

BƯỚC ĐẦU ỨNG DỤNG MÔ HÌNH HỒI QUY PHI TUYẾN ĐÁNH GIÁ KHẢ NĂNG TỰ LÀM SẠCH SINH HỌC VỰC NƯỚC VŨNG RÔ (PHÚ YÊN)

Nguyễn Hữu Huân*, Nguyễn Trịnh Đức Hiệu

Viện Hải dương học, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam, Việt Nam

*E-mail: nghhuan@gmail.com

Ngày nhận bài: 5-8-2018; Ngày chấp nhận đăng: 16-12-2018

Tóm tắt. Tự làm sạch thủy vực là quá trình phức tạp, bao gồm 3 quá trình chủ yếu: Vật lý, sinh học và hóa học. Trên cơ sở nguồn dữ liệu thí nghiệm vào tháng 5/2014 và 12/2014 tại vịnh Vũng Rô (Phú Yên), bài báo đánh giá khả năng tự làm sạch sinh học thông qua khả năng phân rã chất hữu cơ và đồng hóa muối dinh dưỡng. Khả năng phân rã chất hữu cơ được đánh giá thông qua mô hình tương quan phi tuyến giữa BOD và thời gian phân hủy: Mô hình Streeter - Phelps (1925); Mô hình Young và Clark (1965); và Mô hình Mason và nnk., (2006). Trong khi đó, đồng hóa muối dinh dưỡng được đánh giá thông qua khả năng quang hợp cực đại của thực vật phù du - mô hình tương quan phi tuyến giữa năng suất và cường độ ánh sáng: Mô hình Webb và nnk., (1974); Mô hình Platt và nnk., (1980); và Mô hình Eilers và Peeters (1988). Sử dụng phương pháp bình phương tối thiểu trên mô hình hồi quy phi tuyến, các tham số đặc trưng cho quá trình tự làm sạch sinh học tại vực nước Vũng Rô đã được xác định. Theo đó, hằng số tốc độ phân rã sinh học chất hữu cơ tại vực nước Vũng Rô đạt $0,1073 \pm 0,0781$ ngày⁻¹ (sai số RMSE = $0,0663 \pm 0,0386$); tương ứng với thời gian bán phân rã khoảng hơn 6 ngày. Cường độ quang hợp cực đại tại vịnh Vũng Rô đạt $57,6881 \pm 25,2211$ mgC (mgChla)⁻¹h⁻¹ (sai số RMSE = $3,5900 \pm 2,2170$); tương ứng với khả năng đồng hóa muối dinh dưỡng tối đa của thực vật nổi khoảng $9,1719 \pm 3,5962$ mgN/m³/h và $1,2693 \pm 0,4977$ mgP/m³/h.

Từ khóa: Khả năng tự làm sạch sinh học, phân rã sinh học chất hữu cơ, đồng hóa muối dinh dưỡng, mô hình hồi quy phi tuyến.

MỞ ĐẦU

Vịnh Vũng Rô nằm sát chân đèo Cà thuộc địa phận tỉnh Phú Yên, là một vịnh nước sâu, kín gió, đã và đang được xây dựng để phát triển thành một khu kinh tế đa ngành. Trong thời gian qua, một số hoạt động phát triển kinh tế - xã hội tại Vũng Rô đã làm suy giảm chất lượng môi trường nước vịnh, gây thiệt hại cho ngành nuôi trồng thủy sản [1]. Do đó, việc nghiên cứu, xác định nguyên nhân gây ô nhiễm, khả năng đồng hóa chất thải của vực nước, trong đó đánh giá quá trình tự làm sạch sinh học làm cơ sở để đề ra các giải pháp quản lý nguồn chất thải đưa vào vịnh là vấn đề quan trọng phải thực hiện.

Khả năng tự làm sạch của thủy vực là khả năng tự giảm thiểu nồng độ hoặc loại bỏ các chất ô nhiễm để phục hồi lại trạng thái cân bằng như ban đầu. Khả năng tự làm sạch của các thủy vực ven bờ bao gồm các quá trình phức tạp và được chia thành các quá trình vật lý, hóa học và sinh học. Trên cơ sở nguồn dữ liệu thí nghiệm vào tháng 5/2014 và 12/2014 tại vịnh Vũng Rô, bài báo tập trung đánh giá khả năng tự làm sạch sinh học của thủy vực thông qua 2 quá trình chủ đạo: Quá trình quang hợp cực đại của thực vật phù du (hấp thụ muối dinh dưỡng) và quá trình phân rã chất hữu cơ. Mô hình phân rã chất hữu cơ được mô tả lần

