách từ Trái đất đến Mặt trăng. Ông cũng tính được chu vi của Trái đất. Ngành thiên văn học cổ cũng đã biết 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 đền 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 kỷ 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 lý hành chính đến các lãnh vực quan hệ xã hội, ... 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 con tiên toán những tình thế có khả năng xảy ra trong tương lai.

1.5 Quan hệ môn học

Môn học “Mô hình hóa môi trường” là môn học chuyên ngành giảng dạy cho sinh viên năm thứ ba và năm thứ tư các ngành học “Khoa học Môi trường”, “Quản lý Môi trường” và “Kỹ thuật Môi trường”. Các môn học cơ bản như Toán học, Vật lý, Tin học, Sinh học, Thống kê... là các môn học nền cho môn học. Tiếp theo các môn cơ sở như Sinh thái học, Hoá Sinh Môi trường, Thủy lực, Thủy văn, Bản đồ học, GIS và Viễn thám, ...sẽ là các môn học tiên quyết cho môn học “Mô hình hóa môi trường”. Môn học “Mô hình hoá môi trường” sẽ là môn học hỗ trợ cho các môn học liên quan đến Quy hoạch và Quản lý Môi trường và Tài nguyên Thiên nhiên (hình 1.9).



Hình 1.9: Quan hệ môn học “Mô hình hóa môi trường” với các môn khác

Chương 2. PHÂN LOẠI VÀ TIẾN TRÌNH MÔ HÌNH

2.1 Phân loại mô hình

2.1.1 Mục đích phân loại mô hình

Có nhiều cách phân loại mô hình môi trường, việc phân loại có thể dựa vào đặc điểm tính toán, cách mô phỏng, phương pháp vận hành, phép so sánh hoặc dựa vào giả định. Việc phân loại mô hình nhằm:

- Thể hiện ý tưởng kiểu mô phỏng nào được sử dụng
- Trình bày phương pháp và mức độ toán học ứng dụng
- Biểu hiện dạng xuất kết quả của mô hình
- Đề xuất loại dữ liệu nào cần đưa vào để có thông tin
- Định danh thành phần nào trong hệ thống cần mô phỏng

2.1.2 Các nhóm mô hình

Một mô hình có thể có các tên gọi khác nhau, tùy theo tác giả, như là:

- Mô hình vật lý (*physical model*)
- Mô hình toán học (*mathematical model*)
- Mô hình số (*numerical model*)
- Mô hình giải tích (*analysis model*)
- Mô hình xác định (*deterministic model*)
- Mô hình khái niệm (*conceptual model*)
- Mô hình ngẫu nhiên (*stochastic model*)
- Mô hình tham số (*parametric model*)
- Mô hình ổn định (*steady-state model*)
- Mô hình bất ổn định (*unsteady-state model*)
- Mô hình dựa vào các giả định sinh hóa (*biochemical assumption model*)
- Mô hình đánh giá tác động (*impact assessment model*)
- Mô hình dự báo (*forecast model*)
- v.v....

Một mô hình có thể phân loại theo quy mô ứng dụng:

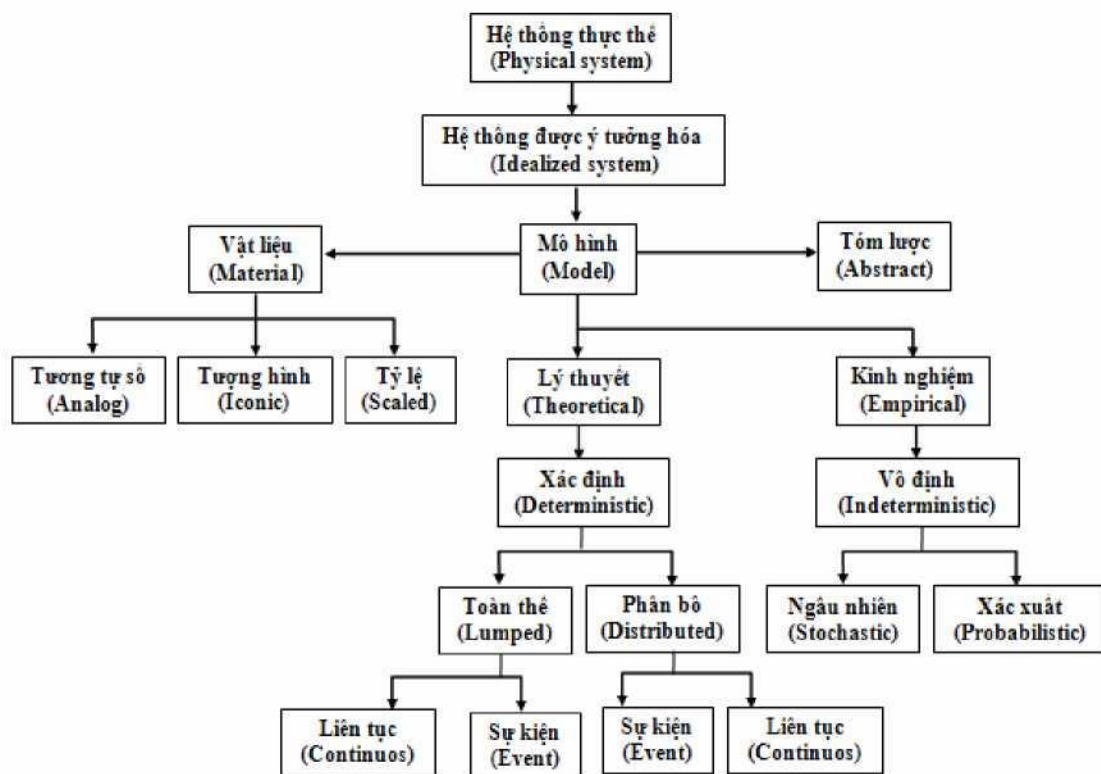
- Theo không gian (*spatial*): ở một vùng nhỏ hay một khu vực lớn.
- Theo thời gian (*temporal*): ngắn hạn hay dài hạn
- Theo giá trị mô hình (*model validity*): cho giới hạn độ chính xác của mô hình
- Theo giá trị của dữ liệu (*data validity*): tùy theo mức độ và quy mô thu thập dữ liệu (ví dụ lấy mẫu theo một điểm đo cục bộ, hay lấy nhiều mẫu trong một khu vực lớn).

Nếu dựa vào cấu trúc, mô hình có thể có 3 nhóm:

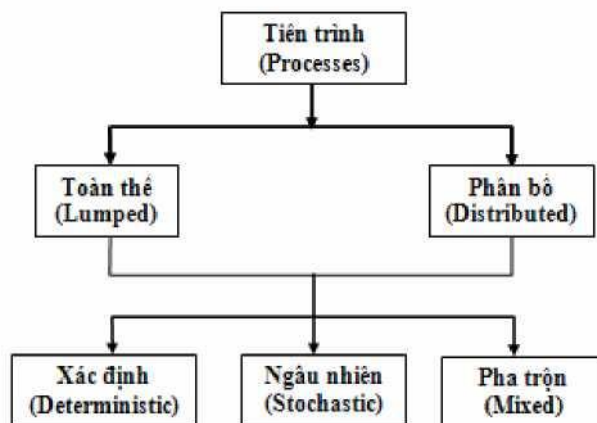
- ❖ **Mô hình “hộp trắng”** (*white box*): là mô hình mà người sử dụng có thể thấy - hiểu tất cả các tiến trình tính toán xảy ra, quá trình trữ dữ liệu, thông tin phản hồi/ phản tiến. Nhóm mô hình này thường dùng các phương trình vi phân riêng (*partial differential equation*) chủ đạo các thay đổi tiến trình vật lý và phương trình liên tục (*equations of continuity*) cho các dòng nước mặt và nước trong đất. Mô hình vật lý và mô hình xác định nằm trong nhóm mô hình “hộp trắng”.
- ❖ **Mô hình “hộp đen”** (*black box*): là mô hình mà người sử dụng chỉ biết đầu vào (*inputs*) và đầu ra (*outputs*) mà hoàn toàn không biết những gì xảy ra bên trong quá trình chuyển hoá trong mô hình. Dữ liệu đầu vào và dữ liệu đầu ra là những giá trị mang ý nghĩa vật lý. Thường các nhà giải thuật dùng các phương trình toán học đơn và phép phân tích chuỗi thời gian (*time series*) để tạo ra mô hình “hộp đen”. Mô hình ngẫu nhiên nằm trong nhóm này.
- ❖ **Mô hình “hộp xám”** (*grey box*): là mô hình mà người sử dụng hiểu được một phần tiến trình xử lý dữ liệu. Mô hình tham số và mô hình khái niệm thuộc nhóm mô hình “hộp xám”.

Mô hình môi trường, đặc biệt là môi trường nước, thường mang ít nhiều đặc điểm của một mô hình thủy văn học (*hydrological model*) có thể phân loại như hình 2.1 và được giải quyết theo 3 kiểu mô tả:

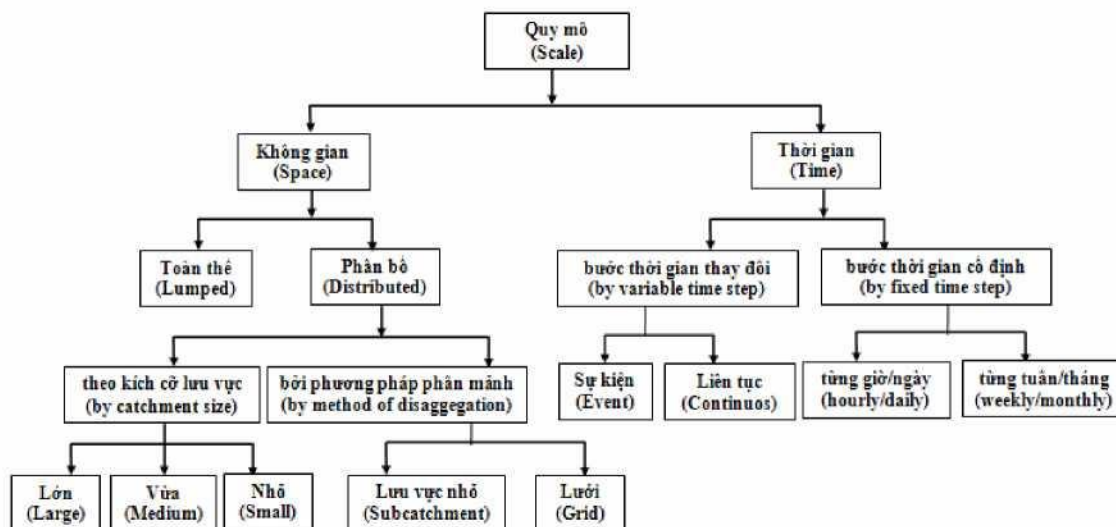
- > Tiến trình của mô hình (*process*); (hình 2.2)
- > Tỷ lệ thời gian và không gian (*time and space scales*); (hình 2.3)
- > Kỹ thuật giải toán (*solution techniques*); (hình 2.4)



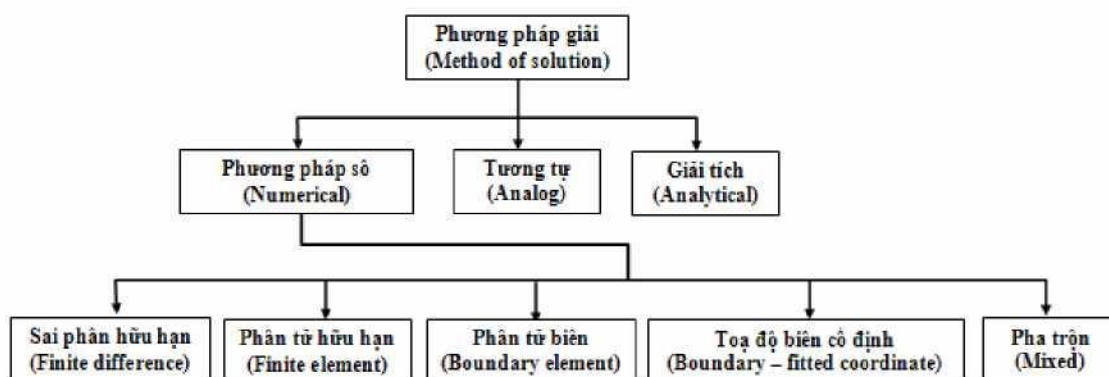
Hình 2.1. Phân loại mô hình tổng quát (theo Tim, 1995)



Hình 2.2. Phân loại mô hình dựa theo mô tả tiến trình (theo Singh, 1995)



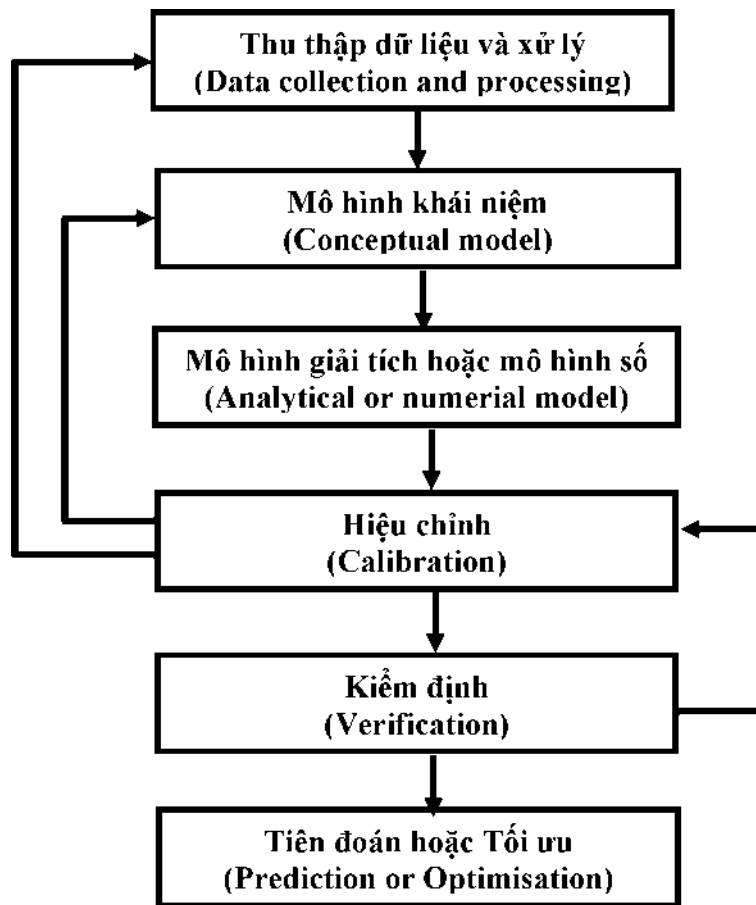
Hình 2.3. Phân loại mô hình dựa vào quy mô không gian và thời gian (theo Singh, 1995)



Hình 2.4. Phân loại mô hình dựa vào phương pháp giải toán (theo Singh, 1995)

2.2 Tiến trình vận hành mô hình

Tất cả các phần mềm mô hình thường được vận hành và thử nghiệm theo một tiến trình tổng quát như hình 2.5 sau:



Hình 2.5. Tiến trình của một mô hình

2.2.1 Thu thập dữ liệu

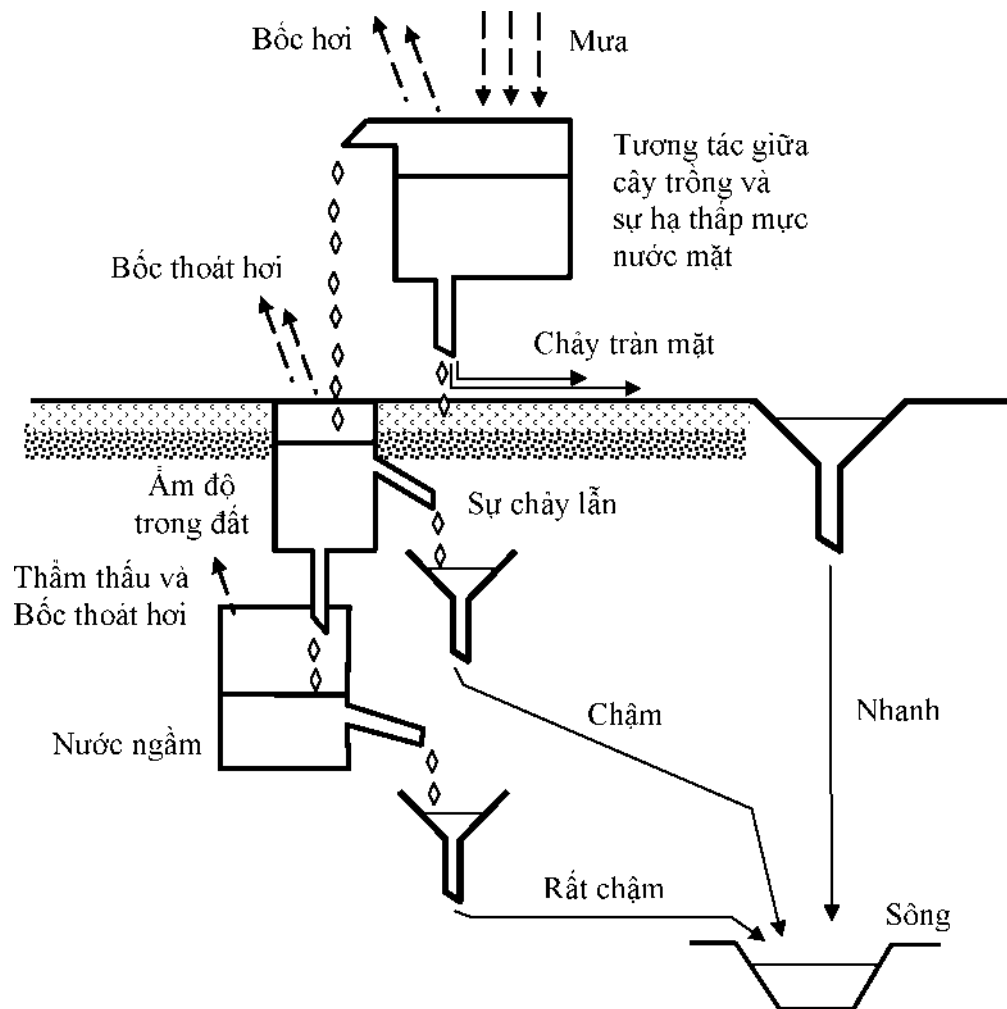
Tất cả các mô hình muốn vận hành được đều phải có nguồn dữ liệu ban đầu và các điều kiện cần thiết (điều kiện biên và điều kiện ban đầu). Các dữ liệu thường bao gồm số liệu địa hình (cao độ, độ dốc,...) , các kích thước lưu vực cần tính toán (chiều dài, chiều rộng, diện tích,...) , các diễn biến về khí tượng (mưa, bốc hơi, bức xạ, vận tốc và hướng gió,...), nguồn ô nhiễm (nhà máy, khu dân cư, ruộng vườn, hầm mỏ, khu công nghiệp,...), các biến số môi trường (pH, nhiệt độ, độ mặn, độ đục, nhu cầu oxy sinh hóa, các chất phú dưỡng, vi khuẩn,...), các thông số liên quan, . tương ứng với chuỗi thời gian xuất hiện hoặc không gian xuất phát.

2.2.2 Mô hình khái niệm

Mô hình khái niệm là một dạng ý tưởng hoá nhằm tối giản những yếu tố phức tạp ngoài thực tế ở dạng một lưu đồ hoặc sơ đồ. Trong đó các mũi tên được sử dụng để chỉ các mối quan hệ hoặc chiều hướng diễn biến. Các lời ghi chú bên cạnh các hình ảnh để thuyết minh thêm tính chất của sự vật hoặc quá trình hoặc các thông số của mô hình. Hình 2.6 là một ví dụ về mô hình khái niệm của Beater (1989) để diễn tả chuyển vận của nước trong mô hình quan hệ mưa - dòng chảy.

Trong mô hình khái niệm phải bắt đầu từ các dữ liệu nhập vào, các diễn biến bên trong mô

hình và các thông tin xuất ra từ mô hình. Một hình khái niệm phải thể hiện tính đơn giản để tạo cho những người không phải là chuyên gia về mô hình có thể hiểu mục tiêu của bài toán mô hình.



Hình 2.6. Mô hình khái niệm diễn tả quan hệ mưa - dòng chảy (Beater, 1989)

Một số ưu điểm, thế mạnh và tính hữu hiệu của mô hình khái niệm:

- Mô hình khái niệm có thể được hình thành một cách đơn giản bởi người tạo ra nó có thể chưa hiểu hết tất cả các hiện tượng phức tạp trong thực tế.
- Có thể đơn giản hóa tính bất nhất của các thông số thành tính đồng nhất.
- Có thể giảm thiểu được số liệu yêu cầu.
- Dễ dàng cho người xem hiểu cách thu thập số liệu, thông tin sử dụng một cách nhanh chóng và ít tốn kém.
- 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.
- Mô hình khái niệm tạo thuận lợi cho việc diễn giải trong thuyết minh, biểu bảng, đề

thị.

- Có thể tạo ra một giao tiếp với cơ sở dữ liệu và hệ thống thông tin địa lý (GIS).

Tuy nhiên, mô hình khái niệm vẫn có những nhược điểm và giới hạn:

- Mô hình khái niệm là một khái quát nhân tạo và phi vật lý qua các tối giản nên có thể không đưa ra hết những quan hệ tương tác giữa các đối tượng.
- Những người thiếu kinh nghiệm có thể tạo ra các giả thiết phi thực tế hoặc quá đơn giản.
- Mô hình khái niệm mang tính tổng quát quá nên đôi khi bỏ sót các phương án vận hành.
- Mô hình khái quát thường không thể thể hiện cách điều chỉnh sai số hoặc ngoại suy trong trường hợp thiếu dữ liệu.
- Khi cần bổ sung mô hình hoặc tái cấu trúc mô hình có thể tạo ra một tình trạng quá gò bó thông số.

2.2.3 Mô hình giải tích hoặc mô hình số

Một bài toán trong mô hình thường được biểu thị sự hiện diện của các thông số và biến số. 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.

Mô hình giải tích (hoặc mô hình số) 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, quan trọng nhất và là phần phức tạp nhất trong tiến trình thực hiện mô hình hóa.