đầu tiên bởi nhóm tác giả Streeter và Phelps (1925) [2]. Tuy nhiên đến năm 2006 thì đã có ít nhất tám mô hình mô tả quá trình phân rã chất hữu cơ được sử dụng: Moore và cộng sự (1950) [3], Thomas (1950) [4], Navone (1960) [5], Fujimoto (1964) [6], Hewitt và nnk., (1979) [7], Adrian và Sanders (1992–1993) [8], Young và Clark (1965) [9], Adrian và Sanders (1998) [10], Borsuk và Stow (2000) [11], và Manson và nnk., (2006) [12]. Quá trình quang hợp cực đại của thực vật phù du (hấp thụ muối dinh dưỡng) được xác thông qua mô hình tương quan giữa năng suất và cường độ bức xạ (mô hình P-I) như sau: Mô hình của Webb và nnk., (1974) [13], Jassby và Platt (1976) [14], Platt và nnk., (1980) [15], Eilers và Peeters (1988) [16].

Các phương trình mô tả quá trình phân rã sinh học chất hữu cơ và các mô hình tương quan giữa năng suất sơ cấp và cường độ ánh sáng đều có bản chất là mô hình hồi quy phi tuyến, do đó việc ứng dụng mô hình hồi quy phi tuyến để xác định các hệ số trong mô hình là rất phù hợp. Theo định nghĩa, mô hình hồi quy phi tuyến là mô hình có biến phụ thuộc quan hệ phi tuyến với ít nhất một thông số có trong mô hình, dạng tổng quát của mô hình hồi quy phi tuyến được mô tả như sau [17]:

$$y = f(x, \theta) + \varepsilon \quad \text{với } \varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$$

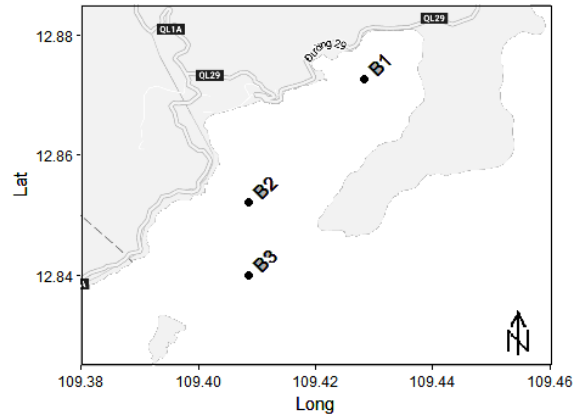
Trong đó: y là biến phụ thuộc, f là hàm số của mô hình, x là biến độc lập - biến x và y thường được xác định bằng thực nghiệm; θ là các thông số cần được ước tính, nó thể hiện đặc trưng cho mỗi quan hệ giữa biến x và y thông qua hàm f ; và ε là sai số của mô hình, theo đó ε là một phân phối chuẩn với trung bình bằng 0 và phương sai là σ^2 .

Do đó việc bước đầu ứng dụng mô hình hồi quy phi tuyến để xác định các thông số đặc trưng cho quá trình tự làm sạch sinh học tại thủy vực là mục tiêu nghiên cứu của bài báo.

TÀI LIỆU VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Khu vực nghiên cứu. Khu vực nghiên cứu thuộc vực nước vịnh Vũng Rô (Phú Yên) tại trạm B1 (109,43°E; 12,87°N); B2 (109,40°E; 12,85°N) và B3 (109,41°E; 12,84°N) vào tháng

5/2014 (mùa khô, kí hiệu K) và tháng 12/2014 (mùa mưa, kí hiệu M) (hình 1).



Hình 1. Khu vực nghiên cứu

Phương pháp bố trí thí nghiệm và phân tích mẫu. Thu mẫu nước biển dùng để thí nghiệm và mẫu dùng để phân tích chlorophyll-a bằng bathomet tại tầng đáy với độ sâu thu mẫu là 14 m, mẫu nước sau khi thu được chứa trong can nhựa 5 l đã được xử lý, sau đó mẫu được bảo quản bằng thùng nhựa cách nhiệt chứa đá lạnh (điều kiện khoảng 4°C) và được vận chuyển về phòng thí nghiệm. Việc thu mẫu, xử lý và bảo quản được thực hiện theo hướng dẫn của TCVN 5998 - 1995 [18].

Thí nghiệm phân rã chất hữu cơ: Sử dụng phương pháp bình kín, ủ trong tối rồi xác định BOD tại các ngày: 0, 1, 3, 5, 6, 10, 15 và 20 (8×2 mẫu). BOD_{1,3,5,6,10,15,20}: Định lượng bằng phương pháp gia số oxy hòa tan sau 1, 3, 5, 6, 10, 15 và 20 ngày che tối [19]. Oxy hòa tan: Được xác định bằng phương pháp Winkler [19].