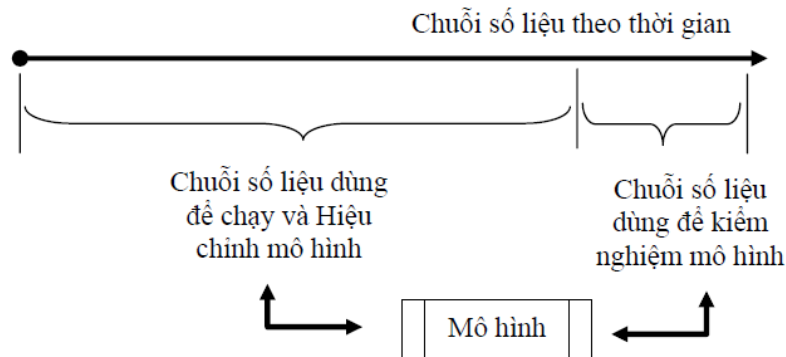
2.2.4 Hiệu chỉnh mô hình

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. Do khi phát triển mô hình, chúng ta phải tối giản các hiện tượng vật lý trong tự nhiên để thuận lợi cho người làm thật toán. Điều này khiến các số liệu nhập vào mô hình có những giá trị không hoàn toàn chắc chắn và kết quả ra sẽ sai biệt với thực tế. 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*).

2.2.5 Kiểm nghiệm mô hình

Kiểm nghiệm mô hình là bước tiếp sau công việc Hiệu chỉnh mô hình nhằm kiểm tra các thông số mô hình đưa ra có phù hợp với các diễn biến của thực tế hay không.

Ví dụ trong khảo sát diễn biến trong quan hệ mưa - dòng chảy trong nhiều năm, người ta cắt chuỗi số liệu quan trắc ra thành 2 đoạn: đoạn số liệu dài ban đầu dùng để chạy mô hình và Hiệu chỉnh mô hình. Đoạn số liệu thứ hai sau ngắn hơn dùng làm kiểm nghiệm kết quả mô hình cho đoạn trước (hình 2.7).



Hình 2.7 Minh họa việc phân đoạn chuỗi số liệu theo thời gian để Hiệu chỉnh và thử nghiệm khi chạy mô hình

2.2.6 Tiên đoán hoặc tối ưu

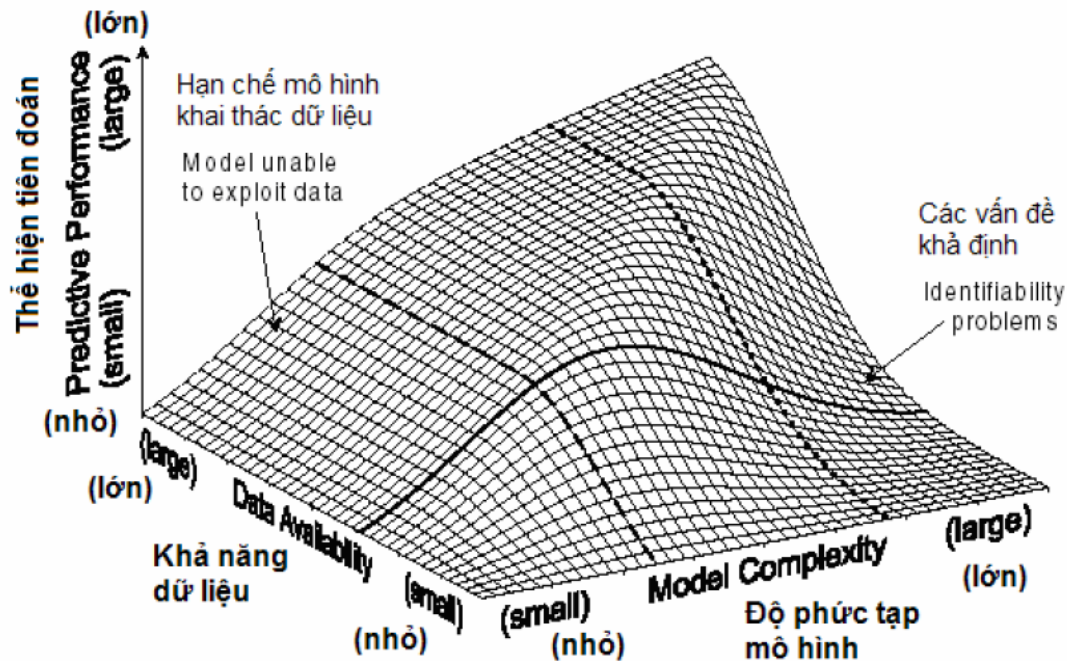
Thông thường mô hình được sử dụng cho mục tiêu tiên đoán các diễn biến các biến số trong tương lai hoặc tối ưu hóa việc chọn lựa.

Trong tiên đoán, như các mô hình về khí hậu hoặc mô hình lan truyền ô nhiễm, các thuật toán ngoại suy (*extrapolation*) được sử dụng để kéo dài kết quả ở đầu ra. Trong bài toán lựa chọn tối ưu, các giá trị cực trị ở đầu ra được chọn cho quyết định.

2.3 Tiêu chuẩn chọn lựa mô hình

2.3.1 Khái niệm

Trong suốt vài thập niên qua, nhiều mô hình khác nhau đã được phát triển trên thế giới. Thông thường mỗi mô hình thường có các thế mạnh riêng 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 thường gây 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 (hình 2.8).



Hình 2.8 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 Bloschl, 2000)

2.3.2 Mô hình "tốt nhất"

- Các phương pháp mục tiêu tổng thể để chọn mô hình "tốt nhất" thật ra chưa được phát triển, do vậy việc chọn mô hình cũng là một phần "nghệ thuật" của người nghiên cứu mô hình (Woolhiser and Brakensiek, 1982).
- Mô hình "tốt nhất" tùy thuộc vào cách hiểu tiêu chuẩn nào là "tốt nhất". Điều này tùy thuộc vào mức chính xác của yêu cầu khoảng thời gian quan trắc, ví dụ thời đoạn lấy mẫu nước theo giờ, ngày, tháng hoặc mùa. Mặt khác, 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 tác giả Woolhiser và Brakensiek (1982) việc chọn mô hình "tốt nhất" tùy thuộc vào độ lớn về kích thước tự nhiên của bài toán và sự phức tạp trong thay đổi các biến số. Do vậy, đặc điểm của mô hình phải tương thích với yêu cầu của bài toán.

2.3.3 Chọn mô hình theo cấu trúc và giá trị vào/ra

Nhiều nhà nghiên cứu về mô hình đã đề xuất việc chọn lựa mô hình phải dựa vào cấu trúc của mô hình và giá trị của dữ liệu ở đầu vào và đầu ra. Các lựa chọn này bao gồm:

- *Sự khái quát hóa của các tiến trình chủ yếu*: Mô hình phải phản ánh "ý tưởng" đúng theo thực tế lên quan đến các tiến trình chính (Popov, 1968). Sơ đồ khái quát phải thể hiện được các bộ phận cấu thành mô hình diễn biến theo một tiến trình mang tính lý thuyết chứ không đơn thuần chỉ là các kết nối đơn giản.
- *Mức độ chính xác cho việc tiên đoán, dự báo*: độ chính xác của việc tiên đoán ở kết quả đầu ra rất quan trọng. Mô hình phải được kiểm nghiệm bằng một phương cách nào

đó sao cho sai số thống kê và những yếu tố không chắc chắn của mô hình 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. Điều này cũng thể hiện tính chính xác của dữ liệu nhập vào. Tuy nhiên, mức chính xác của dữ liệu nhập vào quan trọng hơn là mức chính xác của dự báo do mô hình tạo ra (Hillel, 1986).

- *Tính đơn giản của mô hình*: Mô hình cần được tối giản nhằm giảm bớt các biến số và thông số để mô tả các tiến trình. Càng ít các thông số để điều chỉnh thì càng dễ cho người sử dụng. 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. Mô hình nên tránh sự thô kệch, rườm rà, làm việc xử lý trở nên khó khăn, phức tạp và sai số lớn (Tim, 1995).
- *Xem xét việc thành lập các thông số*: Đây là một xem xét quan trọng trong việc phát triển các mô hình khái niệm sử dụng các thông số được thành lập bằng 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, điều này gây khó khăn khi đo đạc.
- *Các giả định (assumption)*: Mô hình nên chứa ít các giả định. Người sử dụng mô hình nên hiểu rằng các đặt ra nhiều giả định chừng nào thì tạo nên việc giới hạn sử dụng mô hình và làm các thông số nhạy cảm hơn (Hughes et al., 1993).
- *Tiềm năng cho việc cải tiến mô hình*: Mô hình cần được cấu trúc sao cho việc cải tiến mô hình dễ dàng khi có các thông tin mới hoặc có các thủ tục bổ sung.

2.3.4 Chọn mô hình theo vấn đề thực tế

Việc chọn lựa mô hình theo vấn đề thực tế cần được cân nhắc trong các trường hợp:

- *Điều kiện tự nhiên của mô hình*: mô hình phải đáp ứng các vấn đề thực tế phải giải quyết. Ví dụ như các đầu ra mong muốn có thể là lưu lượng đỉnh, hoặc nồng độ chất ô nhiễm, v.v. theo bước tính là giờ, ngày, tuần, ... cho mục đích thiết kế hoặc vận hành. Đây là một xem xét quan trọng và bao gồm các câu hỏi cho các tiến trình chủ yếu thể hiện trong mô hình và điều kiện để mô hình có giá trị.
- *Chọn mô hình trọn gói hay là mô hình theo yêu cầu*: Mô hình trọn gói (là mô hình được thiết kế cho tổng thể các trường hợp) thường dễ sử dụng nhưng thiếu tính mềm dẻo và bị hạn chế sử dụng. Loại mô hình trọn gói thường được sử dụng khi gặp các tình huống ít có hơn số tình huống dự kiến ban đầu mà người phát triển mô hình nghĩ ra.

Mô hình theo yêu cầu là những mô hình mà ta có thể đặt hàng cho những người chuyên phát triển mô hình làm riêng cho cho một trường hợp nào đó. Loại mô hình này sẽ giúp ta giải quyết đúng vấn đề thực tế cần thiết nhưng thường tốn kém và mất nhiều thời gian.

- *Bài toán liên quan đến giá trị quyết định*: khi tính toán khả năng tài chính và tài

nguyên, cũng như dạng tính tổn thất tiềm năng về sinh mạng, thiệt hại tài sản ứng với một tần suất xuất hiện nào đó.

- *Khả năng khung thời gian*: tùy thuộc và thời hạn chót phải hoàn tất dự án, kể cả thời gian (và chi phí) để thu thập các thông tin nhập vào.
- *Các thiết bị tính toán*: phần cứng máy tính và các loại mô hình và độ phức tạp của mô hình (như mô hình phải liên kết với các mô hình khác, liên kết với GIS, ngôn ngữ máy tính,..).
- *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 xét khả năng mô hình có thể giải quyết nhiều mục tiêu, có tầm ứng rộng và dự kiến các khả năng sử dụng về sau.
- *Cách truy cập mô hình, tài liệu hướng dẫn và dự phòng (back-up)*: khi trang bị mô hình cần xem xét nhà cung cấp có tạo các dễ dàng cho người sử dụng cách truy cập, các hỗ trợ, huấn luyện bước hướng dẫn, trả lời các gút mắc (help desk), 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 các nhân viên sử dụng chưa có kinh nghiệm.
- *Cách thể hiện mô hình*: như 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 (user friendliness)*: xem xét mô hình có dễ dàng giúp người sử dụng cách nhập liệu, chọn lựa kiểu xuất kết quả, giao diện người sử dụng, các kiểu đồ thị, bảng kết quả thống kê....
- *Xem xét quy mô*: xem coi quy mô không gian mà mô hình sử dụng có tương thích với việc khái niệm và cấu trúc của vấn đề không.

2.3.5 Đánh giá lại việc chọn lựa

Một khi đã lựa chọn mô hình, người sử dụng cần phải đánh giá lại việc chọn lựa của mình bằng cách trả lời các câu hỏi sau:

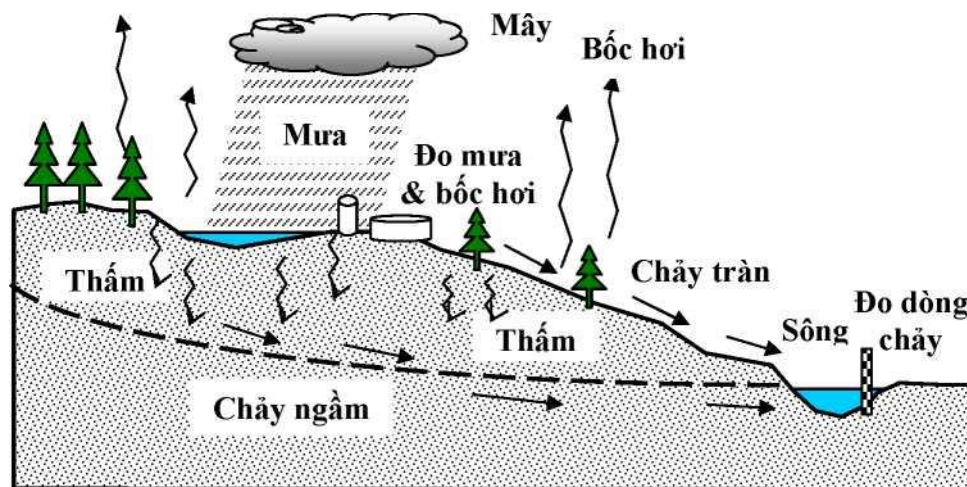
- Các thông tin mà mô hình cung cấp có thực sự theo yêu cầu của bài toán không?
- Các đặc trưng vật lý thể hiện qua các thông số của mô hình có thực sự đáp ứng việc ứng dụng trong thực tế không?
- Các phương trình sử dụng trong cấu trúc mô hình có đúng với thuật toán hiện đại phù hợp với dữ liệu và thiết bị máy tính không?
- Các kết quả mà mô hình cung ứng có chất lượng tốt tương xứng với chi phí theo một thời gian đặc thù nào không?

Chương 3. HIỆU CHỈNH CÁC THÔNG SỐ MÔ HÌNH

3.1 Khái quát vấn đề

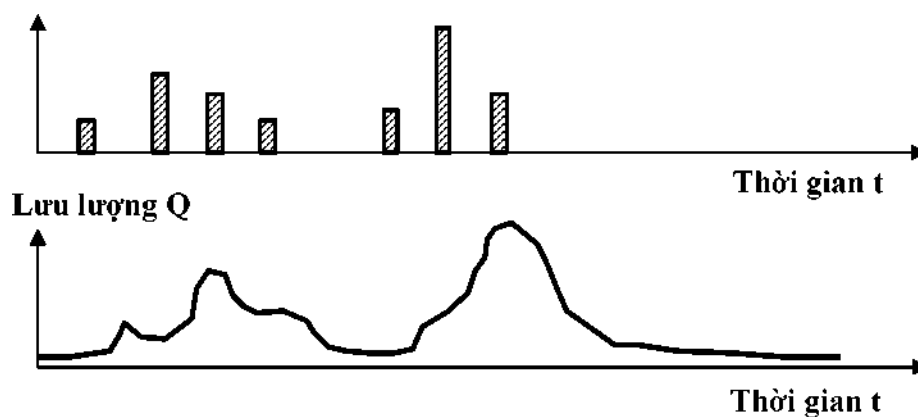
Theo định nghĩa ở mục 2.2.4, khi phát triển mô hình, hiệu chỉnh (*calibration*) - có người gọi là định chuẩn - là tiến trình mà trong đó các thông số và biến số của mô hình được điều chỉnh để kết quả ra của mô hình phù hợp với thực tế quan sát được.

Ví dụ : Quan trắc thủy đồ diễn tả dòng chảy của một lưu vực (hình 3.1), nhiều nhà thủy văn học thấy chúng có những nét tương tự với sự biến động của lượng mưa ghi nhận được trong một thời gian tương đồng (Hình 3.2). Nghĩa là sau những trận mưa lớn, lưu lượng dòng chảy gia tăng và khi mưa giảm dần thì dòng chảy cũng giảm theo một quan hệ tuyến tính nào đó.



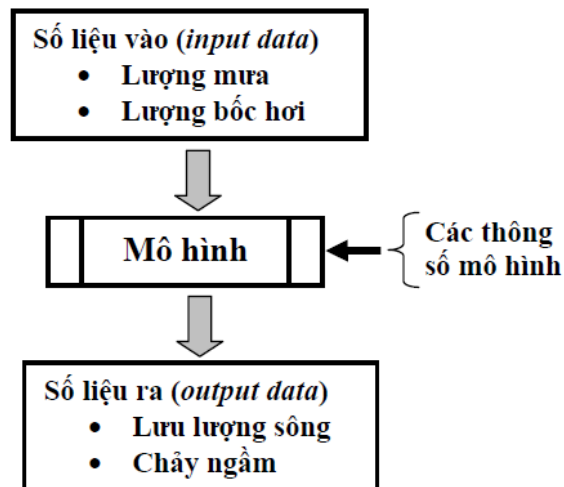
Hình 3.1 Tiến trình mưa - dòng chảy trong một lưu vực

Lượng mưa X



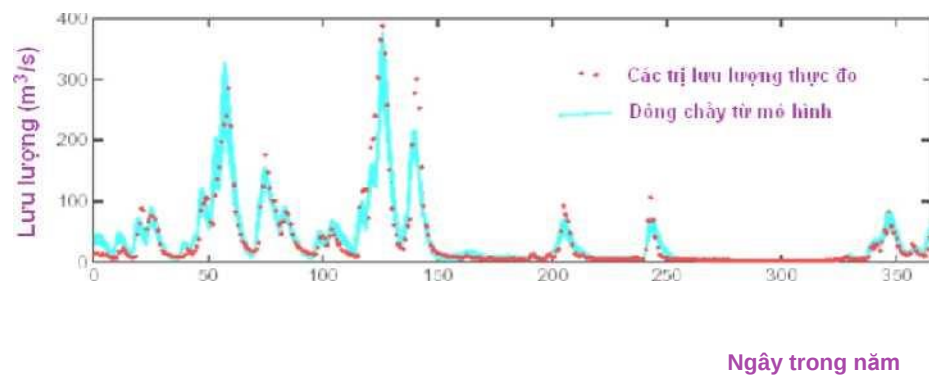
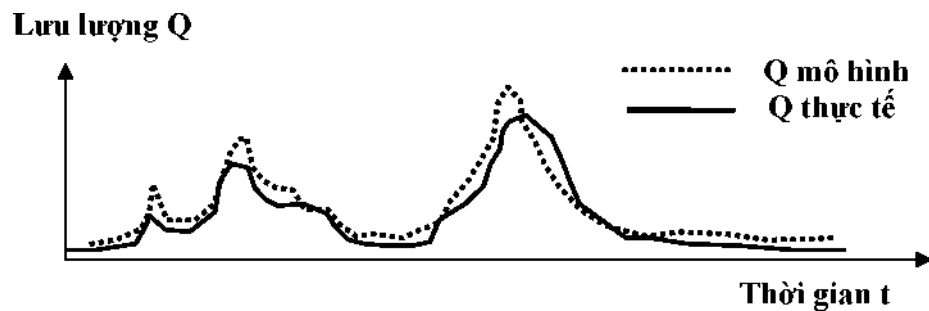
Hình 3.2 Thủy đồ ghi nhận thực tế diễn biến mưa và dòng chảy cùng thời đoạn

Khi thực hiện mô hình diễn tả quan hệ mưa - dòng chảy của một lưu vực, ta có thể tối giản quan hệ này theo sơ đồ như hình 3.3.



Hình 3.3 Sơ đồ diễn tả bài toán quan hệ mưa - dòng chảy

Giả sử kết quả của một mô hình nào đó cho ra kết quả như hình 3.4. Trên đồ thị, mô hình của bài toán cho đường cong diễn tả sự thay đổi lưu lượng theo thời gian, đường cong theo mô hình này nếu đem so với số liệu lưu lượng đo được trong thực tế sẽ thấy có sự khác biệt. Để giảm thiểu sự khác biệt này, người ta đưa vào mô hình các thông số điều chỉnh, đó chính là công việc của sự hiệu chỉnh.



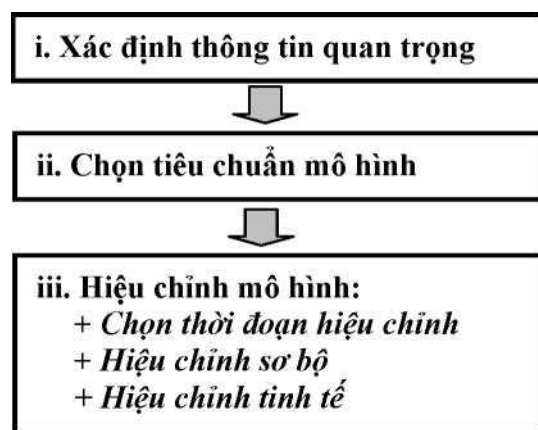
Hình 3.4 Ví dụ minh họa kết quả lưu lượng dòng chảy theo mô hình và theo thực tế Trong ví dụ bài toán mô hình mưa - dòng chảy, ta có nhiều thông số như :

- Hàm lượng nước tối đa chứa trong lớp đất mặt
- Hàm lượng nước tối đa chứa trong tầng rễ
- Hệ số chảy tràn mặt
- Hệ số chảy lặn trong đất
- Ngưỡng tối đa của tầng rễ tạo ra dòng chảy mặt
- Ngưỡng tối đa của tầng rễ tạo ra dòng chảy ngầm
- v.v...

Hiệu chỉnh là công việc điều chỉnh các thông số mô hình sao cho kết quả càng gần với thực tế. Nếu việc hiệu chỉnh của mô hình làm tốt thì đường cong từ mô hình sẽ càng “trùng” với đường cong thực đo.

3.2 Các bước trong tiến trình hiệu chỉnh

Tiến trình Hiệu chỉnh là một trong các nội dung thực hiện mô hình hóa. Hiệu chỉnh sẽ góp phần quan trọng cho việc định giá khả năng hiện thực của mô hình. Trong tiến trình Hiệu chỉnh, 3 bước sau cần thực hiện (hình 3.5).



Hình 3.5 Ba bước trong tiến trình Hiệu chỉnh

3.2.1 Bước xác định thông tin quan trọng

Hiệu chỉnh mô hình cần bắt đầu bằng việc quyết định xem các thông tin gì là quan trọng mà mô hình có định được áp dụng. Việc xác định thông tin phải trên cơ sở là xem các thông số nào trong mô hình sẽ quyết định kết quả và kết quả này có khả năng phù hợp hoặc thỏa mãn với các diễn biến ở thực tế.

Ví dụ khi xem xét mô hình diễn tả sự lan truyền chất ô nhiễm trên một dòng chảy, nhiều yếu tố có thể ảnh hưởng. Tuy nhiên, người phát triển mô hình phải xác định yếu tố nào gây ảnh hưởng lớn nhất. Chẳng hạn, hệ số nhám của dòng chảy, hệ số co hẹp hoặc mở rộng của mặt cắt, hệ số khuếch tán của chất lỏng và chất ô nhiễm, hàm lượng oxy trong nước, v.v...

3.2.2 Bước chọn tiêu chuẩn mô hình

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

Ví dụ khi thực hiện mô hình dự báo lũ, việc xác định giá trị (mức nước, lưu lượng lũ) và thời điểm xảy ra đỉnh lũ là mục tiêu quan trọng mà bài toán phải giải quyết. Nhiều thông số thống kê sẽ phải áp dụng như phần trăm (%) sai biệt cho phép, độ lệch chuẩn, độ nhạy của kết quả,... khi đánh giá sự tương ứng giữa dòng chảy quan trắc được với dòng chảy mô phỏng.

3.2.3 Bước hiệu chỉnh mô hình

- **Chọn thời đoạn hiệu chỉnh:** Hầu hết các mô hình môi trường hoặc mô hình thủy văn đều có yếu tố chuỗi thời gian tương ứng với các dữ liệu quan trắc. Trước tiên người thực hiện mô hình phải xem xét tổng thời gian quan trắc và chia khoảng thời gian này ra làm 2 thời đoạn: thời đoạn thứ nhất với chuỗi số liệu dài hơn để làm Hiệu chỉnh (calibration) và thời đoạn thứ hai ngắn hơn để làm việc kiểm nghiệm (verification). Trong một số trường hợp, người ta có thể chia đều hai thời đoạn: 50% thời đoạn cho bước hiệu chỉnh và 50% cho thời đoạn kiểm nghiệm mô hình. Việc chọn lựa thời đoạn hiệu chỉnh để chạy bài toán mô hình cần phải theo mục tiêu của vấn đề là cần kết quả gì ở đầu ra của mô hình. Ví dụ khi làm mô hình dự báo lũ thì thời đoạn hiệu chỉnh phải chứa thời gian mà các đỉnh lũ trong lịch sử đã xảy ra. Trường hợp làm mô hình thể hiện dòng chảy môi trường (environmental flow), thì thời đoạn hiệu chỉnh phải có chứa những thời kỳ dòng chảy thấp trong mùa kiệt.
- **Hiệu chỉnh sơ bộ:** Đây là bước thử ban đầu để xem thử các thông số mô hình đã chọn có “nhảy” với kết quả mô hình hay không? Thông thường, việc hiệu chỉnh sơ bộ theo bảng hướng dẫn của mô hình có sẵn hoặc từ quan sát thực tế. Việc hiệu chỉnh sơ bộ được xem như một bước làm bắt buộc nhằm định lại:
 - + Giá trị ban đầu thực tế cho các thông số
 - + Chiều dài (hay bước tính) “lý tưởng” để mô hình tìm kiếm giá trị tốt nhất của thông số. Nếu chọn bước tính quá ngắn sẽ làm gia tăng số lần tính toán, nếu chọn bước tính quá dài sẽ tạo ra sự vượt quá hay cường điệu hóa khi tìm giá trị tối ưu.
 - + Thử xác định khoảng giới hạn (giới hạn trên và giới hạn dưới) của các thông số. Mục đích của việc này nhằm giới hạn khả năng sự thất bại của mô hình khi tạo ra các giá trị phi thực tế hay trị vượt quá thực tế.
- **Hiệu chỉnh tinh tế:** Hiệu chỉnh tinh tế là làm nhuyển ở mức chi tiết các kết quả ở đầu ra qua việc điều chỉnh vi cấp (fine tuning) các thông số mô hình. Một số sách hướng dẫn mô hình có thể cho khuyến cáo hoặc một số mô hình có thể tạo ra tiến trình tự động hiệu chỉnh để có một kết quả tốt nhất có thể đạt được.

3.3 Các tiếp cận để hiệu chỉnh thông số mô hình

Một số mô hình có thể được đánh giá trong cách định mục tiêu bài bản, một số mô hình khác thì không có thể thực hiện được. Việc đánh giá kết quả mô hình còn phụ thuộc một phần vào kỹ năng xem xét vấn đề của người làm mô hình. Có nhiều cách tiếp cận:

3.3.1 Tiếp cận tiên nghiệm (*a priori approach*)

- i) Trong cách tiếp cận này, những giá trị ban đầu của thông số mô hình được suy ra từ việc đo đạc thực tế hoặc từ một tính chất nào đó của sự việc, hoặc được thành lập do thực nghiệm.
- ii) Việc tiếp cận được 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.
- iii) Việc tiếp cận tiên nghiệm là khả thi về mặt lý thuyết. Tuy nhiên, cách tiếp cận này cần một số liệu khá lớn cho các mô hình xác định. Do vậy, đối với các lưu vực nghiên cứu nhỏ, các tiếp cận để có các thông số mô hình này bị giới hạn và đôi khi không thực hiện được.

3.3.2 Tiếp cận phù hợp đường cong (*the curve fitting approach*)

- i) 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 (*goodness-of-fit*). Cách tiếp cận này liên quan đến việc tìm các thông số sẽ bảo đảm mức gần gũi 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 thông kê được áp dụng để xác định mức gần gũi của các biến số trong chuỗi thời gian theo quan trắc và theo mô hình tương ứng.
- ii) 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 mảng (*segmented iterative procedure*).
- iii) 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 rất rõ cách cấu trúc và sự vận hành của mô hình.
- iv) Tiến trình lặp lại được phân mảng: đối với các mô hình có nhiều hơn 5 thông số thì nên thực hiện cách tiếp cận theo cách này:
 - + Bước đầu, tất cả các thông số liên quan đến một tiến trình đặc thù nào đó được tối ưu hóa cùng nhau, trong khi đó các thông số khác được giữ những hằng số. Mảng thông số liên quan này sẽ được tối ưu hóa bằng cách định khoảng giá trị chặn trên và chặn dưới để tìm thông số mô hình phù hợp nhất được cho phép biến đổi.

+ Cuối bước thứ nhất, 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.

+ Ở bước thứ hai, tương tự như bước thứ nhất, mảng thông số khác trong tiến trình sẽ được biến đổi cho phù hợp với mô hình.

+ Như vậy, 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 các nhóm thông số được tối ưu hóa.

+ Trong quá trình thực hiện tối ưu hóa từng mảng, có thể người làm mô hình phải trở lại bước thứ nhất, hoặc bước 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.

v) Tối ưu hóa tự động (hoặc tối ưu hóa mục tiêu): Kỹ thuật tối ưu hóa tự động được áp dụng ở một số mô hình 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 giữa trị vừa tính toán và sai biệt thống kê. Thông thường các thông số mô hình đáp ứng với những thay đổi phi tuyến, nếu chương trình tính phán đoán được phương trình phi tuyến thì có thể sử dụng các thuật toán tối ưu lặp lại. 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.

vi) Một số điểm liên quan đến việc tối ưu hóa tự động cần xem xét kỹ hơn:

- Thông thường chỉ một hàm mục tiêu (thỏa yêu cầu thống kê độ phù hợp, như trị hệ số tương quan r^2) có thể được sử dụng trong tiến trình tối ưu hóa tự động. Nếu có nhiều hơn hai hàm mục tiêu thì bài toán trở nên phức tạp và khó giải. Do vậy, có lúc cần thiết phải thực hiện việc điều chỉnh thủ công để các giá trị thông số để tạo ra sự một kết quả tốt hơn cho mô hình dựa vào nhiều tiêu chuẩn thống kê (như hệ số tương quan r^2 kết hợp với độ dốc đường cong và phương pháp dừng chặn trong toán học).

- Một vấn đề khác trong tối ưu hóa tự động là sự tương tác giữa các thông số. Khi điều chỉnh thông số này sẽ ảnh hưởng các thông số còn lại vì chúng có quan hệ ít nhiều. Chính điều này làm bài toán trở nên phức tạp và kết quả thường khó đạt sự tối ưu.

- Tương tự, với từng thông số riêng rẽ có thể tìm sự tối ưu của riêng nó nhưng khi phối hợp các tối ưu riêng rẽ thì khó tạo ra sự tối ưu toàn cục.

- Với các lý do trên, nhiều lúc thực hiện tiến trình hiệu chỉnh tự động

không thể cho kết quả như ý muốn do kết quả có độ nhạy cao với các thay đổi của biến số. Trong trường hợp này, các thành phần lý luận vững

chắc của mô hình có thể bị sai lệch, trong khi đó các thành phần chứa yếu tố thiếu cơ sở hay mơ hồ của mô hình có thể không thể phát hiện ra.

- Điều này khiến việc hiệu chỉnh tự động có thể tạo ra các thông số cho các giải đáp đúng với những lý do sai, khi ấy các thông số sẽ không thể được sử dụng để ngoại suy kết quả.
- Tất cả các điểm trên cho thấy việc cải tiến có hệ thống một mô hình để đáp ứng một sự hiệu chỉnh dựa vào kết quả khá khó khăn. Điều này đặc biệt đúng đối với các mô hình chứa nhiều ẩn số và có những yếu tố vật lý quá phức tạp. Ví dụ khi làm mô phỏng việc lan truyền nhiều chất gây ô nhiễm trong một khu phức hợp dân cư, công nghiệp, sản xuất nông ngư nghiệp, ...

vii) 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 có thể là một cách nên làm.

3.4 Các vấn đề khi thành lập các thông số trong các mô hình môi trường

3.4.1 Các vấn đề thường gặp khi thành lập thông số

- i) . Thông thường, trong một mô hình môi trường các biến số như nồng độ chất ô nhiễm thay đổi theo thời gian và không gian mà các chất ô nhiễm lan truyền cũng không đồng nhất (do cấu trúc lớp đất, sự thay đổi đặc điểm dòng chảy, ...). Do vậy khi dùng trị số trung bình hoặc một hệ số đặc trưng nào đó có thể là nguyên nhân chính làm sai số mô hình.
- ii) . Các nghiên cứu thực tế cho thấy, sự thay đổi đặc điểm vật lý của lưu vực (như thay đổi cách sử dụng đất, lớp phủ thực vật, ...) sẽ làm thay đổi các thông số thủy văn.
- iii) . Tính hiệu quả của mô hình thường do kỹ năng của người sử dụng mô hình khi thực hiện việc hiệu chỉnh hơn là do bản thân của chính mô hình. Một trong những nguyên nhân gây sai số mô hình có ý nghĩa là do chọn lựa không thích hợp và hiệu chỉnh các thông số mô hình. Kiến thức cho việc chọn lựa thông số hợp lý thường chỉ có qua kinh nghiệm nhiều lần.
- iv) . Khi tìm cách 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 sẽ có thể tạo ra những sai số thông số khác.
- v) . Thông thường khi lấy những biến số độc lập (ví dụ như số liệu đo được sự chảy tràn trên mặt đất) đối lập với kết quả đầu ra của mô hình (số liệu chảy tràn theo tính toán của mô hình) để thử nghiệm khi hiệu chỉnh thì các thông số có thể không mang tính đại diện một cách tiêu biểu cho toàn lưu vực (trường hợp lưu vực có sự hiện diện của các vùng đất ngập nước, các đê chắn hoặc các kênh mương).
- vi) . Kỹ thuật lấy mẫu và đo đạc ngoài hiện trường và trong phòng thí nghiệm sẽ ảnh

hưởng lớn đến kết quả mô hình. Cùng áp dụng một mô hình toán học trên máy tính cho một lưu vực nhưng với hai người khác nhau áp dụng, mỗi người đo áp dụng các cách đo khác nhau để có số liệu đầu vào thì kết quả cũng có thể cho ra các thông số khác nhau.

3.4.2 Sự hiệu chỉnh là một đòi hỏi khắc khe về số liệu

- i) . Tiến trình hiệu chỉnh phải bắt đầu từ một hiện thực là số liệu đầu vào phải đủ dài và có độ chính xác cao nhất định nào đó.
- ii) . Khi chuỗi số liệu quá ngắn hoặc thiếu số liệu thì sẽ tạo ra những trị không chắc chắn ảnh hưởng lớn đến việc hiệu chỉnh các thông số. Ví dụ khi mô phỏng sự ô nhiễm nguồn nước đến tính đa dạng sinh học, do không đủ thời gian, kinh phí, thiết bị,... số liệu trở nên sơ sài thì chắc chắn kết quả sẽ kém tin cậy vì sai số lớn.
- iii) . Một số trường hợp nghiên cứu mô hình dòng chảy môi trường, nếu 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 thì khả năng ứng dụng mô hình dự báo sẽ rất hạn chế.
- iv) . Có nhiều trường hợp khi hiệu chỉnh các thông số, kết quả có thể phù hợp với những chuỗi số liệu ngắn hoặc đứt đoạn nhưng qua giai đoạn kiểm nghiệm với những thay đổi mới thì các thông số bộc lộ nhiều sai số lớn.
- v) . Khi so sánh giữa mô hình dựa vào sự kiện (*event-based model*) và mô hình liên tục (*continous model*) thì sẽ thấy mô hình liên tục thường cho kết quả hiệu chỉnh tốt hơn mô hình dựa vào sự kiện. Lý do là mô hình liên tục có số lượng số liệu nhiều hơn mô hình dựa vào sự kiện.

3.4.3 Tương tác giữa các thông số

- i) . Sự tương tác do có sự quan hệ giữa các thông số có thể là nguyên do tạo nên sự phức tạp của bài toán.
- ii) . Sự hiểu biết rõ ràng về mức độ và mẫu hình của sự tương tác giữa các thông số, cũng như độ nhạy của các tiêu chuẩn phù hợp của bất kỳ sự thay đổi nào của các giá trị thông số đều luôn luôn hữu ích trong việc hiệu chỉnh thông số. Trong một số trường hợp, định được sự thay đổi các thông số độ nhạy cũng tạo nên tính hiệu quả của mục tiêu tiêu mô hình.
- iii) . Nếu 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". Tuy nhiên, trường hợp như vậy cũng ít xảy ra.
- iv) . Thật ra, hiệu ích để có các thông số mô hình chắc chắn thường xuất phát từ việc đo đạc thực tế ngoài hiện trường hơn là chỉ nhắm vào các lý thuyết thống kê để tìm độ phù hợp. Điều này thường được minh chứng rõ khi nghiên cứu mô hình thủy văn môi trường, trong đó số liệu cung cấp cho bài toán bao gồm diện tích lưu vực, diễn biến thủy lực dòng chảy trên kênh dẫn và các số liệu đặc trưng khác.
- v) . Một số trường hợp, việc nghiên cứu kết quả từ lưu vực có hiện tượng tương tự để lấy các thông số "tương tự" cũng là một giải pháp. Tuy nhiên, không hẳn thông số của của lưu vực tương tự đáp ứng các yêu cầu về độ phù hợp cho mô hình ở lưu

vực nghiên cứu mặc dầu tính chất và các đặc điểm của chúng có vẻ như nhau. Vấn đề này được trình bày chi tiết hơn ở phần 3.4.4 dưới đây.

3.4.4 Sự tương tự lưu vực và các vấn đề chuyển dịch thông số

- i) . 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 có điều kiện "tương tự" nhưng thiếu trạm đo. Gorgen (1983) đã đề xuất 3 xem xét về mặt kỹ thuật khác nhau có thể áp dụng để 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 của một hoặc nhiều lưu vực. Khi đó, các điều kiện vật lý của lưu vực tương tự và lưu vực xem xét có những tính chất thủy lực - thủy văn gần như nhau.
- ii) . Trừ khi có hai hay nhiều lưu vực tương tự về mặt thủy học (hầu hết được định danh bằng cách mở rộng), việc chuyển dịch thông số được khuyến khích sử dụng. Nếu phát hiện có sự khác biệt thực tế về mặt thủy văn thì vấn đề chuyển dịch thông số cần phải xem xét lại.
- iii) . Muốn định danh sự tương tự lưu vực cho mục tiêu chuyển dịch thông số cần phải có các thông tin đánh giá căn cứ vào 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.
- iv) . Trường hợp căn cứ vào xu thế khu vực (*regionalised trend*) liên quan đến các thông số mô hình từ nhiều lưu vực có trạm đo thì cần phát triển một bộ thông số tiêu chuẩn (*standard parameter set*) cho lưu vực thiếu trạm đo. Phương pháp này có một số đặc điểm sau:
 - + Đây là một phương pháp thủ vị và ít tốn kém để có các giá trị thông số .
 - + Kết quả nhận được có thể có chất lượng kém hơn vì thiếu số liệu kiểm chứng, tuy nhiên, nhờ cách này ta có thể có trực tiếp các thông số mà giảm công việc hiệu chỉnh.
 - + Thật ra, đây không hẳn là một kỹ thuật đáng được khuyến cáo khi áp dụng việc liên kết một mô hình thủy văn thông thường với một mô hình thủy văn môi trường. Thực tế cho thấy các thông số trong trường hợp làm mô hình hóa môi trường mang tính tương tác cao hơn và phức tạp hơn, đặc biệt là giữa thành phần số lượng nguồn nước và thành phần hóa học (chất lượng nước).
- v) . Pilgrim (1983) đề xuất một số điểm cần lưu ý xa hơn khi muốn xem xét chuyển dịch thông số:
 - + Xem xét tương tự lưu vực phải có sự quan hệ giữa chiều dài dòng chảy, độ dốc, độ nhám, ... Cần phải có đánh giá các mất cân xứng cơ bản khi tìm hiểu sự tương tự giữa các lưu vực.
 - + Nhất thiết phải có sự thông hiểu kỹ lưỡng liên quan đến tiến trình thủy văn (*hydrological processess*) và các biến đổi của chúng. Đặc biệt quan trọng là xác định được ảnh hưởng sự thay đổi tính chất dòng chảy theo không gian.

- vi) . Một nghiên cứu của Gorgen (1983) khi khảo sát các rủi ro khi chuyển dịch thông số giữa 3 lưu vực, trong đó có 2 lưu vực đầu có nhiều điểm tương tự và 1 lưu vực thứ ba thì khác biệt. Việc nghiên cứu thực hiện việc phân tích số liệu các đặc trưng vật lý của từng lưu vực như lớp phủ thực vật, địa chất tầng mặt và khoảng cách địa văn liên quan đến sự khác biệt giữa các lưu vực. Các khác biệt này có thể được diễn dịch ở dạng sự khác biệt trong đáp ứng thủy văn (*differences in hydrological response*) và xem đây là điều kiện xem xét quan trọng trong tiến trình chuyển dịch thông số. Ở hai lưu vực đầu, sau khi gia giảm sự khác biệt để có một sự "tương tự" tốt nhất đã cho phép chuyển dịch thông số thành công. Với lưu vực thứ ba, dù có cố gắng gia giảm vẫn dẫn đến sự khác biệt lớn về các đặc điểm vật lý, khi đem thông số của hai lưu vực tương tự để chuyển sang lưu vực thứ ba thì cho ra những kết quả kém cỏi.
- vii) . Do vậy, vậy chứng minh sự tương tự giữa các lưu vực là quan trọng. Sự dị biệt về không gian giữa các vùng nghiên cứu sẽ luôn luôn tạo ra các vấn đề sai biệt mang tính hệ thống.
- viii) . Có thể kết luận rằng, không thể chủ quan áp dụng một lưu vực được xem là "mẫu" cho các lưu vực khác nếu không có thử nghiệm đầy đủ. Khái niệm mô hình "mẫu" chỉ mang tính tương đối, không thể có một mô hình mang tính "toàn cầu" được.

3.4.5 Giá trị thông số và vấn đề quy mô của mô hình

- i) Sự thành lập thông số mô hình chịu chi phối bởi quy mô của mô hình. Khi dịch chuyển các thông số từ một mô hình có quy mô nhỏ sang một mô hình có quy mô lớn, các tiến trình thủy văn và chất lượng nước sẽ thay đổi. Sự thay đổi này có thể dẫn đến kết luận không thể đơn thuần áp dụng các thông số phù hợp cho một mô hình có quy mô nhỏ sang một mô hình có quy mô lớn nếu không có những khảo nghiệm chi tiết kỹ lưỡng hơn.
- ii) Mô hình môi trường được thiết lập trên căn cứ các quy mô vật lý có tỷ lệ nhỏ nhằm tạo ra các thông số có ý nghĩa vật lý đáp ứng điều kiện sử dụng cho nó. Tuy nhiên, khi quy mô gia tăng, sự bình quân, hệ số biến động và độ lệch chuẩn các thông số có thể bị phá vỡ dẫn đến chúng không còn đúng trên thực tế. Lý do là ở mô hình quy mô nhỏ tính chất đồng nhất dễ dàng đạt được hơn là mô hình có quy mô lớn. Khi đó, sự dị biệt các đặc điểm vật lý rất rõ nét..
- iii) Các mô hình vật lý thực hiện trong phòng thí nghiệm có quy mô nhỏ khi mở rộng ra thực tế thường gặp sự thất bại ít nhiều. Sự thất bại này có thể tiên đoán được, các ứng dụng mô hình vào thực tế cần phải có những điều chỉnh nhiều hơn. Sự điều chỉnh này cũng tiêu tốn nhiều công sức và thời gian để hiệu chỉnh trước khi áp dụng.

3.4.6 Vấn đề ngoại suy thông số

- i) Ngoại suy là một kỹ thuật toán học để kéo dài số liệu tính toán hoặc quan trắc hoặc thử nghiệm qua mô hình. Mục đích ngoại suy thường dùng để tiên đoán những khả năng xảy ra trong tương lai hoặc thử áp dụng khi có những trường hợp mở rộng

không gian hoặc tiên lượng sự cố (rủi ro môi trường, thiên tai, ...).

- ii) Việc ngoại suy hiện tượng hoặc số liệu có thể đúng hoặc gần đúng ở những điều kiện (thời gian, sự kiện) gần kết quả tính toán nhưng khi phán đoán cho những thời đoạn dài hoặc sự cố quá lớn thường không đúng hoặc kém chính xác. Sự hạn chế của nó có thể xuất hiện khi có sự phụ thuộc giữa thông số này và thông số khác.
- iii) Điều này có thể lý giải là do các thông số đã được Hiệu chỉnh trong điều kiện mô tả của mô hình và chỉ đúng với diễn biến trong mô hình mà thôi. Khi điều kiện này mở rộng thì tính "tối ưu" của thông số không còn đúng nữa và khi điều kiện vật lý các hiện tượng thực tế nằm ngoài sự tính toán của mô hình.
- iv) Khi sử dụng các thông số thành lập từ chuỗi số liệu ngắn mở rộng theo cách ngoại suy cho chuỗi dài hơn sẽ gặp phải sự tích lũy sai số và làm gia tăng các khiếm khuyết có thể gặp trong quá trình khái quát hóa mô hình.
- v) Phần lớn các mô hình không thể áp dụng với chuỗi dữ liệu nằm ngoài khoảng Hiệu chỉnh của mô hình.