Khả năng đồng hóa muối dinh dưỡng của thủy vực được xác định thông qua khả năng quang hợp cực đại của thực vật nổi (sử dụng tỉ số chuyển đổi C:N:P = 106:16:1). Bố trí thực nghiệm xác định các thông số trong đường cong P-I với nguồn sáng sử dụng từ đèn halogen có công suất 500 W. Quá trình này được xác định bằng thí nghiệm năng suất sinh học với 20 mức ánh sáng khác nhau từ 0–600 $\mu\text{Em}^{-2}\text{s}^{-1}$ [20–21].

Năng suất sinh học sơ cấp được xác định theo phương pháp gia số oxy trong bình đen trắng trong 4 giờ chiếu sáng [22]. Chlorophyll-

Bước đầu ứng dụng mô hình hồi quy phi tuyến...

a được xác định theo phương pháp quang phổ (chiết trong dung môi acetone 90% và so màu trên máy quang phổ UV-Visible) [23].

Phương pháp đánh giá khả năng phân rã sinh học chất hữu cơ. Để đánh giá khả năng phân rã sinh học chất hữu cơ tại vịnh Vũng Rô, nhóm tác giả sử dụng đồng thời mô hình phân rã bậc nhất của Streeter-Phelps (1925) (phương trình 1 - kí hiệu SP) [2]; mô hình phân rã bậc hai của Young and Clark (1965) (phương trình 2 - kí hiệu YC) [9] và mô hình mũ đôi của Mason và nnk., (2006) (phương trình 3 - kí hiệu M) [12] như sau:

$$BOD_t = BOD_{gh} [1 - \exp(-kt)] \quad (1)$$

Trong đó: BOD_t : BOD tại thời điểm t ngày; BOD_{gh} : BOD giới hạn; k : Hằng số phân rã hữu cơ; t : Thời gian.

$$BOD_t = t [(k BOD_{gh}^2)^{-1} + t (BOD_{gh})^{-1}]^{-1} \quad (2)$$

Trong đó: BOD_t : BOD tại thời điểm t ngày; BOD_{gh} : BOD giới hạn; k : Hằng số phân rã hữu cơ; t : Thời gian.

$$BOD_t = BOD_{gh1} [1 - e^{(-k_1 t)}] + BOD_{gh2} [1 - e^{(-k_2 t)}] \quad (3)$$

Trong đó: BOD_t : BOD tại thời điểm t ngày; BOD_{gh1} và k_1 : BOD giới hạn và hằng số phân rã hữu cơ của chất hữu cơ dễ phân hủy sinh học; BOD_{gh2} và k_2 : BOD giới hạn và hằng số phân rã hữu cơ của chất hữu cơ khó phân hủy sinh học; t : Thời gian.

Phương pháp đánh giá mức độ đồng hóa muối dinh dưỡng. Khả năng đồng hóa muối dinh dưỡng của thủy vực được xác định thông qua khả năng quang hợp cực đại của thực vật nổi (sử dụng tỉ số chuyển đổi C:N:P = 106:16:1). Nhóm tác giả sử dụng đồng thời mô hình của Webb và cộng sự (1974) (phương trình 4 - kí hiệu W) [13]; mô hình của Platt và cộng sự (1980) (phương trình 5 - kí hiệu P) [15] và mô hình của Eilers và Peeters (1988) (phương trình 6 - kí hiệu EP) [16] nhằm đánh giá khả năng quang hợp cực đại của thực vật nổi:

$$P = \alpha I_k [1 - \exp(-I I_k)] \text{ và } P_M = \alpha I_k \quad (4)$$

Với P : Năng suất sinh học dưới cường độ bức xạ I ; I_k : Cường độ ánh sáng bão hòa; α : Hệ số

góc của đường cong P-I, hay hiệu suất hấp thụ ánh sáng riêng của chlorophyll-a; P_M : Cường độ quang hợp cực đại khi ánh sáng bão hòa.

$$P = P_S [1 - \exp(-\alpha I P_M^{-1})] \exp(-\beta I P_M^{-1})$$

$$\text{Và } P_M = P_S (\alpha/\alpha + \beta)(\beta/\alpha + \beta)^{\beta/\alpha} \quad (5)$$

Với P : Năng suất sinh học dưới cường độ bức xạ I ; P_S : Cường độ quang hợp tiềm năng cực đại; α : Hệ số góc của đường cong P-I, hay hiệu suất hấp thụ ánh sáng riêng của chlorophyll-a; β : Hệ số góc âm của đường cong P-I tại cường độ ánh sáng cao; P_M : Cường độ quang hợp cực đại khi ánh sáng bão hòa.

$$P = I(aI^2 + bI + c)^{-1}$$

$$\text{với } a = (\alpha I_{opt}^2)^{-1}, b = P_M^{-1} - 2(\alpha I_{opt})^{-1}, c = \alpha^{-1} \quad (6)$$

Với P : Năng suất sinh học dưới cường độ bức xạ I ; I_{opt} : Cường độ bức xạ tối ưu; P_M : Cường độ quang hợp cực đại khi ánh sáng bão hòa; α : Hệ số góc của đường cong P-I, hay hiệu suất hấp thụ ánh sáng riêng của chlorophyll-a.