Chương 4. THỂ HIỆN MÔ HÌNH

4.1 Kiểm nghiệm và định trị mô hình

Để đánh giá và hiểu rõ hơn giá trị ý nghĩa của một mô hình qua cách thể hiện, thông tin về nghi thức thực hiện mô hình hóa là một đòi hỏi cần thiết giữa người sử dụng mô hình và người phát triển mô hình. Việc thể hiện mô hình rất quan trọng trong việc thuyết phục người ra quyết định có thêm những cân nhắc trên cơ sở khoa học, qua những gì mà mô hình có thể chứng minh bằng kết quả, bằng định trị các mã mô hình, các hiệu chỉnh, kiểm nghiệm và báo cáo đánh giá thông qua lý luận và thực tiễn.

Theo định nghĩa đã trình bày ở phần 2.2.5, kiểm nghiệm (*verification*) mô hình là bước tiếp sau công việc hiệu chỉnh mô hình nhằm kiểm tra các thông số mô hình đưa ra có phù hợp với các diễn biến của thực tế hay không.

Ngoài ra, việc kiểm nghiệm mô hình nhằm kiểm tra độ chính xác giữa các dữ liệu đã biết với một số tiêu chuẩn thống kê. Việc kiểm nghiệm cũng là một phương cách để xem xét lại các số liệu quan trắc thực tế. Một cách khác, có thể nói kiểm nghiệm mô hình là công việc đo đặc tính thể hiện của mô hình, nó là công cụ dẫn đến việc minh xác (*confirmation*), chứng nhận (*certificate*) và kiểm định (*accreditation*) như là một bằng chứng về chất lượng mô hình.

4.2 Nghiên cứu kiểm nghiệm

4.2.1 Mục tiêu

Theo định nghĩa ở mục 2.2.5, sau khi hiệu chỉnh, mô hình cần được kiểm nghiệm nhằm kiểm tra các thông số mô hình đưa ra có phù hợp với các diễn biến của thực tế hay không. Nói một cách chi tiết, việc kiểm nghiệm gồm các trả lời các hàm ý sau:

- Các biểu hiện ở đầu ra của mô hình mô phỏng có phù hợp với các biểu hiện đầu ra của hệ thống thực tế đã được quan trắc.
- Các thông tin ở đầu ra của mô hình (lưu ý là đầu ra của mô hình mô phỏng không phải là thành lập số liệu mà là thông tin) có đủ độ chính xác như mong muốn ở mô hình.
- Trong quá trình xác định các thông số, nếu có sai biệt ý nghĩa giữa số liệu của sự kiện quan trắc và giá trị mô phỏng, thì cần xác lập mức độ tin cậy của mô hình.
- Việc kiểm nghiệm phải mang tính khách quan: mô hình cần phải bắt buộc qua các thử nghiệm thống kê chính thống và nghiêm ngặt theo các mức độ phù hợp định trước theo tầm quy mô thực hiện.
- Khi làm kiểm nghiệm đầu ra của mô hình, giả thiết rằng mô hình là có cơ sở vững chắc bao gồm các hợp lý trong thiết kế mô hình, các phương trình chủ đạo và mã hóa chương trình máy tính.
- Trong bất kỳ sự kiểm nghiệm nào, có thể một số thông số luôn luôn đặt yêu cầu các điều kiện thử nghiệm mô hình trong khi một số thông số khác không thể liên kết được với một số sự kiện đã xảy ra.

4.2.2 Hàm mục tiêu

Trước khi làm kiểm nghiệm mô hình, cần thiết phải định lượng các điều kiện kiểm nghiệm. Việc này thể hiện qua khái niệm hàm mục tiêu (*objective function* - OF).

Hàm mục tiêu là một trị số của tiến trình thống kê đặc thù thể hiện mức độ tương ứng, hoặc còn gọi là độ gần (*degree of closeness*), giữa giá trị thực đo và giá trị mô phỏng.

Có nhiều kiểu để xác định hàm mục tiêu OF tùy theo mục đích đặc thù và tương quan trong các mô hình ứng dụng. Hàm mục tiêu thường theo xu hướng tiến đến trị 0 (khi hàm mục tiêu là tối thiểu hóa, OF 0) hoặc tiến đến trị đơn vị, OF 1 (khi hàm mục tiêu là tối đa hóa).

4.2.3 Các trị số thống kê dùng cho kiểm nghiệm

Khi kiểm nghiệm các trị số thống kê thường được áp dụng 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 rời rạc ở kết quả đầu ra. Việc này có thể đánh giá qua thống kê mức độ phù hợp (*goodness-of-fit statistics*) từ kết quả mô hình và thực tế. Sự đồng biến về chuỗi thời gian trên cơ sở phép áp 1:1. Nghĩa là giá trị mô phỏng có "gần" với trị trung bình của số liệu đo thực tế không. Ngoài ra các trị thống kê khác cần được xem xét, gồm:

- i). Trị trung bình (*mean*)

$$\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \quad (4-1)$$

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 (hoặc tổng số trị quan trắc)

Hàm mục tiêu liên quan đến trị trung bình thể hiện mức độ phần trăm (%) giữa trị trung bình số quan trắc và số mô phỏng. Nếu mô hình là tốt thì hàm mục tiêu trị trung bình phải tối thiểu hóa (tiến đến trị 0):

$$100 \cdot \frac{(x - y)}{\bar{X}} \rightarrow 0 \quad (4-2)$$

- ii). Phương sai (*variance*) V_x

$$V_x = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})^2 \quad (4-3)$$

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

$$100. \frac{(V_x^2 - V_y^2)}{V_x^2} \rightarrow 0 \quad (4-4)$$

iii). Độ lệch chuẩn (*standard deviation*) S_x

$$S_x = \sqrt{V_x} \quad (4-5)$$

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

$$100. \frac{(S_x - S_y)}{S_x} \rightarrow 0 \quad (4-6)$$

iv). Hệ số biến động (*variance deviation*) CV_x

$$CV_x = \frac{S_x}{\bar{X}} \quad (4-7)$$

v). Hệ số thiên lệch (*skewness*) CS_x

$$CS_x = \frac{n}{S_x(n-1)(n-2)} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})^3 \quad (4-9)$$

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

$$100. \frac{(CS_x - CS_y)}{CS_x} \rightarrow 0 \quad (4-10)$$

vi). Sai số thống kê

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

$$SE_x = \frac{S_x}{\sqrt{n}} \quad (4-11)$$

+ Sai số tiêu chuẩn trung bình (*root mean square error - RMSE*) của trị quan trắc xi và trị mô phỏng yi

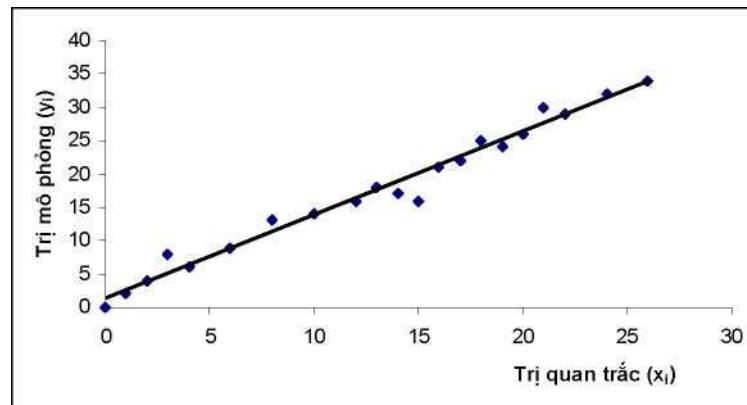
$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}{n}} \quad (4-12)$$

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

vii). Hệ số tương quan (*correlation coefficient*) cho quan hệ tuyến tính

Trường hợp kết quả mô hình cho quan hệ tuyến tính giữa 2 biến số x và y như hình 4.1. Trong đó x là biến số độc lập (trị quan trắc) và y là biến số phụ thuộc (trị mô phỏng). Phương pháp vẽ đường quan hệ theo bình phương cực tiểu để xác định hồi quy tuyến tính thường được áp dụng.

Khi đó quan hệ giữa 2 dãy số liệu theo phương trình đường thẳng $y = ax + b$, trong đó a là hằng số nền và b là độ dốc của đường thẳng.



Hình 4.1: Một ví dụ về đường tương quan tuyến tính giữa trị quan trắc và trị mô phỏng

Hệ số tương quan R giữa trị quan trắc và trị mô phỏng các định theo:

$$R = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})(y_i - \bar{Y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})^2} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{Y})^2}} \quad (4-13)$$

trong đó:

- $\bar{X}$ và $\bar{Y}$ - trị trung bình của các trị quan trắc và các trị mô phỏng;
- x_i và y_i - trị quan trắc và trị mô phỏng được ở thời điểm thứ i ;
- n - số thời điểm quan trắc (hoặc tổng số trị quan trắc)

- Hệ số tương quan R càng gần tiến đến ± 1 thì mức đồng tương quan càng lớn.
- Khi $R > 0$ thì tương quan là đồng biến và khi $R < 0$ thì tương quan là nghịch biến.
- R càng tiến về 0 thì tương quan càng kém.
- Hàm mục tiêu của hệ số tương quan là tối đa hóa, $R \rightarrow 1$

viii). Độ dốc b (*slope*) cho đường bình phương cực tiểu (least-square line) thể hiện sự quan hệ giữa sự thay đổi xu thế mô phỏng và sự thay đổi xu thế quan trắc:

$$b = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \cdot \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2} \quad (4-14)$$

Hàm mục tiêu của độ dốc b là tối đa hóa đến trị đơn vị, nghĩa là b càng tiến đến 1 thì khả năng "phù hợp" của các trị số càng cao.

số tương quan (correlation coefficient) cho quan hệ tuyến tính Trường hợp kết quả mô hình cho quan hệ tuyến tính giữa 2 biến số x và y như hình 4.1. Trong đó x là biến số độc lập (trị quan trắc) và y là biến số phụ thuộc (trị mô phỏng). Phương pháp vẽ đường quan hệ theo bình phương cực tiểu để xác định hồi quy tuyến tính thường được áp dụng Khi đó quan hệ giữa 2 dãy số liệu theo phương trình đường thẳng $y = ax + b$, trong đó a là hằng số nền và b là độ dốc của đường thẳng.

ix) . Hằng số nền (*base constant*) hay độ chắn y (*y-intercept*)

$$a = \frac{\sum_{i=1}^n y_i - b \sum_{i=1}^n x_i}{n} \quad (4-15)$$

Nếu quan hệ là đồng biến thì $y = ax + b$. Hàm mục tiêu của a 0.

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

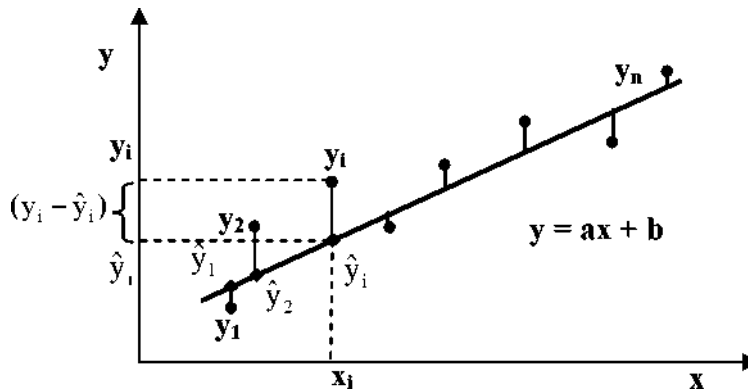
+ Toàn tổng các bình phương (*total sum of squares - SST*) là một số đo sự phân tán của các giá trị mô phỏng so với trị trung bình. STT được xác định như sau:

$$SST = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{Y})^2 \quad (4-16)$$

+ Tổng các bình phương giải nghĩa (*explained sum of squares* - SSR) là tổng sai lệch các giá trị mô phỏng (lấy từ đường quan hệ tuyến tính giữa các chuẩn thực đo và chuỗi mô hình) với trị trung bình mô phỏng:

$$SSR = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{Y})^2 \quad (4-17)$$

Trị y_i là giá trị xác định trên đường thẳng quan hệ tuyến tính giữa các số đo thực tế và các số mô phỏng, như hình 4.2:



Hình 4.2 Giá trị $\hat{y}_i$ trên đường quan hệ tuyến tính giữa số thực đo và số mô phỏng

+ Tổng các bình phương phi giải nghĩa (*unexplained sum of squares* - SSE) là tổng bình phương các khoảng lệch cực tiểu ($y_i - \hat{y}_i$), như minh họa trên hình 4.2.

$$SSE = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (4-18)$$

+ Tương quan của 3 trị tổng bình phương trên là:

$$SST = SSR + SSE \quad (4-19)$$

Thực chất, sai lệch này là sai số làm tròn, do vậy dấu bằng (=) nên thay là dấu xấp xỉ (~)

$$SST \sim SSR + SSE \quad (4-20)$$

xi) . Hệ số định trị (*coefficient of determination*) dùng để đo mức độ phối hợp giữa các trị mô phỏng và các trị lấy từ đường quan hệ mô phỏng:

$$r^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{Y})^2 - \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{Y})^2} = \frac{SST - SSE}{SST} = \frac{SSR}{SST} \quad (4-21)$$

Giá trị r^2 luôn luôn nhỏ hơn 1 nhưng không thể là giá trị nhỏ hơn 0. Trị r^2 càng cao càng

chứng tỏ mức độ phối hợp càng tốt. Hàm mục tiêu của hệ số định trị là tối đa hóa trị r^2 .

xii). Hệ số hữu hiệu (*coefficient of efficiency*) là số đo mức độ phối hợp giữa các giá trị quan trắc và trị mô phỏng.

$$E = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{Y})^2 - \sum_{i=1}^n (y_i - x_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{Y})^2} \quad (4-22)$$

Giá trị E có thể dưới số 0 nhưng không thể lớn hơn 1. Hàm mục tiêu của hệ số hữu dụng là tối đa hóa trị E tiến đến trị r^2 .

xiii). Hệ số đồng thuận (*coefficient of agreement* - IA) thể hiện sự hài lòng về mức độ tiên đoán sai, số của mô hình từ phương trình hồi quy:

$$IA = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}{\sum_{i=1}^n (|\hat{y}_i - \bar{Y}| + |y_i - \bar{Y}|)^2} \quad (4-23)$$

Giá trị IA càng gần đến 1 thì sự đồng thuận cao, càng gần đến 0 thì sự bất đồng thuận lớn.

Hàm mục tiêu cho hệ số đồng thuận là tối đa hóa IA $\Rightarrow 1$.

4.3 Vấn đề kiểm nghiệm mô hình

4.3.1 Các vấn đề thường gặp

- Trong kiểm nghiệm mô hình, lý tưởng nhất là số liệu quan trắc có đầy đủ sự kiểm soát chất lượng, đủ chi tiết và đủ độ dài theo thời gian.
- Thực tế là chuỗi số liệu không đủ dài, cần phải có các phương pháp mới để kéo dài chuỗi số liệu từ thực tế ngoài hiện trường hoặc lấy thêm từ các lưu vực tương tự, tình huống môi trường xấp xỉ.
- Cần thiết 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 mô hình.
- Các số liệu thực tế nghèo nàn có thể dẫn đến sự hiệu chỉnh và kiểm chứng sai lạc. Một số người làm mô hình cố gắng sử dụng phép ngoại suy để kéo dài chuỗi số liệu có thể dẫn đến tình trạng có kết quả giải đáp đúng cho những nguyên nhân sai lầm. Điều này làm hạn chế hiệu quả mô hình.

4.3.2 Hậu kiểm việc phê chuẩn và kiểm nghiệm mô hình

- Mặc dầu việc hiệu chỉnh và kiểm chứng có thể thỏa mãn một số chỉ tiêu thống kê nhưng cũng cần đánh giá độ chính xác của mô hình khi tiên đoán kết quả cho tương lai.

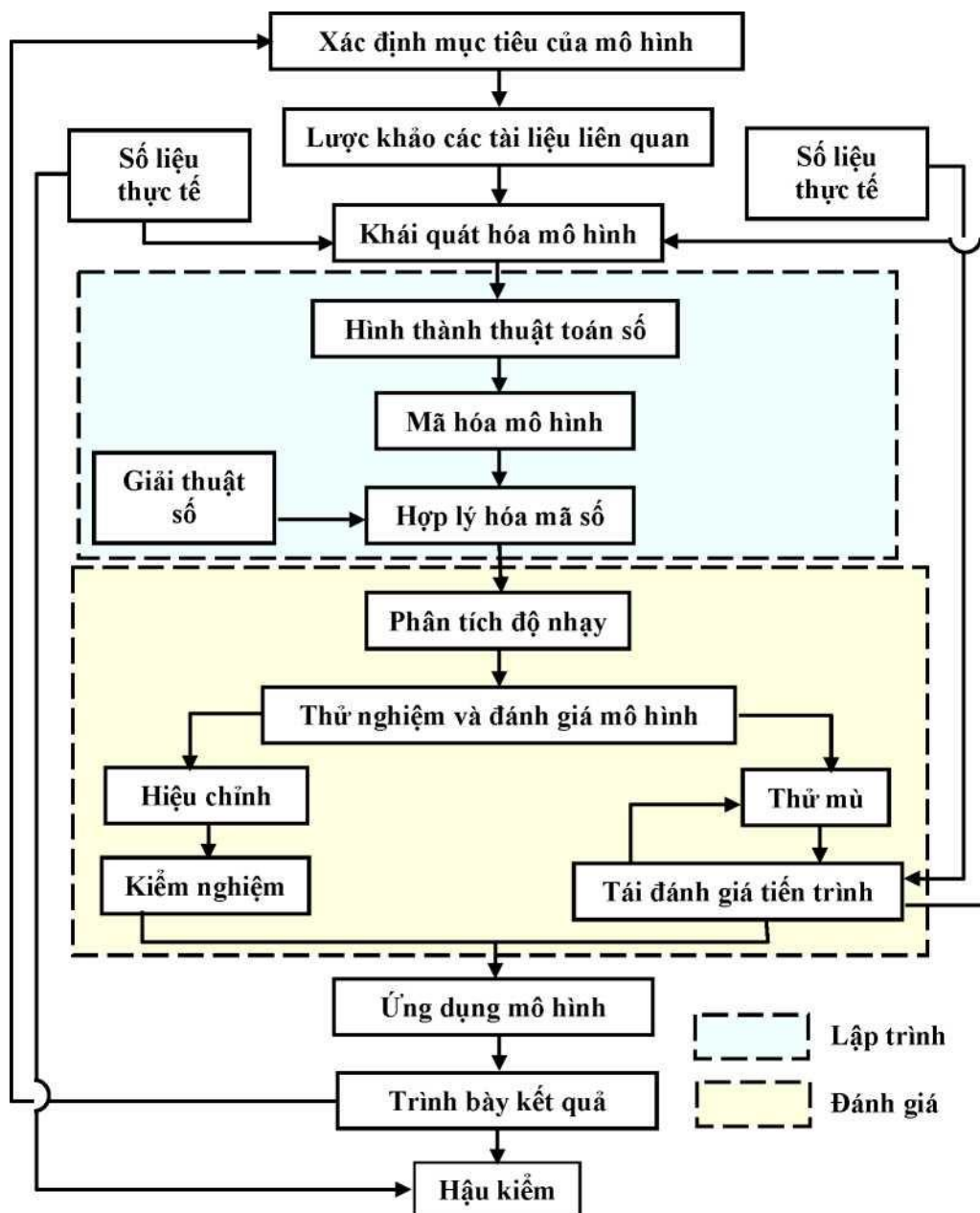
Bước làm này gọi là hậu kiểm (*post-audit*).

- Trong công việc hậu kiểm, các dữ liệu mới sẽ được thu thập nhiều năm sau khi việc nghiên cứu mô hình đã hoàn tất trước đó. Việc vận hành mô hình với chuỗi số liệu mới để đánh giá mức độ chính xác tiên đoán đầu ra. Có thể có những thay đổi yếu tố vật lý như địa hình, độ che phủ mặt đất, thay đổi khi sử dụng nguồn nước và các tài nguyên khác làm các thông số mô hình đã nghiên cứu trước đó không còn chính xác nữa hay xuất hiện những khác biệt có ý nghĩa.
- Khi mô hình cũ không còn thỏa mãn kết quả sự tiên đoán, nhà thiết kế phải hiệu chỉnh và kiểm nghiệm lại các thông số hoặc phải thay đổi giả thiết, thuật tính toán, và thậm chí thay đổi cấu trúc, khái niệm mô hình.

Chương 5. ỨNG DỤNG MÔ HÌNH HÓA MÔI TRƯỜNG

5.1 Sơ đồ phát triển và ứng dụng mô hình

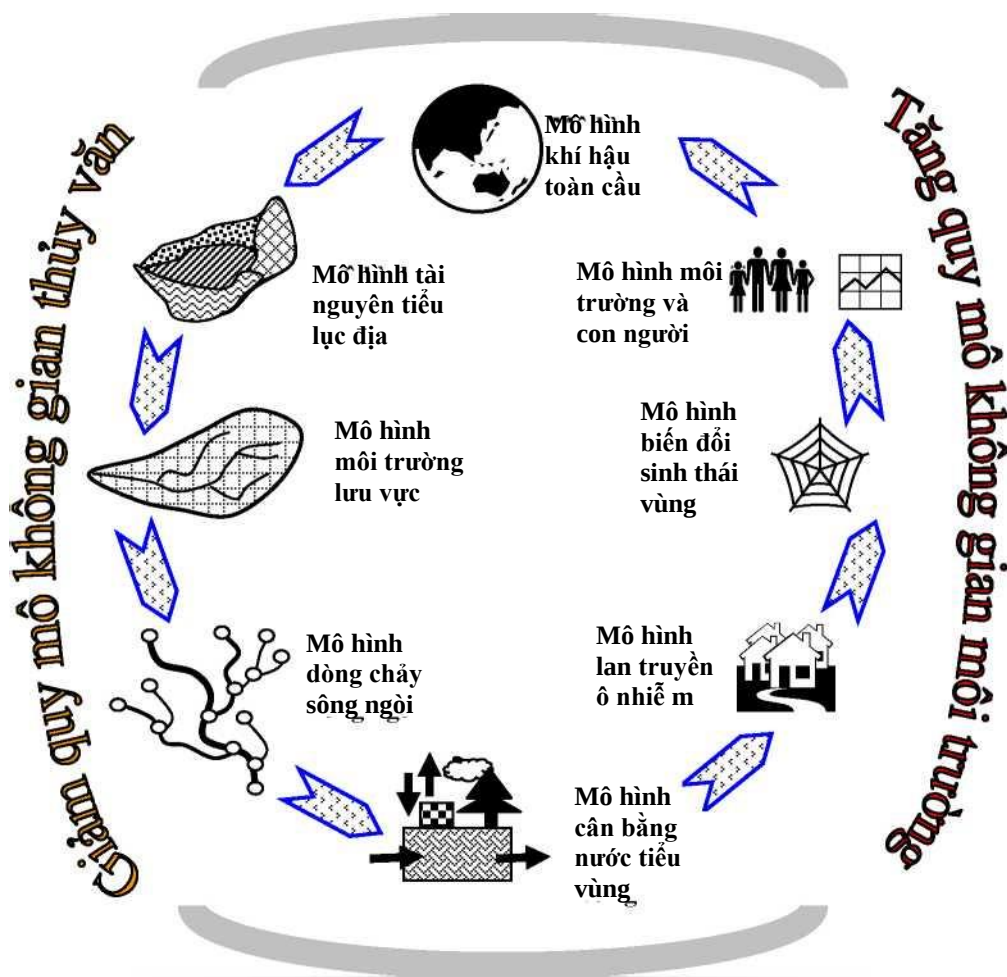
Hình 5.1 là sơ đồ tổng quát cho các bước hoàn chỉnh việc phát triển và ứng dụng một mô hình. Trong đó 2 quá trình được xem là quan trọng là lập trình thuật toán và đánh giá kết quả của mô hình.