Phương pháp xử lý số liệu. Giải các mô hình hồi quy phi tuyến từ (1) đến (6) bằng phương pháp bình phương tối thiểu [24] trên phần mềm thống kê mã nguồn mở R [25] với 9 thuật toán: Marq, Port, Newton, Nelder-Mead, BFGS, CG, L-BFGS-B, SANN, Pseudo [26]. Số liệu đầu vào để giải mô hình phân rã là BOD_t và t với điều kiện biên ban đầu là $BOD_{gh} \geq BOD_{20}$; và số liệu đầu vào để giải mô hình P-I là P và I với điều kiện biên ban đầu là $P_M \geq P_{\text{thực đo cực đại}}$.

Sử dụng chỉ số căn bậc hai sai số trung bình toàn phương (RMSE) để lựa chọn mô hình phù hợp. Vì phân dư của mô hình hồi quy phi tuyến tuân theo luật phân phối chuẩn, do đó RMSE là chỉ số phù hợp nhất để sử dụng. Theo chỉ số này, mô hình nào có RMSE càng thấp thì mức độ phù hợp của mô hình cao [27].

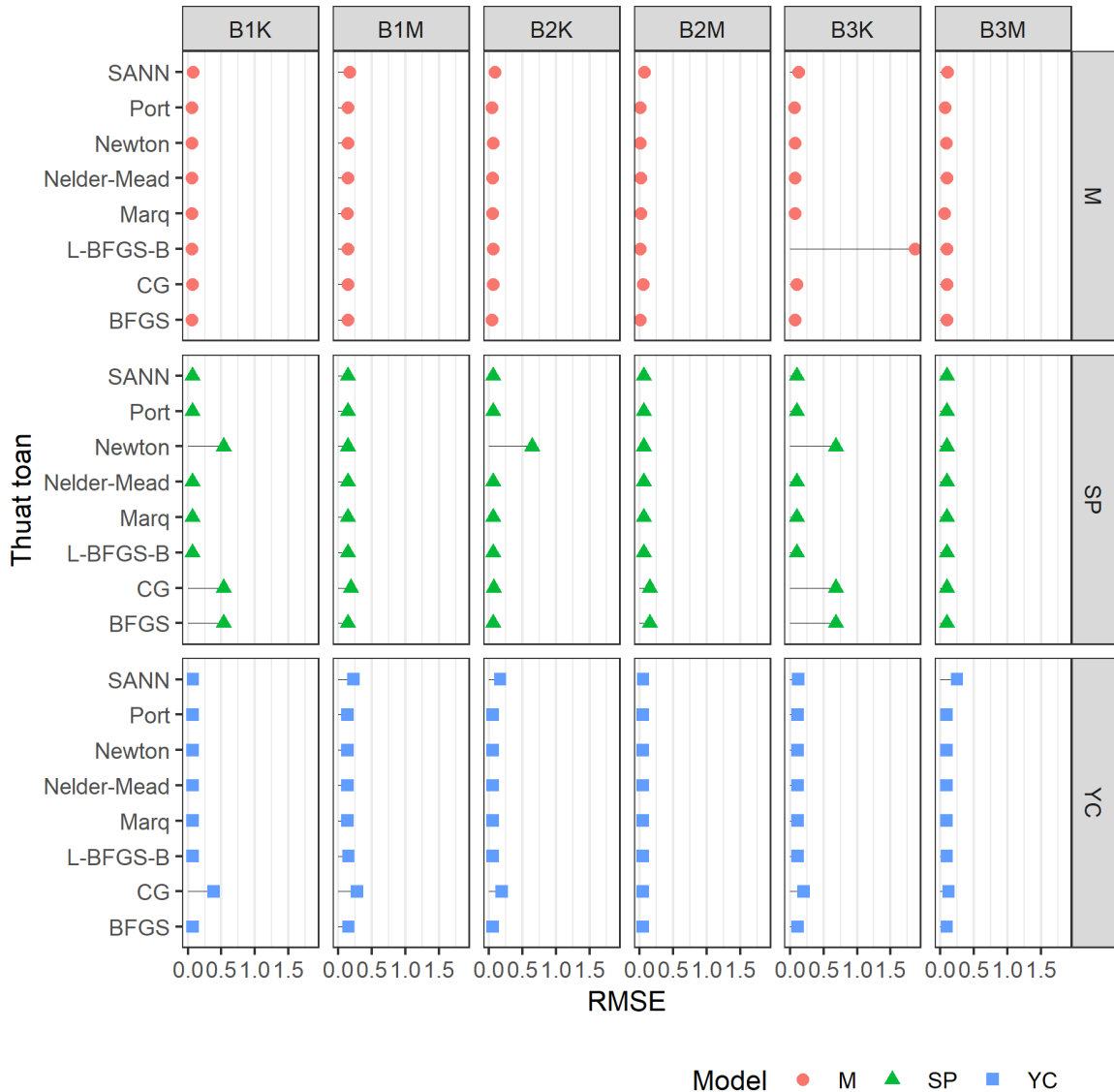
$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (Y_i - O_i)^2} \quad (7)$$

Với N là tổng số mẫu quan sát, Y_i là giá trị thực tế tại thời điểm I và O_i là giá trị dự báo tại thời điểm i .

Sử dụng kiểm định Shapiro để kiểm tra phân phối chuẩn; kiểm định one way ANOVA

để kiểm định sự khác biệt về giá trị trung bình RMSE giữa các mô hình [28].

KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU
Phân rã chất hữu cơ



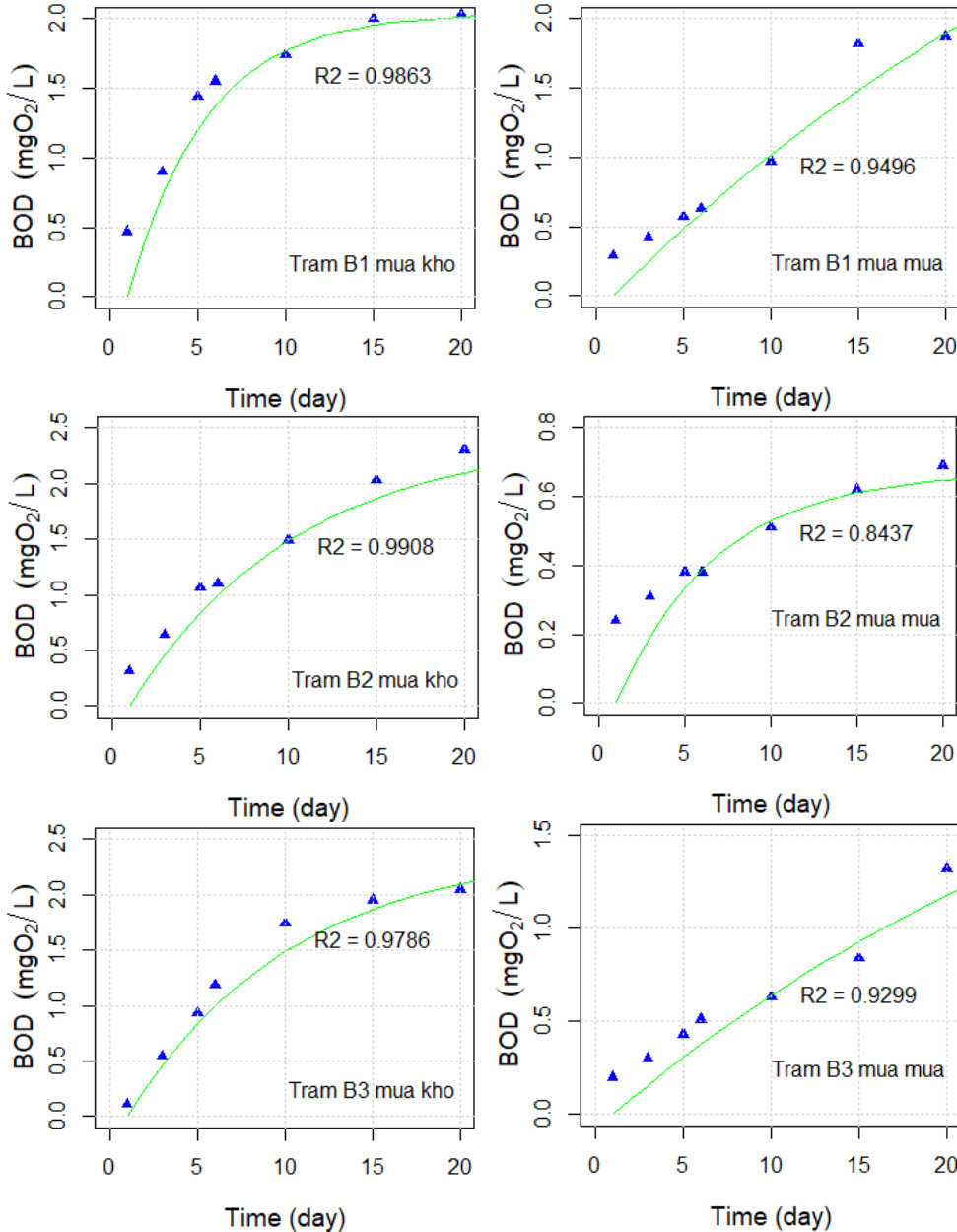
Hình 2. So sánh RMSE giữa 9 thuật toán trên 3 mô hình: 3 (M), 1 (SP) và 2 (YC)