Hình 5.1 Sơ đồ phát triển và ứng dụng mô hình

5.2 Xu thế phát triển mô hình hóa môi trường theo quy mô không gian

Các diễn biến trong chu trình thủy văn là một trong các yếu tố quan trọng của các quan hệ môi trường - sinh thái. Sự biến đổi khí hậu diễn ra liên tục từ mức toàn cầu đến mức vi khí hậu trong một không gian nhỏ đều có những quan hệ tương tác. Ảnh hưởng này đã được một số nhà thủy văn môi trường mô phỏng từ nhiều cấp quy mô không gian (Hình 5.2).



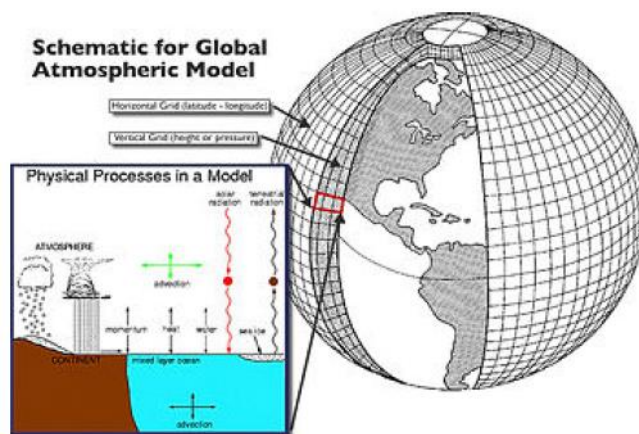
Hình 5.2 Xu thế phát triển mô hình thủy văn môi trường theo quy mô không gian

5.3 Giới thiệu một số mô hình môi trường

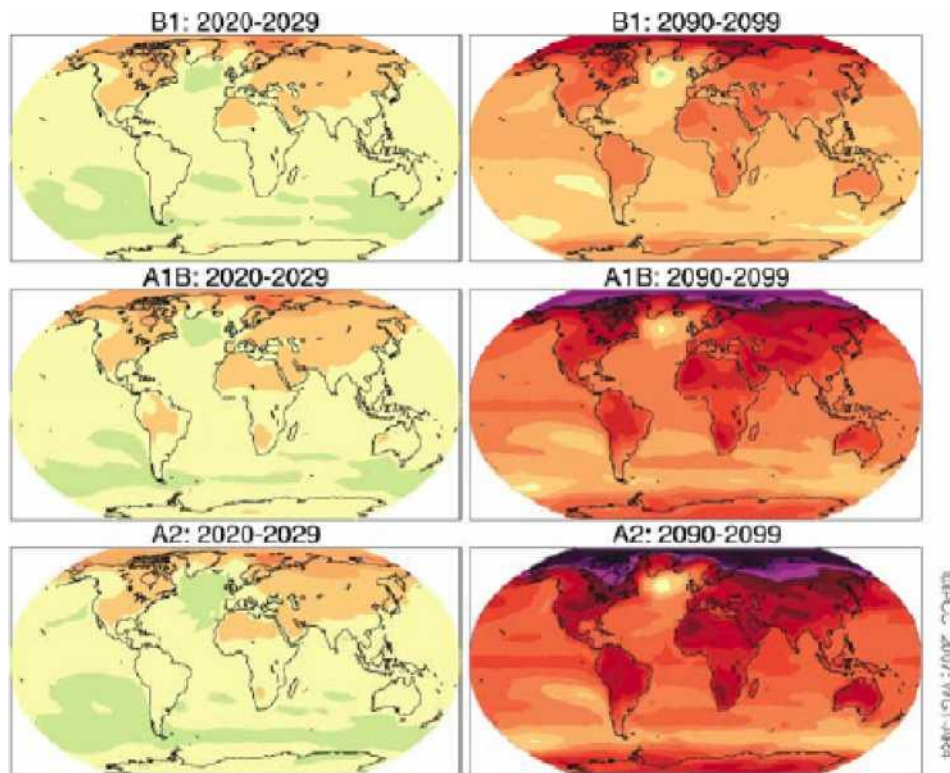
5.3.1 Mô hình biến đổi khí hậu toàn cầu

Biến đổi khí hậu toàn cầu đang là một vấn đề thời sự được nhiều khoa học trên thế giới quan tâm vì nó ảnh hưởng đến toàn bộ hoạt động sinh hoạt, sản xuất, sinh thái môi trường trên toàn cầu. Các mô hình nổi tiếng về khí hậu được phát triển từ Trung tâm Quốc gia về Nghiên cứu Khí quyển (the National Center for Atmospheric Research - NCAR) ở Boulder, Colorado, USA, Phòng Thí nghiệm Thủy Động lực học Địa Vật lý (the Geophysical Fluid Dynamics Laboratory) tại Princeton, New Jersey, Mỹ, Trung tâm Hadley về Nghiên cứu và Dự báo Khí hậu (the Hadley Centre for Climate Prediction and Research (in Exeter, UK), Viện Khí tượng học Max Planck (the Max Planck Institute for Meteorology) ở Hamburg, Germany. Chương trình Nghiên cứu Khí hậu Thế giới (The World Climate Research Programme - WCRP), của Tổ chức Khí tượng Thế giới (the World Meteorological Organization - WMO). Một số mô hình đã phát triển như:

- > **Bộ Mô hình Luân chuyển Tổng quan** (General Circulation Models - GCMs), còn gọi là Bộ Mô hình Khí hậu Toàn cầu (Global Climate Models), là một mô hình máy tính chuyên dùng cho dự báo khí hậu toàn cầu, tìm hiểu khí hậu và phản ánh sự thay đổi khí hậu. Mô hình khởi thủy GCMs được 2 nhà khoa học Syukuro Manabe và Kirk Bryan từ Phòng Thí nghiệm Thủy Động lực học Địa Vật lý (Mỹ) phát triển.
- > **Mô hình Khí quyển Toàn cầu** (Global Atmospheric Model - GAM) là một phần của bộ mô hình chuyên về khí hậu được phát triển từ các phương trình vi phân dựa vào các định luật vật lý, cơ học chất lưu và hóa học. Mô hình này tính toán tốc độ gió, chuyển hóa nhiệt, bức xạ mặt trời, độ ẩm tương đối và thủy văn nước mặt (Hình 5.3).
- > **Mô hình nghiên cứu tác động khí hậu khu vực PRECIS** (Providing Regional Climates for Impact Studies) do Trung tâm Hadley về Nghiên cứu và Dự báo Khí hậu phát triển (Hình 5.4).



Hình 5.3 Mô hình Khí quyển Toàn cầu



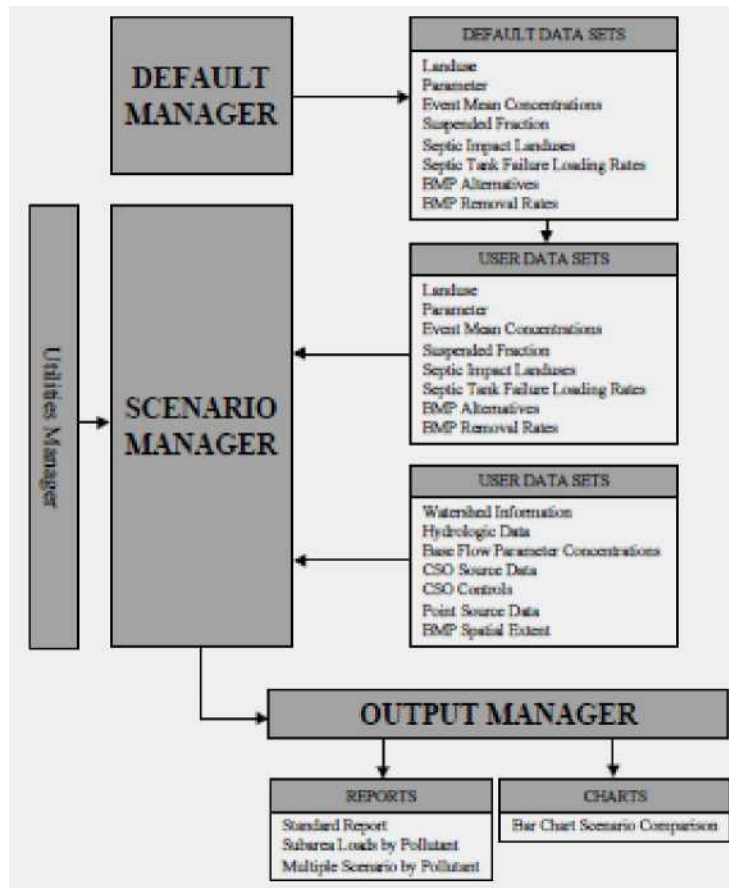
Hình 5.4 Kết quả dự báo sự gia tăng nhiệt độ toàn cầu từ PRECIS

5.3.2 Mô hình quản lý lưu vực

Mô hình Quản lý Lưu vực (Watershed Management Model - WMM) được phát triển bởi nhà khoa học người Mỹ Camp Dresser and McKee (CDM). WMM phát triển chủ yếu để tính toán khả năng dung nạp chất ô nhiễm theo năm hoặc mùa theo dòng chảy tràn xuống lưu vực (Hình 5.5 và 5.6). Chương trình này hữu dụng cho các nhà quản lý chất lượng nước lưu vực.



Hình 5.5 Trang chính mô hình WMM



Hình 5.6 Cấu trúc Mô hình Quản lý Lưu vực WMM

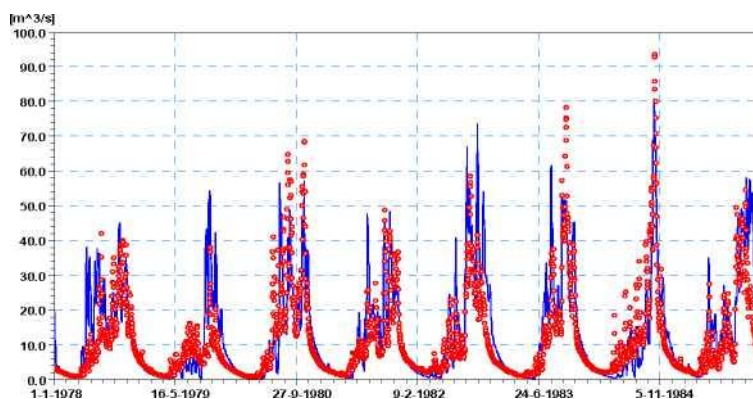
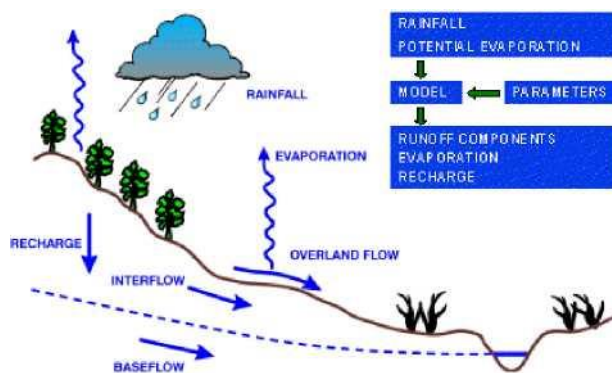
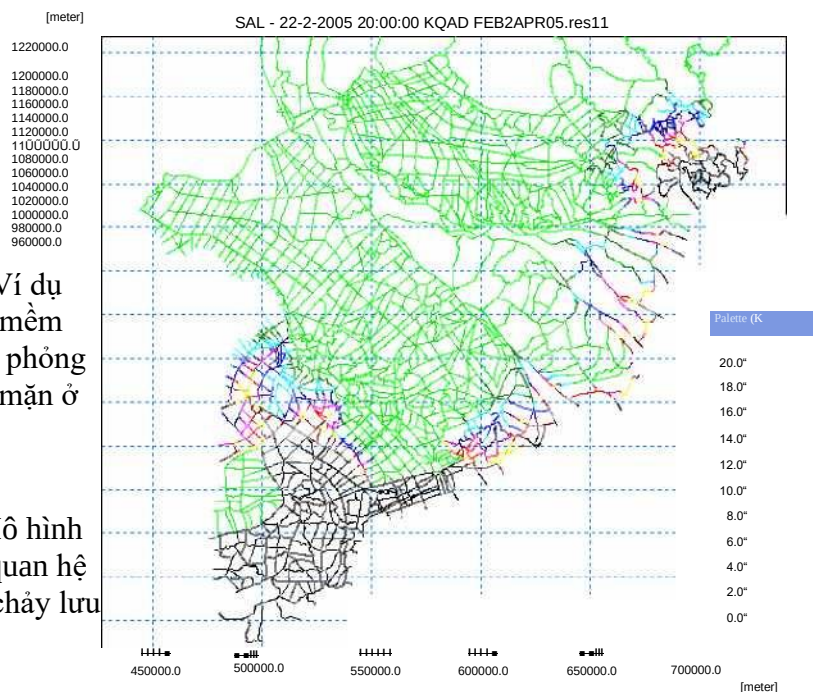
5.3.3 Bộ mô hình thủy lực - thủy văn MIKE

MIKE là tên của bộ mô hình nổi tiếng của Viện Thủy lực Đan Mạch (Danish Hydraulics Institute - DHI) phát triển. Mô hình MIKE thực hiện tốt việc mô phỏng các bài toán liên quan đến thủy văn môi trường như:

- Nghiên cứu xâm nhập mặn (Hình 5.7)
- Nghiên cứu lũ lụt
- Nghiên cứu diễn biến chất lượng nước trên hệ thống sông kênh.
- Nghiên cứu xói lở và bồi lắng dòng sông.
- Nghiên cứu quan hệ mưa - dòng chảy một lưu vực (Mô hình NAM, Hình 5.8)

Hình 5.7 Ví dụ
kết quả phân mềm
MIKE 11 mô phỏng
sự xâm nhập mặn ở
ĐBSCL

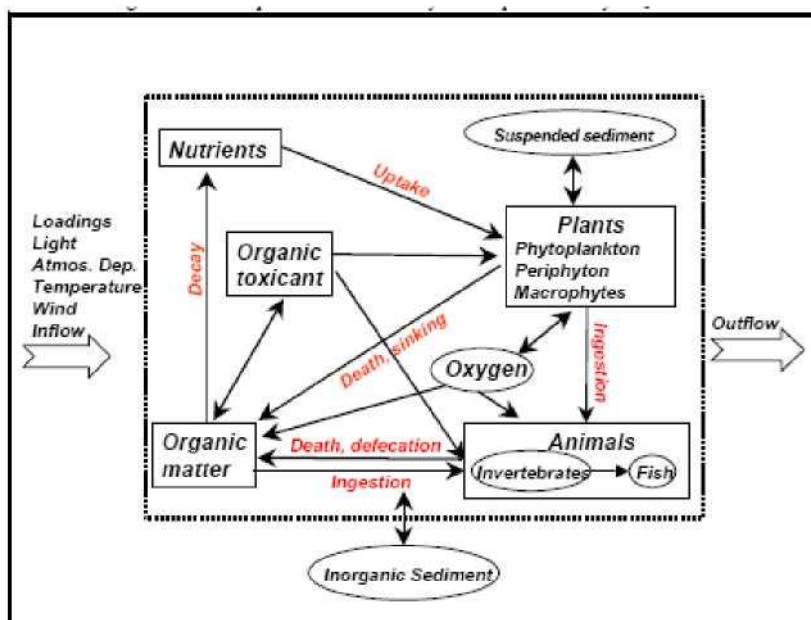
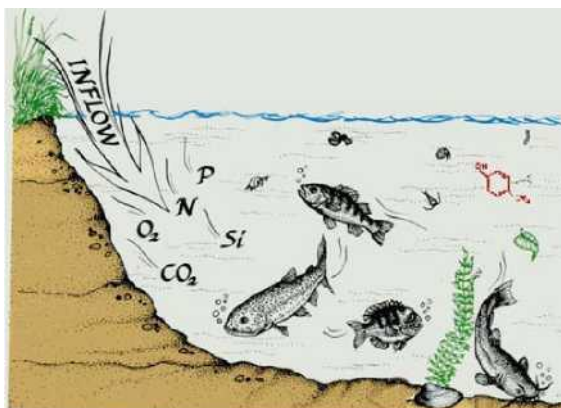
Hình 5.8 Mô hình
NAM cho quan hệ
mưa - dòng chảy lưu
vực



5.3.4 Mô hình ô nhiễm môi trường sinh thái nước ngọt

Mô hình AQUATOX (Release 2.2) là một phần mềm mô phỏng ảnh hưởng của các chất ô nhiễm lên hệ sinh thái nước ngọt (Hình 5.9). Mô hình này là một cung cụ tốt cho các nhà nghiên cứu sinh thái nước ngọt, nhà thủy văn môi trường và quản lý tài nguyên thủy sản. Đây là mô hình miễn phí do Cục Bảo vệ Môi trường Mỹ phát triển. Phạm vi ứng dụng của AQUATOX gồm:

- Phát triển mục tiêu dinh dưỡng định lượng theo điểm cuối sinh học mong muốn.
- Đánh giá các yếu tố tạo stress do sự hủy hoại sinh học quan trắc được.
- Dự báo ảnh hưởng thuốc trừ sâu và độc chất hòa tan khác vào thủy sinh.
- Đánh giá tiềm năng chịu đựng của hệ sinh thái đối với các loài xâm nhập.
- Xác định ảnh hưởng của việc sử dụng đất lên thủy sinh.
- Xác lập thời gian hồi phục của cá và cộng đồng động vật không xương sống sau khi giảm mức tải ô nhiễm.



Hình 5.9 Mô hình khái niệm của AQUATOX về thay đổi nồng độ ở thủy vực

5.4 Mô hình hóa ô nhiễm biển

Công cụ hạn chế ô nhiễm môi trường biển là một trong những vấn đề thời sự của khoa học hiện đại. Một trong các hướng của vấn đề này là nghiên cứu các quá trình tự làm sạch chất ô nhiễm của biển và đại dương. Trong môi trường biển, bên cạnh những quá trình sinh học và lý - hóa học, có tác động làm giảm nồng độ tạp chất, thì các quá trình thủy động lực cũng đóng vai trò quan trọng. Chính là các dòng chảy biển và khuếch tán rối quyết định sự vận chuyển, phân tán và làm loãng tạp chất.

Chương này sẽ trình bày những phương pháp lý thuyết tính lan truyền các chất ô nhiễm trong điều kiện biển, nghiên cứu về ảnh hưởng của hoàn lưu nước và khuếch tán rối tới kết quả tính nồng độ các chất, làm quen với những kết quả chính trong nghiên cứu thực nghiệm về khuếch tán rối trong những điều kiện thực.

5.4.1. Giới thiệu bài toán lan truyền chất

Diễn biến của tạp chất trong môi trường biển tùy thuộc vào nhiều nhân tố: *hóa học* (sự phân rã, liên kết với chất khác, lắng đọng vào trầm tích); *lý học* (chuyển sang trạng thái pha khác, hấp phụ, kết hạch); *thủy động lực học* (vận chuyển bởi các dòng chảy và phát tán trong quá trình khuếch tán rối); *sinh học* (sự tích tụ và vận chuyển bởi sinh vật biển). Sự biến đổi nồng độ tạp chất trong trường hợp tổng quát được mô tả bằng phương trình khuếch tán rối ba chiều, có tính đến sự tương tác lý - hóa của tạp chất với môi trường và sự hiện diện các nguồn tạp chất:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + (w + w_c) \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} K \frac{\partial C}{\partial z} + K_{CL} \nabla^2 C + Q \delta(x - x^*) \delta(y - y^*) \delta(z - z^*) - \frac{C}{\tau_0}. \quad (6.1)$$

ở đây C - nồng độ tạp chất; u, v, w - các thành phần vận tốc dòng chảy theo các trục tọa độ Đề các x, y, z ; w_c - vận tốc thẳng đứng trọng lực riêng của tạp chất; τ_0 hằng số phân hủy sinh hóa tạp chất; K_C và K_{CL} hệ số khuếch tán rối trong phương thẳng đứng và phương ngang; δ - hàm Dirac; Q - công suất của nguồn tạp chất; x^*, y^*, z^* - các tọa độ vị trí nguồn trong không gian ba chiều.

Chúng ta nêu lên một số nhận xét về phương trình (6.1).

1). Vì diễn biến của tất cả các trường trong đại dương có đặc điểm rối, phương trình (6.1) nhận được dựa trên những quan niệm thống kê - xác suất về tính ngẫu nhiên của chuyển động các phần tử phát tán. Phương trình này không mô tả các trường tức thời của tạp chất và dòng chảy, mà là các trường được lấy trung bình trong khoảng thời gian t . Ngoài ra, trong phương trình này, các thông lượng rối của tạp chất $-\rho \overline{v_j C'} = \Phi_{Cj}^T$ theo truyền thống được tham số hóa tương tự như khuếch tán phân tử, thông qua những hệ số khuếch tán rối và những gradient trung bình nồng độ tạp chất, tức:

$$\Phi_{Cj}^T = \rho K_{Cij} \frac{\partial C}{\partial x_j}$$

2). Tùy thuộc vào những tính chất lý - hóa của tạp chất độc hại, trên cơ sở phương trình (8.1) có thể nghiên cứu sự lan truyền của *tạp chất tích cực động lực* (lắng xuống, $w_c > w$, hoặc nổi lên, $w_c < w$), hoặc của *tạp chất thụ động động lực*, không có vận tốc trọng lực riêng ($w_c = 0$) và bị mang đi với vận tốc của các dòng chảy.