Kết quả tính toán RMSE của 9 thuật toán trong các mô hình 1, 2 và 3 được trình bày trên hình 2. Từ giá trị RMSE cho thấy Marq là thuật toán tối ưu nhất trong cả 3 mô hình, thuật toán Pseudo không phù hợp để giải mô hình 1, 2 và 3. Mặc dù Newton là thuật toán mặc định để giải mô hình hồi quy phi tuyến trong hàm *nls* (nonlinear least squares) trên phần mềm R [29], tuy nhiên thuật toán Newton thường đưa ra sai số lớn và do đó thuật toán Marq (Levenberg-

Marquard) thường được sử dụng để giải mô hình hồi quy phi tuyến [26], nhận định này hoàn toàn đúng với 3 mô hình phân rã tại vực nước nghiên cứu. Từ giá trị RMSE trên thuật toán Marq cho thấy, mô hình 3 cho kết quả sai số thấp nhất với giá trị RMSE trung bình đạt $0,0663 \pm 0,0386$; tiếp đến là mô hình 1 và 2 với giá trị RMSE trung bình tương ứng đạt $0,0858 \pm 0,0298$ và $0,0872 \pm 0,0339$. Tuy nhiên sự khác biệt RMSE giữa 3 mô hình này không

mang ý nghĩa về mặt thống kê ($P = 0,5149$). Kết quả so sánh trung bình của RMSE cho thấy tốc độ phân hủy sinh học chất hữu cơ ở vịnh Vũng Rô phù hợp nhất về mặt toán học với mô hình 3 (giá trị RMSE thấp nhất). Tuy nhiên trong mô hình 3, các tham số k_1 và k_2 , BOD_{gh1} và BOD_{gh2} có giá trị hầu như là bằng nhau; điều này không thỏa mãn quy định về giả thuyết xây dựng mô hình 3: BOD_{gh1} đặc trưng

cho chất hữu cơ dễ phân hủy sinh học và phân hủy nhanh, BOD_{gh2} đặc trưng cho chất hữu cơ khó phân hủy sinh học và phân hủy sinh học lâu hơn [12]. Từ đó nhóm tác giả sử dụng mô hình 1 đặc trưng cho quá trình phân hủy sinh học chất hữu cơ tại vực nước nghiên cứu. Đồ thị mô tả mối tương quan phi tuyến tính giữa hàm lượng BOD và thời gian phân hủy t theo hình 1 được trình bày trên hình 3.



Hình 3. Tương quan phi tuyến giữa BOD và thời gian theo mô hình Streeter - Phelps

Từ mô hình 1 với thuật toán Marq, hằng số tốc độ phân rã chất hữu cơ tại vịnh Vũng Rô trung bình cả năm đạt $0,1073 \pm 0,0781$ ngày⁻¹. Từ đó cho thấy hằng số tốc độ phân rã hữu cơ tại vịnh Vũng Rô lớn hơn so với vịnh Nha Trang ($0,03-0,04$ ngày⁻¹) [30], tuy nhiên thấp hơn so với vực nước tại Cửa Bé - Nha Trang ($0,121-0,172$ ngày⁻¹) [31] và đầm Thủy Triều - Cam Ranh ($0,129-0,168$ ngày⁻¹) [21]. Từ hằng số tốc độ phân rã, thời gian bán phân rã chất hữu cơ tại vịnh Vũng Rô trung bình cả năm đạt 6,4629 ngày; tức là cần khoảng thời gian hơn 6 ngày để chuyển hóa hết 50% lượng chất hữu cơ có khả năng phân hủy sinh học tại thủy vực. Trong đó khả năng phân hủy sinh học chất hữu cơ vào mùa khô (hằng số phân rã đạt $0,1383 \pm 0,0739$ và thời gian bán phân rã 5,0119 ngày) tốt hơn so với mùa mưa (hằng số phân rã đạt $0,0762 \pm 0,0831$ và thời gian bán phân rã đạt 9,0964 ngày).