3). Do những quá trình sinh hóa, nồng độ tạp chất liên tục biến đổi. Để đặc trưng các tính chất *không bảo thủ* của tạp chất, trong phương trình (8.1) có thể sử dụng thời gian phân hủy sinh -

hóa τ_0 , hoặc hệ số không bảo thủ p .

Hệ số không bảo thủ được đưa vào như sau: $p = \frac{1}{Q} \frac{dQ}{dt}$ và có thứ nguyên $[T^-]$. Khi $p < 0$ diễn ra sự phân hủy hợp chất, khi $p > 0$ diễn ra sự tích tụ, còn khi $p = 0$ tạp chất bảo thủ.

4). Số hạng thứ ba ở vế phải của phương trình (8.1) xác định sự hiện diện nguồn tạp chất ô nhiễm với công suất Q tại điểm có tọa độ (x^*, y^*, z^*) . Do kích thước nguồn ô nhiễm tương đối bé so với những khoảng cách mà tạp chất bị mang đi, ta có thể coi đó là nguồn điểm, hay nguồn khối. Để miêu tả nguồn điểm, hàm δ (hàm số Dirac) được đưa vào phương trình (6.1).

Ta phát biểu những điều kiện biên. Đó là điều kiện tại tất cả các mặt bao quanh vùng nước đang xét, cần phải biết hoặc thông lượng tạp chất (thông lượng khuếch tán và thông lượng bình lưu), hoặc nồng độ của tạp chất. Trường hợp chung nhất, những điều kiện đó được thể hiện như sau:

$$a \left[K_C \frac{\partial C}{\partial z} - (\beta_i + w_C) C + Q_i \right] + b (C - C_i) = 0, \quad (6.2)$$

trong đó a và b – hệ số được cho, có các giá trị hoặc bằng 0, hoặc bằng 1; β_i – các tham số tương tác tạp chất với bề mặt tương ứng. Q_i – công suất của nguồn tại mặt tương ứng. Những điều kiện biên này của (6.2) cho phép đặt ra những dạng bài toán khác nhau (với điều kiện biên loại 1 hay loại 2) và tính đến tác động của một số nguồn tạp chất khác nhau. Thí dụ, Q_1 – phát thải tạp chất tại mặt đại dương (từ khí quyển, từ tàu thủy, các chất thải công nghiệp, sinh hoạt v.v...); Q_2 – các nguồn tạp chất tại đáy (phát thải từ các ống đặt dưới đáy, từ các máy thăm dò); Q_3 – phát thải các tạp chất từ các nguồn nằm tại ranh giới của thủy vực; C_i – những nhiễu động trong trường nồng độ tạp chất, gây nên bởi các nhân tố bên ngoài.

Ta sẽ xét một dạng cụ thể của các điều kiện biên (6.2) ở mặt biên, tại $z = 0$. Với giả thiết không có tương tác của tạp chất với khí quyển, $\beta_1 = 0$, các điều kiện biên như sau:

a). Đối với tạp chất tích cực động lực có khả năng nổi lên:

$$K_C \frac{\partial C}{\partial z} + w_C + Q_1 = 0; \quad (6.3)$$

b). Đối với tạp chất tích cực động lực có khả năng lắng xuống

$$K_C \frac{\partial C}{\partial z} - w_C + Q_1 = 0; \quad (6.4)$$

c). Đối với tạp chất động lực trung tính (thụ động)

$$K_C \frac{\partial C}{\partial z} + Q_1 = 0. \quad (6.5)$$

Các điều kiện biên ở đáy biển tại $z = H(x, y)$ cần phải bao gồm những điều kiện tương tác của tạp chất với đáy:

a). Đối với tạp chất nổi lên

$$K_C \frac{\partial C}{\partial n} - (\beta_2 + w_C) C + Q_2 = 0; \quad (6.6)$$

b). Đối với tạp chất lắng xuống

$$K_C \frac{\partial C}{\partial n} - (\beta_2 - w_C) C + Q_2 = 0; \quad (6.7)$$

c). Đối với tạp chất thụ động

$$K_C \frac{\partial C}{\partial n} - \beta_2 C + Q_2 = 0. \quad (6.8)$$

ở đây n – pháp tuyến với đáy; β_2 – tham số, xác định đặc điểm tương tác tạp chất ô nhiễm với đáy biển. Có rất nhiều nhân tố khác nhau ảnh hưởng đến sự tương tác này (thí dụ, thành phần bùn đáy, khả năng lọc và hấp phụ của chúng, độ gồ ghề thủy động lực của đáy, sự tương tác của tạp chất với sinh vật đáy...). Tham số β_2 được cho bằng hai giá trị tới hạn:

a). $\beta_2 = 0$ ứng với trường hợp tạp chất phản xạ toàn phần từ đáy biển;

b). $\beta_2 \rightarrow \infty$ ứng với trường hợp tạp chất bị hấp phụ hoàn toàn bởi đáy biển.

Toàn bộ sự đa dạng của các điều kiện trên các biên lõng và cứng của thủy vực có thể biểu diễn dưới dạng

$$a \left[K_C \frac{\partial C}{\partial n} - (\beta_3 + u_n) C + Q_3 \right] + b (C - C_3) + \chi \left[\left(1 - \frac{u_n}{|u_n|} \right) C + \left(1 + \frac{u_u}{|u_n|} K_C \frac{\partial C}{\partial n} \right) \right] = 0. \quad (6.9)$$

ở đây n - hướng của pháp tuyến trong tới đường bao vành bờ; u_n - thành phần tốc độ dòng chảy pháp tuyến với ranh giới bên; Q_3 - lượng tạp chất đã biết đi tới trong một đơn vị thời gian; $K_C \frac{\partial C}{\partial n}$ - thành phần pháp tuyến của thông lượng tạp chất rời qua đường bao bên.

Ta sẽ xét dạng cụ thể của các điều kiện biên (6.9) đối với nguồn tạp chất nằm tại bờ (điểm gom chất thải sinh hoạt hoặc công nghiệp) với giả thuyết $\beta_3 = 0$. Nếu biết lượng phát thải tạp chất trong một đơn vị thời gian, $a = 1$ và $b = 0$, khi đó tại đường bao lõng L''

$$K_C \frac{\partial C}{\partial n} - u_n C + Q_3 + \left(1 - \frac{u_n}{|u_n|} \right) C + \left(1 + \frac{u_u}{|u_n|} K_C \frac{\partial C}{\partial n} \right) = 0, \quad (6.10a)$$

tại đường bao cứng L'

$$K_C \frac{\partial C}{\partial u} + Q_3 = 0.$$

Nếu biết nồng độ tạp chất ở vùng nguồn, $a = 0$, $b = 1$, khi đó tại đường bao lõng L''

$$C - C_3 + \left(1 - \frac{u_n}{|u_n|} \right) C + \left(1 + \frac{u_u}{|u_n|} K_C \frac{\partial C}{\partial n} \right) = 0, \quad (6.10b)$$

tại đường bao cứng L'

$$C - C_3 = 0.$$

Về phương diện vật lý, các điều kiện biên (6.10a) có nghĩa rằng đường bao cứng (bờ) được cho dưới dạng tường thẳng đứng, tại đó hoặc tạp chất phản xạ toàn phần, hoặc nó tích tụ, tại đường bao lõng lưu lượng tạp chất được biết. Các điều kiện biên (6.10b) cho biết rằng tại đường bao cứng, tạp chất bị bờ hấp thụ hoàn toàn, còn tại đường bao lõng nồng độ tạp chất được biết. Việc đặt ra dạng cụ thể của các điều kiện biên tùy thuộc vào những tính chất vật lý của tạp chất ô nhiễm cũng như vào các đá trầm tích tạo nên bờ biển.

Đối với nguồn ô nhiễm nằm ở phần khơi thủy vực, người ta chấp nhận điều kiện đương nhiên nồng độ tạp chất giảm tới đến 0 ở khoảng cách đủ xa nguồn

$$\text{khi } x, y, z \rightarrow \infty \quad C = 0. \quad (6.10c)$$

Ta phát biểu các điều kiện đầu. Giả thiết rằng ở thời điểm ban đầu

a). Không có tạp chất

$$\text{khi } t = 0 \quad C(x, y, z, 0) = 0, \quad (6.11a)$$

b). Biết nền của các chất ô nhiễm

$$\text{khi } t = 0 \quad C(x, y, z, 0) = C_0. \quad (6.11b)$$

Giải bài toán biên (6.1) - (6.11) rất phức tạp. Những khó khăn rất lớn xuất hiện do phải biết cấu trúc ba chiều của các dòng chảy và những hệ số khuếch tán rối. Tốc độ dòng chảy trong thủy vực có thể có được hoặc theo số liệu quan trắc, hoặc theo kết quả tính toán thủy động lực học học. Hiện nay, dữ liệu thực nghiệm hiện có về cấu trúc dòng chảy trong biển và đại dương vẫn còn ít và rời rạc trong không gian và thời gian. Vì vậy, ta nên nhận thông tin về chúng trên cơ sở giải bài toán động lực với điều kiện biết trước trường gió và phân bố mật độ nước biển, có tính đến địa hình đáy và hình dạng thủy vực thực, tức phân tích chẩn đoán.

Cho đến nay, việc xác định các hệ số khuếch tán rối vẫn còn là bài toán khó. Tuy nhiên, các nghiên cứu của Ozmidov và Okubo đã cho phép xác định được hệ số khuếch tán rối ngang K_{CL} . Những thí nghiệm của Ozmidov và Okubo với sự khuếch tán của các chất nhuộm màu đã cho biết rằng đối với một dải rộng kích thước không gian của các xoáy (từ 100 m đến 100 km) thỏa mãn mỗi phụ thuộc $K_{CL}(l) \sim l^{4.1}$. Đối với những dải hẹp hơn thỏa mãn định luật “bốn phần ba”, $K_{CL}(l) \sim l^{4/3}$. Như đã biết, các kết luận này đã được rút ra đối với khoảng quán tính đối lưu của chuyển động rối đẳng hướng địa phương quy mô nhỏ.

Trong điều kiện nếu biết tất cả các thành phần tốc độ dòng chảy và các hệ số khuếch tán rối, thì nghiệm của bài toán biên (6.1) - (6.11) sẽ cho chúng ta bức tranh phân bố nồng độ tạp chất do hệ quả nó tương tác thủy động lực học với môi trường biển.

Sự lan truyền các tạp chất ô nhiễm trong biển dưới tác động của dòng chảy và khuếch tán rối còn phụ thuộc vào kiểu và kích thước của nguồn ô nhiễm.

Theo đặc điểm tác động của nguồn và quy mô lan truyền ô nhiễm, người ta chia ra hai kiểu quá trình:

1). Quá trình địa phương - với nguồn kích thước không lớn, thời gian tác động không lớn và lưu lượng không lớn. Có thể xem nguồn là nguồn tức thời, nguồn điểm, tạp chất thụ động và bảo thủ, còn các thành phần tốc độ dòng chảy không đổi;

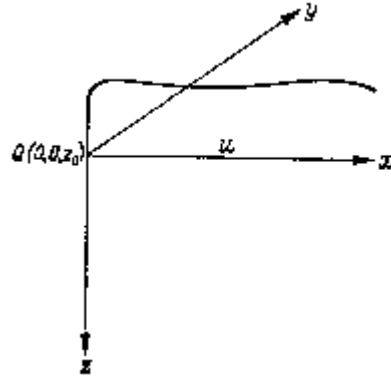
2). Quá trình quy mô vừa và lớn - với nguồn các chất ô nhiễm mạnh, tác động thường trực. Dòng chảy trong trường hợp này được xác định bằng trường gió và cấu trúc nhiệt muối của nước không đồng nhất, tính tới địa hình đáy và hình thái thủy vực biển.

Các bài toán liên quan tới những quá trình kiểu 1, thường có nghiệm giải tích. Các quá trình kiểu 2 phức tạp hơn, và các bài toán loại này không giải được bằng giải tích, phải áp dụng các phương pháp số.

5.4.2. Nghiệm giải tích bài toán ô nhiễm biển

Chúng ta sẽ xét bài toán về phân bố nồng độ tạp chất nổi lên từ nguồn điểm nằm ở một độ sâu xác định. Thí dụ về một nguồn như vậy có thể là trường hợp phát thải nước công nghiệp hoặc sinh hoạt ở sâu trong nước. Các quy mô không lớn cho phép xem dòng chảy không đổi ở mọi nơi (quá trình địa phương). Bài toán quy về xác định nồng độ tạp chất tại những khoảng cách khác nhau trong phương thẳng đứng kể từ nguồn.

Hình 1.1. Hệ tọa độ của bài toán về sự lan truyền tạp chất nổi lên từ nguồn điểm ở sâu trong nước



Đặt nguồn ô nhiễm công suất Q tại điểm có tọa độ $(0, 0, z^*)$; trục Ox hướng dọc theo dòng chảy u (hình 6.1). Nếu xem khuếch tán rối trên hướng dòng chảy nhỏ so với vận chuyển bình lưu, từ phương trình (6.1) ta có

$$u \frac{\partial C}{\partial x} - w_c \frac{\partial C}{\partial z} - K_c \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - K_{cy} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{C}{\tau_0} = Q \delta(x) \delta(y) \delta(z - z^*). \quad (6.12)$$

Bằng phép thế trực tiếp, có thể tin chắc rằng trong trường hợp nồng độ tạp chất giảm tới 0 khi đi ra xa nguồn

$$C = 0 \text{ khi } x, y \rightarrow \infty$$

phương trình (6.12) có nghiệm như sau:

$$C = \frac{\sqrt{u}}{2\sqrt{\pi K_{cy} x}} \exp\left(-\frac{u y^2}{4K_{cy} x} - \frac{x}{u \tau_0}\right) S(x, z), \quad (6.13)$$

trong đó $S(x, y)$ – ẩn số mới.

Thế (6.13) vào (6.12) và tích phân theo y từ $-\infty$ đến $+\infty$, sử dụng các điều kiện biên trên mặt (6.3) và ở đáy biển (6.6). Cuối cùng, ta được phương trình khuếch tán rối đối với ẩn số mới

$$u \frac{\partial S}{\partial x} - w_c \frac{\partial S}{\partial z} - K_c \frac{\partial^2 S}{\partial z^2} = Q \delta(x) \delta(z - z^*) \quad (6.14)$$

với các điều kiện biên:

$$\text{tại } z = 0 \quad K_c \frac{\partial S}{\partial z} + w_c S = 0,$$

$$\text{tại } z = H(x, y) \quad \frac{\partial S}{\partial n} = 0,$$

$$\text{tại } x, y \rightarrow \infty \quad S = 0. \quad (6.15)$$

Đối với các khoảng cách bé theo trục Ox kể từ nguồn, có thể cho rằng gradient thẳng đứng của nồng độ trên mặt biển bằng không. Khi đó, trong hệ tọa độ mới cùng nổi lên với tốc độ của tạp chất

$$\bar{z} = z + w_c \frac{x}{u},$$

từ (6.14), ta có phương trình đơn giản

$$u \frac{\partial S}{\partial x} - K_c \frac{\partial^2 S}{\partial \bar{z}^2} = Q \delta(x) \delta(\bar{z} - \bar{z}^*), \quad (6.16)$$

$$\bar{z}^* = z^* + w_C \frac{x}{u}$$

với các điều kiện biên:

$$K_C \frac{\partial S}{\partial z} = 0 \text{ tại } \bar{z} = w_C \frac{x}{u},$$

$$S = 0 \text{ tại } \bar{z} = \infty. \quad (6.17)$$

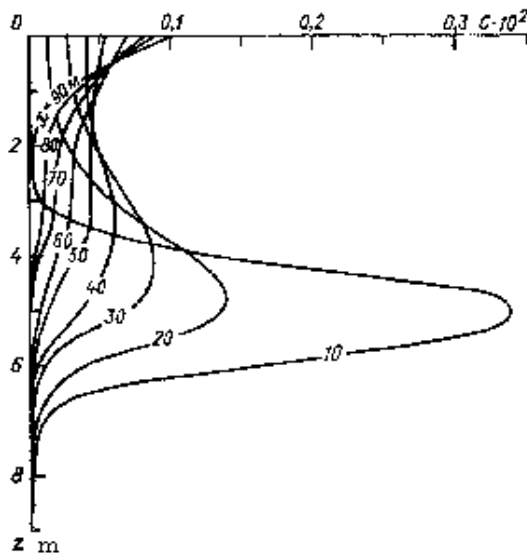
Nghiệm bài toán (8.16)-(8.17) khi chuyển sang hệ tọa độ cũ có dạng

$$C(x, z) = Q \sqrt{\frac{u}{4\pi K_C x}} \left[\exp \left(- \left(z + w_C \frac{x}{u} - z^* \right)^2 \frac{u}{4K_C x} \right) + \exp \left(- \left(z - w_C \frac{x}{u} + z^* \right)^2 \frac{u}{4K_C x} \right) \right]. \quad (6.18)$$

Hình (6.2) minh họa phân bố nồng độ tạp chất ô nhiễm theo phương thẳng đứng tại các khoảng cách khác nhau cách nguồn nằm ở độ sâu 5 m. Thấy rằng, vì tạp chất có tốc độ thẳng đứng, nên cực đại nồng độ nâng lên khi càng xa nguồn và, bắt đầu từ một khoảng cách nhất định, nó nằm ở lân cận mặt. ở càng xa nguồn, thì nồng độ tạp chất chỉ giảm rất nhanh vào lúc đầu.

Ta xét một bài toán khác. Tính nồng độ trung bình trên phương thẳng đứng của tạp chất lơ lửng (thụ động), lan truyền trong biển ở lân cận bờ. Dòng chảy trong biển xem là không đổi theo phương ngang và phân thành hai lớp theo phương thẳng đứng, tương ứng với tình huống nước dâng (ở lớp trên dòng chảy hướng vuông góc vào bờ, ở lớp dưới - hướng ra khơi). Vận chuyển bình lưu, tương ứng với dòng chảy dọc bờ, chúng ta sẽ cho là áp đảo so với khuếch tán rối cùng hướng. Các hệ số khuếch tán rối không đổi.

Bài toán này xuất hiện, thí dụ, khi đặt điểm đổ nước thải sinh hoạt thành phố ra vùng ven bờ. Tình huống xấu nhất trong trường hợp này là khi có dòng chảy (trong gió dâng) hướng vào thành phố, cộng với nguồn nằm ở lớp bên trên.



Hình 1.2. Phân bố nồng độ ô nhiễm theo hướng dòng

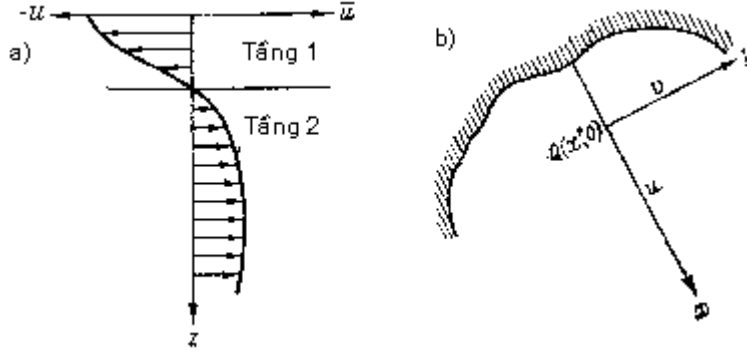
Các số trên các đường cong chỉ khoảng cách theo trục Ox.

Nguồn nằm tại độ sâu 5 m, $K_C = \text{const}$.

Hướng trục Oy dọc theo bờ, trục Ox - vuông góc với bờ, hướng ra khơi (hình 6.3 b); nguồn tạp chất đặt tại điểm có tọa độ $(x^*, 0)$. Lấy trung bình phương trình khuếch tán rồi riêng cho lớp trên và lớp dưới, với những giả định nêu trên, ta có phương trình cho lớp trên

$$u \frac{\partial C_1}{\partial x} + v \frac{\partial C_1}{\partial y} - K_{Cx} \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} - \frac{C_1}{\tau_o} = Q \delta(x - x^*) \delta(y). \quad (6.19)$$

ở đây C_1 - nồng độ trung bình của tạp chất trong lớp trên.



Hình 1.3. Với bài toán về sự lan truyền tạp chất thụ động trong biển hai lớp theo mức độ xa dần nguồn ô nhiễm

Vì ở bờ không tích tụ tạp chất và nước, nghiệm tại $x < 0$ đối với lớp trên có thể xác định như phản xạ gương của nghiệm đối với lớp dưới. Ta đưa ra hệ tọa độ mới $\bar{x} = x + \frac{u}{v}y$; $\bar{y} = y$. Khi đó, từ (6.19) ta có phương trình chuyển đổi

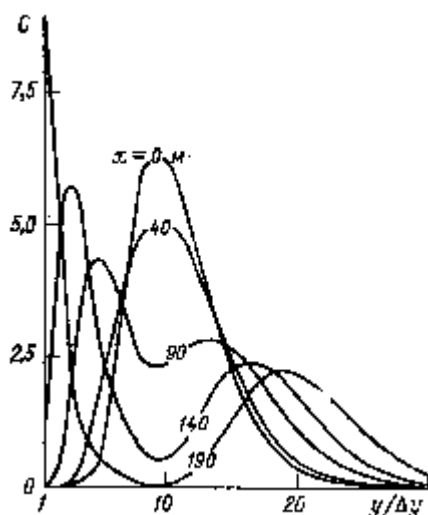
$$v \frac{\partial C_1}{\partial \bar{y}} - K_{Cx} \frac{\partial^2 C_1}{\partial \bar{x}^2} - \frac{C_1}{\tau_o} = Q \delta(\bar{x} - \bar{x}^*) \delta(\bar{y}) \quad (6.20)$$

và các điều kiện biên giảm nồng độ tạp chất tại vô cùng $\bar{x}, \bar{y} \rightarrow \infty$; nghiệm có dạng:

$$C_1 = Q \sqrt{\frac{v}{4\pi K_{Cx}y}} \exp \left(-\frac{v \left(x + \frac{u}{v}y - x^* \right)^2}{4K_{Cx}y} \right). \quad (6.21)$$

Lời giải đối với lớp dưới được xác định hoàn toàn tương tự. Nồng độ trung bình theo phương thẳng đứng tại điểm bất kỳ trong biển bằng nửa tổng của hai nghiệm:

$$C = \frac{1}{2}(C_1 + C_2) = \frac{Q}{4} \sqrt{\frac{v}{\pi K_{Cx}y}} \times \left[\exp \left(-\frac{v \left(x + \frac{u}{v}y - x^* \right)^2}{4K_{Cx}y} \right) + \exp \left(-\frac{v \left(x - \frac{u}{v}y + x^* \right)^2}{4K_{Cx}y} \right) \right] \quad (6.22)$$



Hình 1.4. Nồng độ trung bình tại các khoảng cách khác nhau kể từ bờ
Điểm đo chất thải được đưa ra khoảng cách 200 m, $K_C = \text{const}$

Với tư cách là thí dụ, trên hình 6.4 biểu diễn phân bố nồng độ các chất ô nhiễm tại các khoảng cách khác nhau kể từ nguồn và từ bờ. Nồng độ lớn nhất dọc theo bờ được thấy tại khoảng cách cách nguồn bằng $10\Delta y$. Theo mức độ xa dần ra khơi, tổng nồng độ giảm, nhưng nhận thấy hai cực đại nồng độ gây nên bởi các dòng thuận và ngược. Ở lân cận nguồn, đặc điểm của đường cong không thay đổi, còn nồng độ thì đương nhiên là tăng lên.