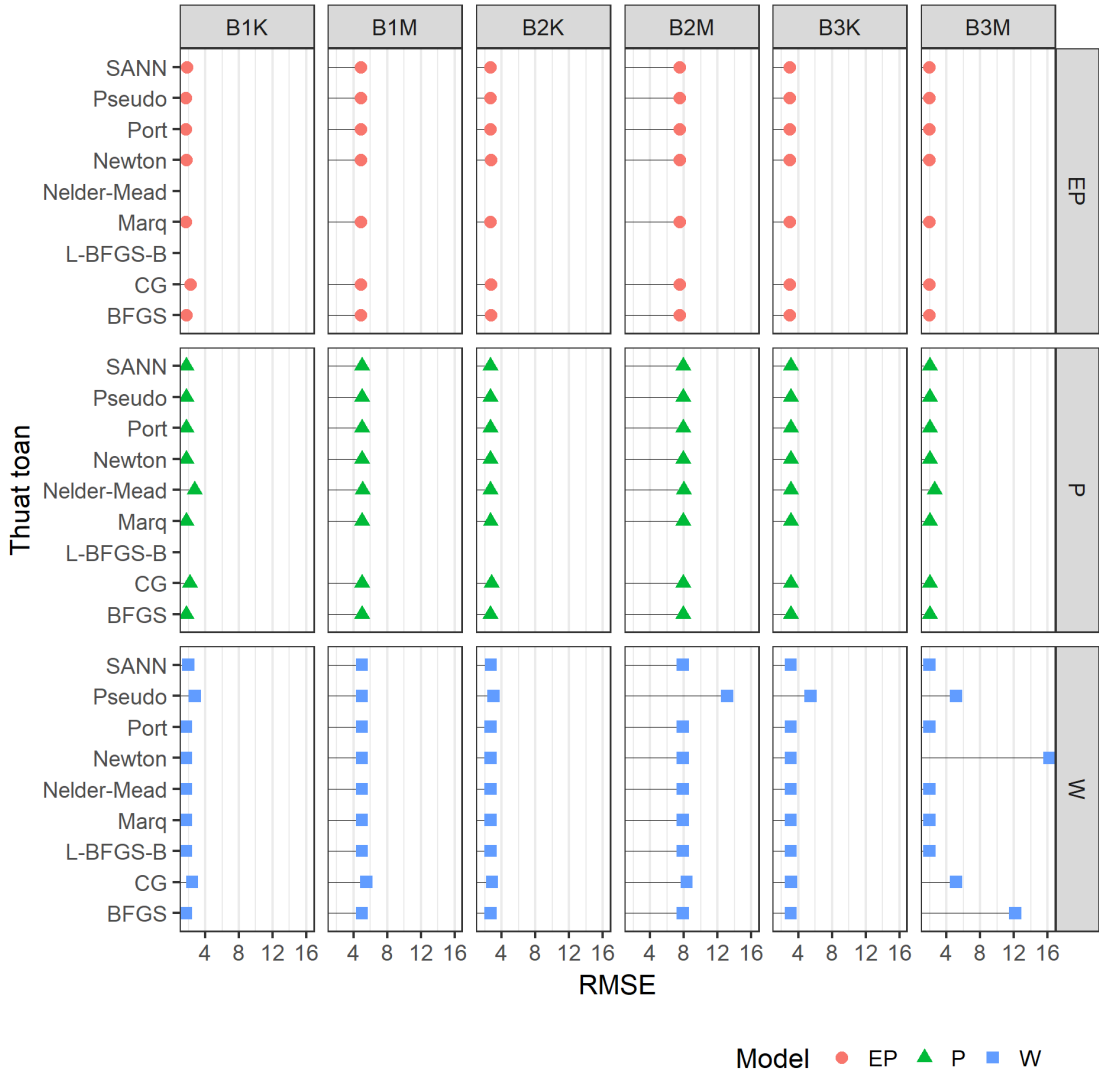
Đồng hóa muối dinh dưỡng. Kết quả tính toán RMSE của 9 thuật toán trong ba mô hình 4-6 được trình bày trên hình 4. Từ giá trị RMSE cho thấy Marq là thuật toán tối ưu nhất để giải các mô hình hồi quy phi tuyến 3, 4 và 5, trong khi đó thuật toán L-BFGS-B không thể giải mô hình 5, 6 và thuật toán Nelder-Mead không phù hợp để giải mô hình 6. Trung bình hóa RMSE trong thuật toán Marq cho thấy RMSE đạt cực tiểu trong mô hình 6 với giá trị tương ứng đạt $3,5900 \pm 2,2170$; tiếp theo đến mô hình 4 với giá trị tương ứng đạt $3,7310 \pm 2,3520$ và cuối cùng là mô hình 5 với giá trị tương ứng đạt $3,7550 \pm 2,357$. Tuy nhiên sự khác biệt RMSE giữa 3 mô hình này không mang ý nghĩa về mặt thống kê ($P = 0,9910$). Dựa vào giá trị trung bình và độ lệch chuẩn của RMSE cho thấy rằng mối tương quan phi tuyến tính giữa năng suất và cường độ ánh sáng tại vực nước vịnh Vũng Rô phù hợp nhất với mô hình 6. Đồ thị mô tả mối tương quan phi tuyến tính giữa năng suất sơ cấp và cường độ ánh sáng theo mô hình 6 được trình bày trên hình 5.