Những nghiệm đã xét nhận được trong điều kiện các hệ số khuếch tán rối không đổi. Được biết, chúng phụ thuộc mạnh vào các đặc trưng của dòng chảy rối trong biển, quy mô các xoáy, khoảng cách từ nguồn... Đương nhiên, ngoài các nhân tố đã liệt kê ở trên (công suất và kiểu nguồn, các tính chất của tạp chất, khoảng cách từ nguồn), phân bố nồng độ tạp chất sẽ phụ thuộc vào dạng phụ thuộc hàm của các hệ số khuếch tán rối vào khoảng cách tới nguồn (hoặc vào thời gian). Thí dụ, đối với trường hợp khuếch tán rối hai chiều tạp chất thụ động bảo thủ từ nguồn điểm liên tục, khi chấp nhận định luật “bốn phần ba”, đúng cho trường hợp rối đẳng hướng địa phương, phương trình cơ bản được viết thành

$$u \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial C}{\partial y} n_1 \varepsilon^{1/3} x^{4/3} \right) = Q \delta(x - x^*) \delta(y - y^*), \quad (6.23)$$

trong đó ε – tốc độ tản mát năng lượng rối, n_1 – hệ số không thứ nguyên, bằng 0,1. Nghiệm của phương trình này với giả thiết rằng nồng độ tạp chất khi $x, y \rightarrow \infty$ giảm đến 0, có dạng sau:

$$C(x, y) = \frac{4Q}{6u\sqrt{\pi} \left(\frac{4n_1\varepsilon^{1/3}x^{4/3}}{9} \frac{x}{u} \right)^{3/2}} \exp \left(- \frac{y^{2/3}}{\frac{4n_1\varepsilon^{4/3}x^{4/3}}{9} \frac{x}{u}} \right). \quad (6.24)$$

Sự khác biệt đáng kể của biểu thức (6.24) so với các nghiệm của phương trình khuếch tán rối với hệ số không đổi, thí dụ so với (6.21), đó là nồng độ tạp chất giảm chậm hơn khi xa dần khỏi nguồn. Chỉ số của hàm mũ tỷ lệ với $y^{-2/3}$, còn theo (6.21) nó tỷ lệ với y^{-2} .

Anh hưởng đồng thời của các quá trình khuếch tán rối phương thẳng đứng và phương ngang tới biến đổi nồng độ tạp chất từ nguồn điểm tức thời đặt tại gốc tọa độ trong dòng biển di chuyển với tốc độ không đổi v , sẽ được mô tả tuần tự bằng các biểu thức:

a). Khi $K_C = 0$, $K_{CL} \sim \varepsilon^{1/3} t^{4/3}$

$$C(x, y, t) = \frac{Q \delta(z - z^*)}{\varepsilon t^3} f_0 \left[\frac{(x - vt)^2 + y^2}{\varepsilon t^3} \right]; \quad (6.25)$$

b). Khi $K_C = \text{const}$, $K_{CL} \sim \varepsilon^{1/3} t^{4/3}$

$$C(x, y, z, t) = \frac{Q}{\varepsilon t^3} f_0 \left[\frac{(x - vt)^2 + y^2}{\varepsilon t^3} \right] \frac{1}{\sqrt{\pi K_C t}} \exp \left(-\frac{z^2}{4 K_C t} \right); \quad (6.26)$$

c). Khi $K_C = \chi u_* z$, $K_{CL} \sim \varepsilon^{1/3} t^{4/3}$ (trong đó u_* – tốc độ động lực, χ – hằng số Karman)

$$C(x, y, z, t) = \frac{Q}{\varepsilon t^3} f_0 \left[\frac{(x - vt)^2 + y^2}{\varepsilon t^3} \right] \frac{1}{\chi u_* t} \exp \left(-\frac{z}{\chi u_* t} \right); \quad (6.27)$$

d). Khi $K_C \sim \varepsilon^{1/3} t^{4/3}$, $K_{CL} = 0$

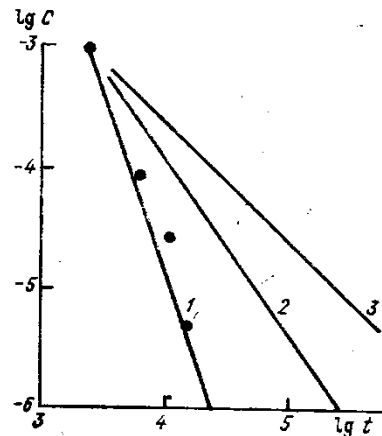
$$C(x, y, z, t) = \frac{Q}{(\varepsilon t^3)^{3/2}} f_1 \left[\frac{(x - vt)^2 + y^2}{\varepsilon t^3} \right], \quad (6.28)$$

ở đây f_0 và f_1 – một số hàm vụn vặt.

Các trường hợp vừa xét tương ứng với rất nhiều tình huống tương tác của các quá trình khuếch tán rối thẳng đứng và phương ngang. Hai chế độ đầu có thể xảy ra trong điều kiện nước biển phân tầng thẳng đứng mạnh, khi đó trao đổi thẳng đứng hoặc bị trấn áp hoàn toàn ($K_C = 0$), hoặc yếu và chỉ phát triển trong các lớp tựa đồng nhất ($K_C = \text{const}$). Trường hợp thứ ba ($K_C = \chi u_* t$) quan sát được trong điều kiện rối “gần tường” và nước phân tầng phiếm định. Trường hợp thứ tư ($K_C \sim \varepsilon^{1/3} t^{4/3}$) – trong điều kiện rối phát triển.

Hình 1.5. Biến đổi nồng độ ở tâm vết ô nhiễm

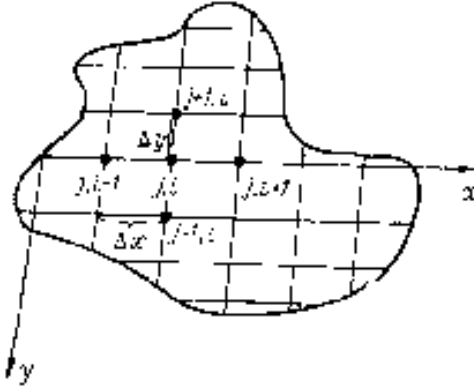
1 - các hệ số khuếch tán rối biến đổi theo định luật “bốn phần ba”, 2, 3 - các hệ số khuếch tán rối không đổi (2 - trường hợp ba chiều, 3 - hai chiều); dấu chấm chỉ nồng độ chất phát quang, theo số liệu của Okubo, Ozmidov (1986).



Như các nghiệm (6.25 - 6.28) cho thấy, tốc độ giảm nồng độ tạp chất ở tâm vết nhiễm bản tỷ lệ tuần tự với t^{-3} , $t^{-3,5}$, t^{-4} , $t^{-4,5}$ và nhanh hơn nhiều so với trường hợp rời giải với $K_C = \text{const}$ (tỷ lệ với t^{-1}). Trên hình 8.5 cho thấy biến đổi theo thời gian của nồng độ tại tâm vết ô nhiễm, tính với $K_C = \text{const}$ và $K_C \sim \varepsilon^{1/3} t^{4/3}$. Các số liệu quan trắc thực nghiệm của Okubo về khuếch tán chất rodamin cũng được đưa lên hình này bằng các dấu chấm. Thấy rằng, số liệu quan trắc phù hợp với trường hợp hệ số khuếch tán rối biến đổi.

5.4.3. Các phương pháp số giải phương trình khuếch tán rối tạp chất trong biển nông

Khi nghiên cứu các quá trình hình thành trường tạp chất từ các nguồn mạnh tác động lâu dài, tính đến trường dòng chảy phức tạp, ta không thể có các lời giải giải tích của phương trình cơ bản (8.1), vì vậy nó phải giải bằng những phương pháp số (sai phân hữu hạn, tích phân và phổ), sử dụng các thuật toán hiệu quả có độ ổn định và hội tụ nhanh.



Hình 1.6. Hệ tọa độ và miền lưới tính trong bài toán về sự lan truyền ô nhiễm ở biển nông

Ta sẽ xét nghiệm bài toán bằng phương pháp lưới áp dụng cho biển nông. Được biết, trong biển nông, do các quá trình xáo trộn thẳng đứng, cấu trúc nhiệt muối khá đồng nhất, vì vậy có thể giả thiết gradient $\partial C / \partial z = 0$. Điều này cho phép trong phương trình khuếch tán rối cơ bản (8.1) có thể bỏ thành phần bình lưu thẳng đứng và trao đổi rối thẳng đứng của tạp chất, tức là

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = K_{Cx} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + K_{Cy} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - pC. \quad (6.29)$$

Để xây dựng tương tự sai phân hữu hạn của phương trình (8.29), cần xây miền lưới với các bước không gian Δx , Δy và xấp xỉ một cách chính xác nhất đường bờ thực (hình 6.6). Nếu thay thế đạo hàm riêng bằng các biểu thức sai phân hữu hạn với bước thời gian Δt , biểu diễn các đạo hàm bậc hai bằng các sai phân trung tâm, đạo hàm bậc một bằng các sai phân một cạnh ngược dòng, khi đó xấp xỉ sai phân hữu hạn của phương trình (6.29) dạng hiện được viết như sau:

$$\frac{\partial C}{\partial t} \approx \frac{\Delta C_{i,j}}{\Delta t} = \frac{C_{i,j}^{t+\Delta t} - C_{i,j}^t}{\Delta t}, \quad (6.30)$$

$$\begin{aligned} C_{i,j}^{t+\Delta t} = & C_{i,j}^t + v_{CL} \Delta t (\Delta_{xx} + \Delta_{yy}) C_{i,j}^t - \\ & - \frac{u_{i,j}^t \Delta t}{2} \left[(1 - \varepsilon_u) \Delta_x^+ C_{i,j}^t + (1 + \varepsilon_u) \Delta_x^- C_{i,j}^t \right] - \\ & - \frac{v_{i,j}^t \Delta t}{2} \left[(1 - \varepsilon_v) \Delta_y^+ C_{i,j}^t + (1 + \varepsilon_v) \Delta_y^- C_{i,j}^t \right] - p C_{i,j}^t \Delta t, \end{aligned} \quad (6.31)$$

trong đó $u_{i,j}$, $v_{i,j}$, $C_{i,j}$ – các thành phần tốc độ dòng chảy và nồng độ tạp chất tại nút lưới với chỉ số i, j ; ε_u , ε_v – dấu của các thành phần u và v tương ứng; Δ_{xx} , Δ_{yy} – xấp xỉ của các đạo hàm bậc hai; Δ_x^+ , Δ_y^+ – sai phân ngược tuần tự theo x và y ; Δ_x^- , Δ_y^- – sai phân xuôi tuần tự theo x và y ; v_{CL} – hệ số nhớt tính toán;

$$\Delta_{xx} C_{i,j} = \frac{C_{i+1,j} - 2C_{i,j} + C_{i-1,j}}{\Delta x^2},$$

$$\Delta_{yy}C_{i,j} = \frac{C_{i,j+1} - 2C_{i,j} + C_{i,j-1}}{\Delta y^2},$$

$$\Delta_x^+ C_{i,j} = \frac{C_{i+1,j} - C_{i,j}}{\Delta x},$$

$$\Delta_y^+ C_{i,j} = \frac{C_{i,j+1} - C_{i,j}}{\Delta y}$$

$$\Delta_x^- C_{i,j} = \frac{C_{i,j} - C_{i-1,j}}{\Delta x}$$

$$\Delta_y^- C_{i,j} = \frac{C_{i,j} - C_{i,j-1}}{\Delta y}.$$

Công thức 6.31 đảm bảo độ chính xác bậc một theo thời gian và bậc hai - theo không gian.

Tuy nhiên, công thức 6.31 không phải là sơ đồ ổn định tuyệt đối. Với nó cần thỏa mãn chỉ tiêu ổn định Curant-Levi (với trường hợp $\Delta x = \Delta y$):

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{4\nu_{CL} + (|u| + |v|)\Delta x}. \quad (6.32)$$

Chọn các bước không gian Δx , Δy như thế nào là do kích thước, hình dạng biển và quy mô của các quá trình thủy động lực diễn ra trong nó. Còn bước thời gian Δt được chọn theo điều kiện hội tụ của sơ đồ sai phân (6.32).

Mô hình số đã xây dựng cho phép xét sự hình thành trường chất ô nhiễm bất kỳ trong vùng biển, sự biến thiên theo thời gian và không gian của nó bởi với rất nhiều loại nguồn ô nhiễm. Mô hình này cho phép theo dõi tạp chất đi vào biển nông và tìm hiểu những tình huống bất lợi tùy theo kiểu gió trên biển và hình thái thủy vực biển.

Với tư cách thí dụ, trong bảng 6.1 dẫn kết quả thực hiện thuật toán (6.31) trên máy tính đối với nhiều kiểu nguồn ô nhiễm phân bố ở vùng nước nông phía bắc biển Caspi. Tính toán thực hiện cho trường hợp gió tây bắc thống trị, tốc độ 15-20 m/s. Bước tính không gian chọn bằng 20 km, vì bước tính này nắm bắt được những xoáy dòng chảy ngang chính của vùng. Với bước không gian Δx đã chọn, theo điều kiện (6.32), bước thời gian phải không lớn hơn 30 phút. Hệ số khuếch tán rối phương ngang lấy bằng $K_{Cx} = K_{Cy} = 1,5 \cdot 10^2 \text{ m}^2/\text{s}$. Các nguồn ô nhiễm phân bố ở cửa sông Vonga và sông Ural. Đã nhận được các trường nồng độ tạp chất ứng với nhiều chế độ nguồn khác nhau (tác động tức thời, liên tục, nguồn điểm, nguồn khối v.v...). Thấy rằng, sự vận chuyển chất ô nhiễm trong biển diễn ra chủ yếu do tác động của các nhân tố bình lưu (dòng chảy). Tuy nhiên, nếu nguồn điểm phân bố trong vùng cấu trúc xoáy của trường dòng chảy, thì các tỷ phần đóng góp của các quá trình bình lưu và khuếch tán trong lan truyền ô nhiễm có cùng bậc.

Thời gian gần đây, sơ đồ hiện xấp xỉ phương trình kiểu (6.29) được giải số bằng phương pháp tách nhánh hiệu quả. Tại mỗi bước thời gian, hai bài toán độc lập được xét:

a). Biến đổi nồng độ tạp chất do khuếch tán rối cho thời gian $t + \frac{\Delta t}{2}$;

b). Biến đổi nồng độ tạp chất do bình lưu và thích ứng qua lại cho thời gian $t + \Delta t$

Còn tương tự sai phân hữu hạn của phương trình tách nhánh (6.29) là tổng của hai phương trình sai phân hữu hạn:

$$C_{ij}^{t+\frac{\Delta t}{2}} = C_{ij}^t + v_{CL} \Delta t (\Delta_{xx} + \Delta_{yy}) C_{ij}^t, \quad (6.33)$$

$$C_{ij}^{t+\Delta t} = C_{ij}^{t+\frac{\Delta t}{2}} - \frac{u_{ij} \Delta t}{2} \left[(1 - \varepsilon_u) \Delta_x^+ C_{ij}^{t+\frac{\Delta t}{2}} + (1 + \varepsilon_u) \Delta_x^- C_{ij}^{t+\frac{\Delta t}{2}} \right] -$$

$$\frac{v_{ij} \Delta t}{2} \left[(1 - \varepsilon_v) \Delta_y^+ C_{ij}^{t+\frac{\Delta t}{2}} + (1 + \varepsilon_v) \Delta_y^- C_{ij}^{t+\frac{\Delta t}{2}} \right] - p C_{ij}^{t+\frac{\Delta t}{2}}. \quad (6.34)$$

Bảng 1.1. Ảnh hưởng của kiểu nguồn tới nghiệm bài toán lan truyền tạp chất ở biển nông (Shkudova, 1975)

Nguồn	Đặc trưng của tạp chất ô nhiễm	Đặc trưng của các điều kiện biên	Kết quả giải
Tuyến tính, tác động ổn định, phân bố ở trên bờ (các chất ô nhiễm được mang ra biển cùng với nước các con sông)	Nước thải. Cần tính đến hoạt tính động học của tạp chất (w_C) và những tính chất không bảo thủ (τ_0)	Tại thời điểm đầu biển không có các chất ô nhiễm $t = t_0$ $C(x_n, y_n, t_0) = 0$. Bắt đầu từ thời điểm t_1 sông Vonga và Ural mang tạp chất sinh hoạt và công nghiệp. Nồng độ ở nguồn được biết. Các điều kiện biên ở biên lòng (trong châu thổ các sông) $C(x_1, y_1, t)_{L1} = C(x_2, y_2, t)_{L2} = \dots = C$. Biên lòng. Thuật giải số có tính tới w_C và τ_0 của tạp chất	Với gió tây bắc, lan truyền nước thải chủ yếu do bình lưu của dòng chảy, các đường đẳng nồng độ 0,1 % duỗi dài theo hướng đông. Sau một ngày tạp chất mang đi xa 70 km. Vai trò bình lưu trong lan truyền tạp chất rất lớn. Nó bằng lớn hơn khuếch tán rồi 40-50 lần ở thời kỳ đầu. Với thời gian, chênh lệch này giảm xuống còn 3-5 lần
Tuyến tính, tác động nhất thời, nằm trên bờ (phát thải nước công nghiệp một lần)	Nước nguồn gốc công nghiệp. Cần tính đến tốc độ trọng lực riêng có w_C và chu kỳ phân hủy t_0	Tại thời điểm đầu biển không ô nhiễm. Nhưng ở biên lòng, lân cận bờ đã đổ nước thải công nghiệp. Các điều kiện biên ở biên lòng tại $t = t_0$ $C(x_1, y_1, t_0) = C(x_2, y_2, t_0) = \dots = C(x_n, y_n, t_0)$; tại $t > t_0$ $C(x_1, y_1, t) = C(x_2, y_2, t) = \dots = C(x_n, y_n, t) = 0$. Thực hiện thuật giải số có tính đến w_C và τ_0 của các chất ô nhiễm.	Tạp chất với nồng độ 0,1 % trong 4 giờ sau đổ thải đã lan đi 25 km. Sau 6-9 giờ chỉ còn các vết tạp chất. Nồng độ cực đại quan sát ở gần nguồn ngay sau phát thải, sau đó giảm và khoảng sau hai ngày ở vùng nguồn còn thấy rõ các vết. Tại khoảng cách 20 km cách nguồn các vết tạp chất biểu hiện sau 3-6 giờ, còn cực đại nồng độ - sau 13 giờ. Sau một ngày tại vùng này không còn tạp chất.
Nguồn điểm tác động nhất thời, nằm trong biển (phát thải dầu do sự cố)	Dầu; về tính chất gần giống các tạp chất trung hòa động lực. Cần tính đến các tính chất không bảo thủ (chu kỳ phân hủy) cũng như phát tán vết dầu	Tại thời điểm đầu biển không có các chất ô nhiễm. Tại $t = t_0$ $C(x_n, y_n, t_0) = 0$. ở một điểm nào đó trên biển xảy ra phát thải dầu sự cố liên tục thành dòng di chuyển $jC(x_n, y_n, t) = M(t)$ tại $t > t_0$. Khi xa dần khỏi nguồn	Phát tán vết dầu do các lực tĩnh học diễn ra với tốc độ 2,3 cm/s; sau một ngày dầu lan 2 km. Sự trôi văng dầu do tác động của gió tây bắc 15-20 cm/s diễn ra với tốc độ 22 cm/s; sau một ngày văng dầu trôi 20 km về hướng đông. Do các dòng chảy vết dầu lan về phía đông với tốc độ

Nguồn	Đặc trưng của tạp chất ô nhiễm	Đặc trưng của các điều kiện biên	Kết quả giải
	do các lực tĩnh học và sự trôi văng dầu (sau phát tán) dưới tác động của gió	nồng độ dầu giảm tới không $C(x_n, y_n \rightarrow \infty) = 0$. Thực hiện thuật giải số tính đến các tính chất trung hòa động lực của dầu và chu kỳ phân hủy τ_0	23 cm/s. Trong hướng vuông góc diễn ra sự tản mát dầu do khuếch tán. Tốc độ của quá trình này không lớn.
Nguồn điểm tác động ổn định, phân bố lân cận bờ (phenol gia nhập từ nguồn điểm trong châu thổ sông Vonga)	Phenol; gần với các tạp chất trung hòa động lực. Cần tính đến thuộc tính không bảo thủ của phenol (t_0)	Tại thời điểm đầu biển không có phenol. Tại $t = t_0$ $C(x_n, y_n, t_0) = 0$. Bắt đầu từ thời điểm t_1 phenol được mang vào biển qua nguồn điểm, nằm trong châu thổ sông Vonga. Nồng độ ở nguồn được biết. Các điều kiện biên ở biên lỏng tại $t > t_0$ $C(x_1, y_1, t) = C_{\text{phenol}}$. Thực hiện thuật giải số có tính đến các đặc tính trung hòa động lực của phenol và chu kỳ phân hủy của nó.	Sau 4 ngày tạp chất phenol lan tới khoảng cách 50 km kể từ nguồn với tốc độ 15 cm/s. Trong vùng này nồng độ của nó giảm đi hai bậc so với nồng độ ở nguồn.

5.4.4. Mô hình hóa sự vận chuyển các chất ô nhiễm biển

Nghiên cứu quá trình hình thành trường các chất ô nhiễm trong đại dương là một bài toán phức tạp, vì phải xác định được các quá trình lan truyền và phát tán tạp chất thuộc những quá trình quy mô vừa và quy mô lớn. Các trường dòng chảy trong biển sâu gây nên không chỉ bởi các điều kiện gió, mà còn bởi các quá trình nhiệt muối dẫn đến cấu trúc nước không đồng nhất, tính đến những đặc điểm của đại dương và biển và các điều kiện tại các biên của chúng. Trong đại dương và biển sâu, các quá trình bình lưu phương thẳng đứng và khuếch tán rối thẳng đứng có vai trò quan trọng. Với những điều vừa nêu, phương trình vận chuyển cơ bản (6.1) không thể đơn giản hóa và phải giải bài biên toán đầy đủ (6.1) - (6.11).

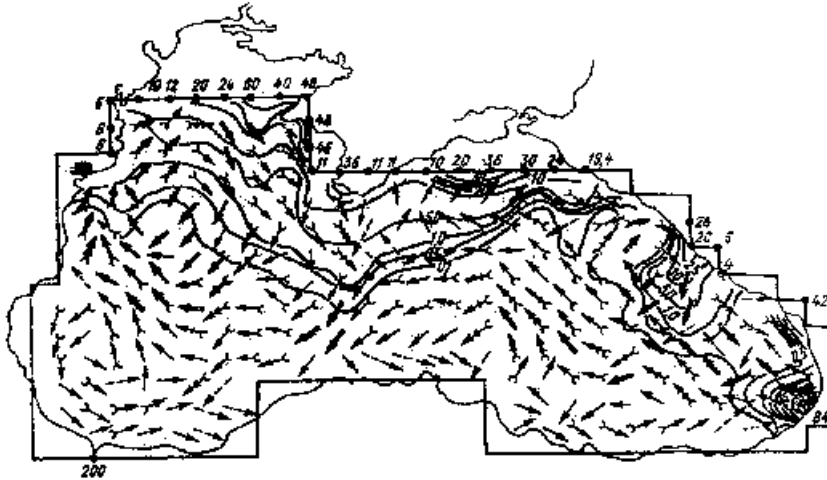
Chỉ tiêu Curant - Levi (6.32), hạn chế bước tính theo thời gian trong các sơ đồ hiện, thường tạo nên khối lượng tính toán vô cùng lớn trong khi hiện thực hóa những sơ đồ đó. Vì vậy, các sơ đồ sai phân hữu hạn ẩn, có độ ổn định cao và thoát khỏi những hạn chế, đang ngày càng được dùng nhiều hơn. Để làm thí dụ, chúng tôi sẽ dẫn ra một sơ đồ ẩn giải phương trình bình lưu - khuếch tán ba chiều, sử dụng phương pháp sai phân luân hướng hiệu nghiệm. Lưu ý rằng phương pháp này là phương pháp hai bước và được viết dưới dạng

$$\begin{aligned} & \frac{2}{\Delta t} (\tilde{c}_{i,j} - C_{i,j}^t) + (A_1 \Delta_x^0 - \nu_{CL} \Delta_{xx}) C_{i,j}^t + \\ & + (B_1 \Delta_y^0 - \nu_{CL} \Delta_{yy}) C_{i,j}^t + (D_1 \Delta_z^0 - \nu_C \Delta_{zz}) C_{i,j}^t = 0 \end{aligned} \quad (6.35)$$

$$\begin{aligned} & \frac{2}{\Delta t} (C_{i,j}^{t+1} - \tilde{c}_{i,j}) + (A_2 \Delta_x^0 - \nu_{CL} \Delta_{xx}) C_{i,j}^{t+1} + \\ & (B_2 \Delta_y^0 - \nu_{CL} \Delta_{yy}) C_{i,j}^{t+1} + (D_2 \Delta_z^0 - \nu_C \Delta_{zz}) C_{i,j}^{t+1} = -p C_{i,j}^{t+1} \end{aligned} \quad (6.36)$$

ở đây $\Delta_x^0, \Delta_y^0, \Delta_z^0$ - các sai phân trung tâm lần lượt theo x, y và z ; $A_1, A_2, B_1, B_2, D_1, D_2$ - giá trị xấp xỉ của các thành phần dòng chảy u, v và w ; $\tilde{c}_{i,j}$ - hệ số dự báo hiệu chỉnh. Trị số của hệ số dự báo hiệu chỉnh có thể xem như giá trị xấp xỉ của nghiệm chính xác tại thời điểm $t + \frac{\Delta t}{2}$, nếu A_1, A_2, B_1, B_2, D_1 và D_2 là những giá trị xấp xỉ của u, v và w tại các thời điểm tương ứng:

$$\begin{aligned} \Delta_x^0 C_{i,j} &= \frac{C_{i+1,j} - C_{i-1,j}}{2\Delta x}, \\ \Delta_y^0 C_{i,j} &= \frac{C_{i,j+1} - C_{i,j-1}}{2\Delta y}, \\ \Delta_z^0 C_{i,j} &= \frac{1}{2\Delta z} (C_{i,j,k+1} - C_{i,j,k-1}). \end{aligned}$$



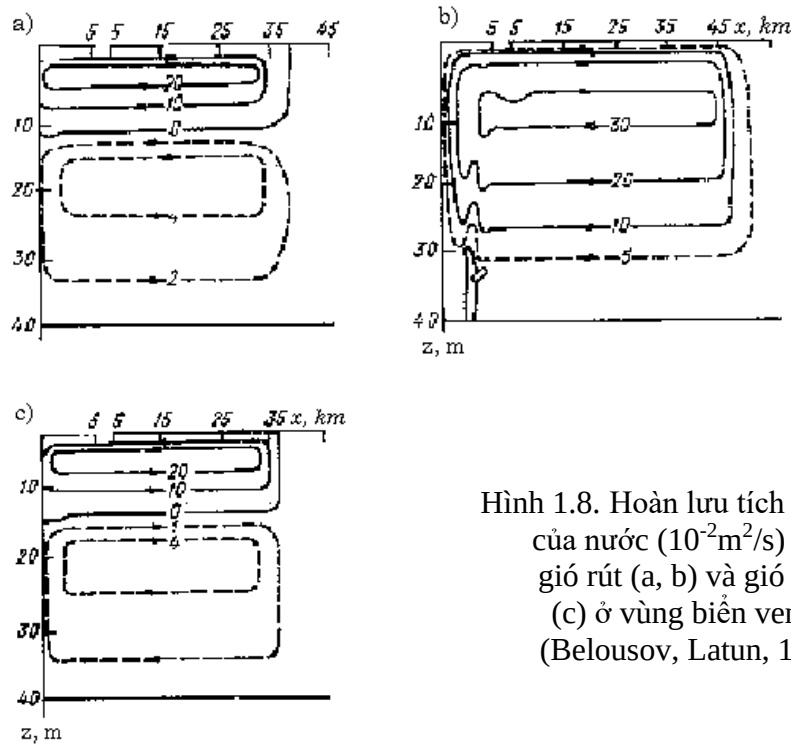
Hình 1.7. Lan truyền tạp chất thụ động từ các nguồn phát thải nằm trên bờ và bức tranh dòng chảy mùa xuân tại Hắc Hải ở độ sâu 10 m

Sơ đồ sai phân hữu hạn ẩn (6.35) - (6.36) có độ chính xác bậc hai theo thời gian và không gian.

Với tư cách làm thí dụ về giải số bài toán ba chiều, trên hình 6.7 dẫn phân bố nồng độ ô nhiễm ở Hắc Hải cho điều kiện trung bình mùa xuân, khi trên vùng biển thống trị xoáy nghịch, còn trong biển hoàn lưu nước tầng mặt có các xoáy nước. Các nguồn ô nhiễm phân bố ở dải ven bờ trong lớp trên với nồng độ biểu diễn bằng đơn vị quy ước, dòng nước thải tạp chất từ eo biển Bospho được cho tại độ sâu 50 m. Như đã thấy trên hình 6.7, tạp chất lan truyền đến những khoảng cách khá xa và dần dần tạo nên phong ô nhiễm biển. Do bình lưu và khuếch tán nước biển tạp chất đã phát tán ra một vùng nước của biển rộng tới 150-300 km. Tốc độ vận chuyển và phân tán tạp chất bằng khoảng 15 - 20 cm/s.

5.4.5. Ảnh hưởng dòng chảy, khuếch tán rối và điều kiện biên tới kết quả tính

Trong các mục trước đã nói về ảnh hưởng của các quá trình động lực (hoàn lưu nước và khuếch tán rối) cũng như các kiểu nguồn tới sự hình thành trường nồng độ các chất ô nhiễm. ở đây, chúng ta sẽ xét chi tiết về tác động của các nhân tố trên tới sự lan truyền các chất ô nhiễm ở vùng biển ven bờ. Như đã thấy, đặc điểm ô nhiễm vùng ven bờ và sự gia nhập các chất ô nhiễm vào vùng biển khơi được quy định bởi những quá trình động lực diễn ra trong một dải nước tương đối hẹp ven bờ. Cấu trúc của các dòng chảy ven bờ khá phức tạp. Nó có biểu hiện đặc điểm dâng rút tùy thuộc vào hoạt động gió, và phụ thuộc nhiều vào các đặc trưng hình thái (độ cong đường bờ, đột biến độ sâu đáy biển). Những nhân tố này làm xuất hiện ở vùng ven bờ những vòng xoáy nước địa phương. Thí dụ, như trên hình 8.8 cho thấy, trong gió rút và gió dâng hình thành hoàn lưu ngang hướng gồm hai vòng xoáy ngược chiều nhau. Trong gió rút, ở lớp 4 mét bên trên dòng chảy hướng theo gió, ở sâu hơn dòng chảy hướng vào bờ, còn từ độ sâu 18-20 m lại có hướng ra khỏi bờ (xem hình 6.8 a). Trong gió dâng, bức tranh dòng chảy sẽ ngược lại (xem hình 6.8 b).



Hình 1.8. Hoàn lưu tích phân của nước ($10^{-2} \text{m}^2/\text{s}$) trong gió rút (a, b) và gió dâng (c) ở vùng biển ven bờ (Belousov, Latun, 1975)

Đương nhiên, bức tranh phân bố nồng độ các chất ô nhiễm cũng thay đổi đáng kể. Nếu hướng trục Oy dọc theo bờ, trục Ox vuông góc với nó, trục Oz thẳng đứng xuống dưới, giả sử tất cả các đặc trưng của các quá trình không phụ thuộc vào tọa độ dọc bờ y, phương trình khuếch tán tập chất cơ bản (6.1) nếu tính đến các tính chất bảo thủ và thụ động động lực của tập chất sẽ được viết lại như sau:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + w \frac{\partial C}{\partial z} = K_C \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + K_{Cx} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}. \quad (6.37)$$

Lưu ý rằng, khác với bài toán tương tự đã xét ở mục 6.2, ở đây, ta phân tích thêm về cấu trúc thẳng đứng của hoàn lưu nước và khuếch tán rối. Ta sẽ tìm nghiệm số trị của phương trình (6.37) với các điều kiện biên (6.5), (6.8) bằng phương pháp tách nhánh. Trên mỗi bước thời gian Δt ta sẽ xét hai bài toán vật lý độc lập:

a). Biến đổi trường nồng độ tập chất do vận chuyển bình lưu và khuếch tán rối dọc theo trục Ox cho thời gian $t + \frac{\Delta t}{2}$;

b). Ảnh hưởng của các quá trình bình lưu trong phương thẳng đứng và khuếch tán rối thẳng đứng tới sự biến đổi nồng độ tập chất cho thời gian $t + \Delta t$.

Tương tự sai phân hữu hạn của phương trình tách nhánh (6.37) bằng tổng của hai phương trình sai phân hữu hạn

$$C_{i,j}^{t+\frac{\Delta t}{2}} = C_{i,j}^t + v_{CL} \Delta t \Delta_{xx} C_{i,j}^t - \frac{u_{i,j} \Delta t}{2} \left[(1 - \varepsilon_u) \Delta_x^+ C_{i,j}^t + (1 + \varepsilon_u) \Delta_x^- C_{i,j}^t \right], \quad (6.38)$$

$$C_{i,j}^{t+\Delta t} = C_{i,j}^{t+\frac{\Delta t}{2}} + v_C \Delta t \Delta_{zz} C_{i,j}^{t+\frac{\Delta t}{2}} - \frac{w_{i,j} \Delta t}{2} \left[(1 - \varepsilon_w) \Delta_z^+ C_{i,j}^{t+\frac{\Delta t}{2}} + (1 + \varepsilon_w) \Delta_z^- C_{i,j}^{t+\frac{\Delta t}{2}} \right], \quad (6.39)$$

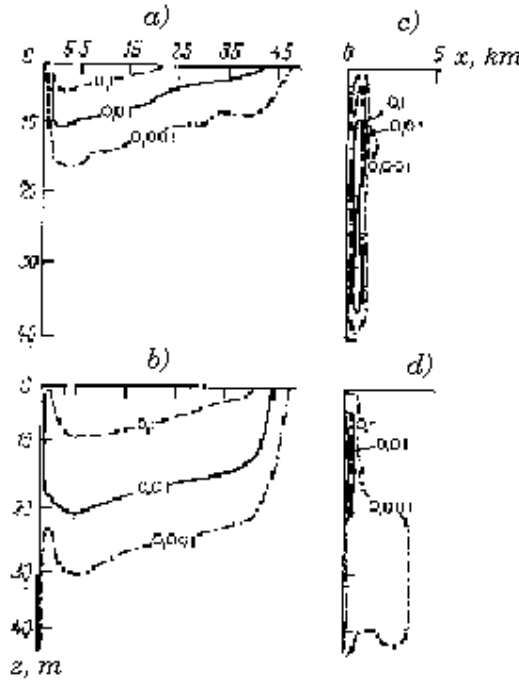
Trong đó:

$$\Delta_{zz} C_{i,j} = \frac{C_{i,j,k+1} - 2C_{i,j,k} + C_{i,j,k-1}}{\Delta z^2};$$

$$\Delta_z^+ C_{i,j} = \frac{C_{i,j,k+1} - C_{i,j,k}}{\Delta z};$$

$$\Delta_z^- C_{i,j} = \frac{C_{i,j,k} - C_{i,j,k-1}}{\Delta z}.$$

Chúng ta xem xét những kết quả chính thực hiện thuật giải số (6.38) và (6.39) đối với các điều kiện gió khác nhau trên biển, và do đó, đối với các chế độ hoàn lưu nước ven bờ khác nhau, cũng như vị trí phân bố khác nhau của nguồn ô nhiễm.



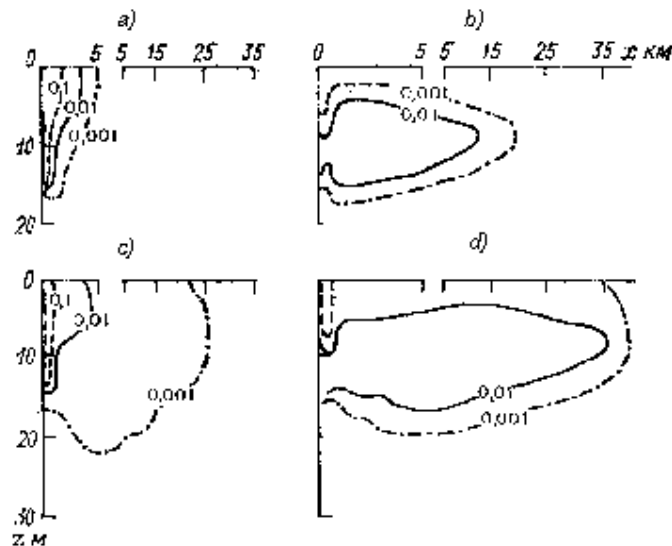
Hình 1.9. Sự biến đổi nồng độ các chất ô nhiễm theo thời gian trong gió rút, trường hợp các nguồn tầng mặt (a, b) và tầng sâu (c, d). (Belousov, Latun, 1975)

Trong *gió rút*, cấu trúc hoàn lưu nước tương ứng với bức tranh trên hình 6.8 a. Khi đổ thải ô nhiễm vào lớp mặt, nó lan truyền nhanh tới những khoảng cách lớn xa khỏi bờ và sau 12 giờ (hình 6.9) gặp thấy tại khoảng cách 35 km cách bờ và tại độ sâu 16 m. Với thời gian,

diện tích vùng ô nhiễm tăng lên. Có một số đặc điểm thú vị trong sự phân bố tạp chất theo phương thẳng đứng. ở lớp trên (đến 12 m), các đường đẳng trị nồng độ dâng lên, còn ở lớp sâu thì hạ xuống. Hiện tượng này liên quan tới cấu trúc thẳng đứng của hoàn lưu nước. Nước trôi, được hình thành bởi những xoáy nước ở lớp gần mặt, gây nên sự dâng lên của các đường đẳng trị nồng độ tạp chất. Còn nước chìm, đồng hành với các xoáy nước ở lớp sâu, làm các đường đẳng trị hạ thấp xuống.

Khi đổ thải các chất ô nhiễm vào lớp nước sâu (nguồn nằm ở độ sâu 10 m), tạp chất không lan theo phương ngang, mà ép sát vào phía bờ, tạo ra ở đây một đới hẹp ô nhiễm mạnh (hình 6.9). Sự lan truyền tạp chất xuống sâu diễn ra khá nhanh: sau 12 giờ nó đã xâm nhập tới đáy. Với thời gian, nồng độ ô nhiễm trong lớp sâu tăng lên.

Trong *gió dâng*, bức tranh hoàn lưu nước có hướng ngược lại với tình huống vừa rồi và tương ứng với hình (6.8 b). Trong trường hợp phát thải ô nhiễm trong lớp mặt, các dòng chảy hướng vào phía bờ, ngăn cản sự lan truyền tạp chất trong phương ngang: trong 12 giờ tạp chất lan ra xa khỏi bờ với trên khoảng cách dưới 1 km (hình 8.10). Trong phân bố thẳng đứng của chất ô nhiễm cũng thấy có khác biệt đáng kể: trong gió dâng, chất ô nhiễm không thâm nhập xuống quá 18 m, nhưng trong gió rút - thâm nhập tới tận đáy. Điều này là do trong chế độ hoàn lưu dâng, phía dưới độ sâu 18 m thống trị chuyển động thẳng, ngăn cản sự thâm nhập chất ô nhiễm xuống đáy. Ngược lại, khi nguồn phát thải ở trong lớp sâu, thì những nồng độ chất ô nhiễm đáng kể gặp thấy tại những khoảng cách khá xa nguồn (xem hình 6.9). Thấy rõ là, sau 12 giờ, tại độ sâu nguồn, dòng chảy nghịch dưới lớp mặt đã mang tạp chất đi được khoảng cách 20 km. Trên mặt biển quan sát thấy các vết tạp chất. Với thời gian, ô nhiễm tiếp tục lan đi chủ yếu trong lớp trung gian. Các chuyển động thẳng ngăn cản sự thâm nhập ô nhiễm vào các lớp sát đáy.



Hình 1.10. Sự biến đổi nồng độ các chất ô nhiễm theo thời gian trong gió dâng, trường hợp các nguồn tầng mặt (a, b) và tầng sâu (c, d) (Belousova, Latun, 1975)

Những thí dụ đã dẫn cho thấy ảnh hưởng to lớn của các chuyển động thẳng đứng tới sự

hình thành trường ô nhiễm ở dải hẹp ven bờ. Bên ngoài dải này, sự lan truyền ô nhiễm được quyết định bởi các quá trình bình lưu phương ngang và khuếch tán rối phương ngang.

Nếu thay đổi độ sâu phát thải các chất ô nhiễm vào biển, tùy theo kiểu hoàn lưu nước, có thể có những sơ đồ lan truyền khác nhau:

- Vận chuyển tập chất bởi dòng chảy mặt,
- Lan truyền tập chất trong lớp có dòng chảy nghịch,
- Thâm nhập tập chất xuống các lớp sát đáy.

Ngoài những nhân tố đã xem xét ở trên, những yếu tố sau đây cũng ảnh hưởng đáng kể tới kết quả giải phương trình (6.37): cường độ của quá trình khuếch tán rối và dạng các điều kiện biên, tùy thuộc vị trí nguồn trên ở trên bờ hay ngoài khơi.

Bảng 1.2. Nồng độ (10^{-3} kg/m^3) ở tâm vết ô nhiễm ứng với một số giá trị K_{CL} (m^2/s) và các điều kiện biên khác nhau (Philippov, 1974)

Vị trí nguồn	Thời gian, giờ	Hấp thụ toàn phần			Hấp thụ một phần, $K_{CL} = 1,5 \cdot 10^2$
		$K_{CL} = 0$	$K_{CL} = 1,5 \cdot 10^2$	$K_{CL} = 1,5 \cdot 10^4$	
Trên bờ	1	90,0	89,0	36,0	97,0
	6	53,0	52,0	4,2	83,0
	24	9,8	9,1	1,2	36,0
	48	1,4	1,3	0,3	8,7
Ngoài khơi	1	94,0	88,0	35,0	83,0
	6	71,0	67,0	8,0	50,0
	24	26,0	51,0	1,7	23,0
	48	7,1	48,0	0,6	10,0

Như đã thấy ở mục 6.3, khuếch tán rối phương ngang có vai trò nhỏ hơn nhiều so với đối lưu trong sự biến đổi nồng độ tập chất. Tuy nhiên, ảnh hưởng “phát tán” của nó tới quá trình hình thành trường nồng độ chất ô nhiễm rất đáng kể và phụ thuộc vào các hệ số khuếch tán rối. Từ bảng 6.2 thấy rằng, khi $K_{CL} = 1,5 \cdot 10^2 \text{ m}^2/\text{s}$, nồng độ chất ô nhiễm ở tâm vết và sự lan truyền nó gần như không thay đổi. Tuy nhiên, khi $K_{CL} > 10^4 \text{ m}^2/\text{s}$, nồng độ chất ô nhiễm giảm rất mạnh (“rửa sạch vết”).

Vị trí nguồn ô nhiễm quyết định dạng các điều kiện biên. Trong mục 8.1 đã cho thấy, với nguồn nằm trên bờ hay gần bờ, các điều kiện biên trên đường bao phải phản ánh tính chất

phản xạ hay hấp thụ của đất bờ (các phương trình (6.9), (6.10a), (6.10b)).

Với nguồn nằm ở ngoài khơi, cần phải thỏa mãn điều kiện giảm nồng độ tới không ở khoảng cách xa nguồn (phương trình (6.10c)).

Từ bảng 6.2 thấy rằng, trong trường hợp phân bố nguồn ở lân cận bờ, ảnh hưởng của các điều kiện biên tới sự hình thành nồng độ ô nhiễm rất lớn. Trong trường hợp hấp thụ hoàn toàn sự lan truyền và phát tán ô nhiễm diễn ra nhanh. Nếu hấp thụ một phần, quá trình này xảy ra chậm hơn, nhưng diện tích ô nhiễm tỏ ra lớn hơn. Nếu nguồn ô nhiễm nằm ngoài khơi, thì dạng các điều kiện biên không ảnh hưởng tới sự hình thành trường nồng độ ô nhiễm. Trong trường hợp này, vai trò quá trình khuếch tán rối ngang quan trọng hơn.