Không tìm thấy sự khác biệt mang ý nghĩa thống kê của giá trị P_M trong cả 3 mô hình ($P = 0,9947$). Trung bình hóa giá trị P_M trong các

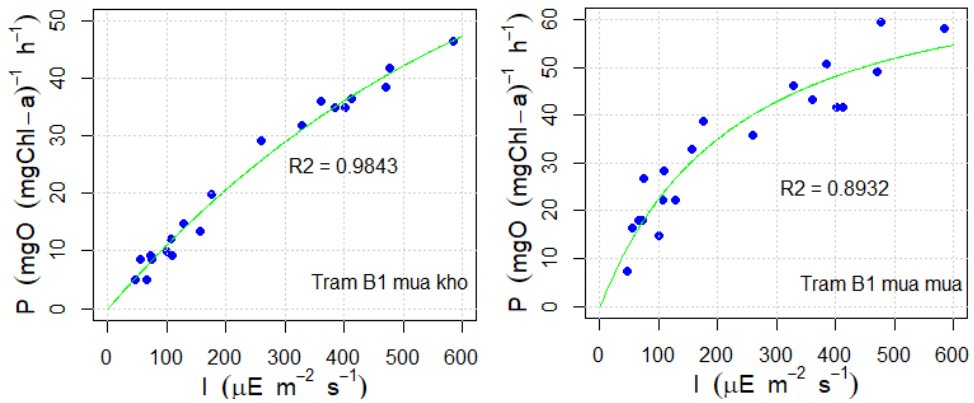
mô hình cho thấy, P_M giảm liên tục từ mô hình 4 đến mô hình 6 với giá trị tương ứng đạt $59,0423 \pm 23,0776$ mgC (mgChla)⁻¹h⁻¹; $58,0861 \pm 21,9926$ mgC (mgChla)⁻¹h⁻¹ và $57,6881 \pm 25,2211$ mgC (mgChla)⁻¹h⁻¹. Để đơn giản hóa mối tương quan giữa năng suất và cường độ ánh sáng tại vực nước ven bờ nước ta, các nghiên cứu phần lớn sử dụng mô hình 5 trong điều kiện không xảy ra hiện tượng ức chế quang hợp ($\beta = 0, P_S = P_M$) [21, 32]. Tuy nhiên kết quả nghiên cứu tại vịnh Vũng Rô cho thấy có xảy ra hiện tượng ức chế quang hợp tại trạm B1 trong mùa khô trong điều kiện nguồn ánh sáng thí nghiệm dao động trong phạm vi $0-600 \mu\text{Em}^{-2}\text{s}^{-1}$. Kết quả tính toán giá trị P_M cho thấy cường độ quang hợp cực đại tại vực nước nghiên cứu lớn hơn so với vùng Cửa Bé - Nha Trang ($38,61$ mgC (mgChla)⁻¹h⁻¹) [32] và Đầm Thủy Triều - Cam Ranh ($11,21-17,78$ mgC (mgChla)⁻¹h⁻¹) [21].

Từ giá trị P_M với thuật toán Marq trong mô hình 6 cho thấy, cường độ quang hợp cực đại trung bình cả năm tại vịnh Vũng Rô đạt $57,6881 \pm 25,2211$ mgC (mgChla)⁻¹h⁻¹, trong đó trung bình mùa khô đạt $53,5503 \pm 12,6221$ mgC (mgChla)⁻¹h⁻¹ và trung bình mùa mưa đạt $61,8260 \pm 37,1426$ mgC (mgChla)⁻¹h⁻¹. Hàm lượng chlorophyll-a dao động trong khoảng $0,430-1,650$ mg/m³, với điều kiện tỷ lệ phân tử giữa C:N:P trong quang hợp là 106:16:1, tính theo trung bình năm thực vật nổi tại đây có thể đồng hóa tối đa khoảng $9,1719 \pm 3,5962$ mgN/m³/h và $1,2693 \pm 0,4977$ mgP/m³/h. Trong đó, khả năng đồng hóa muối dinh dưỡng vào mùa khô ($12,1734 \pm 1,9401$ mgN/m³/h; $1,6847 \pm 0,2685$ mgP/m³/h) tốt hơn so với mùa mưa ($6,1705 \pm 1,2416$ mgN/m³/h; $0,8540 \pm 0,1718$ mgP/m³/h).

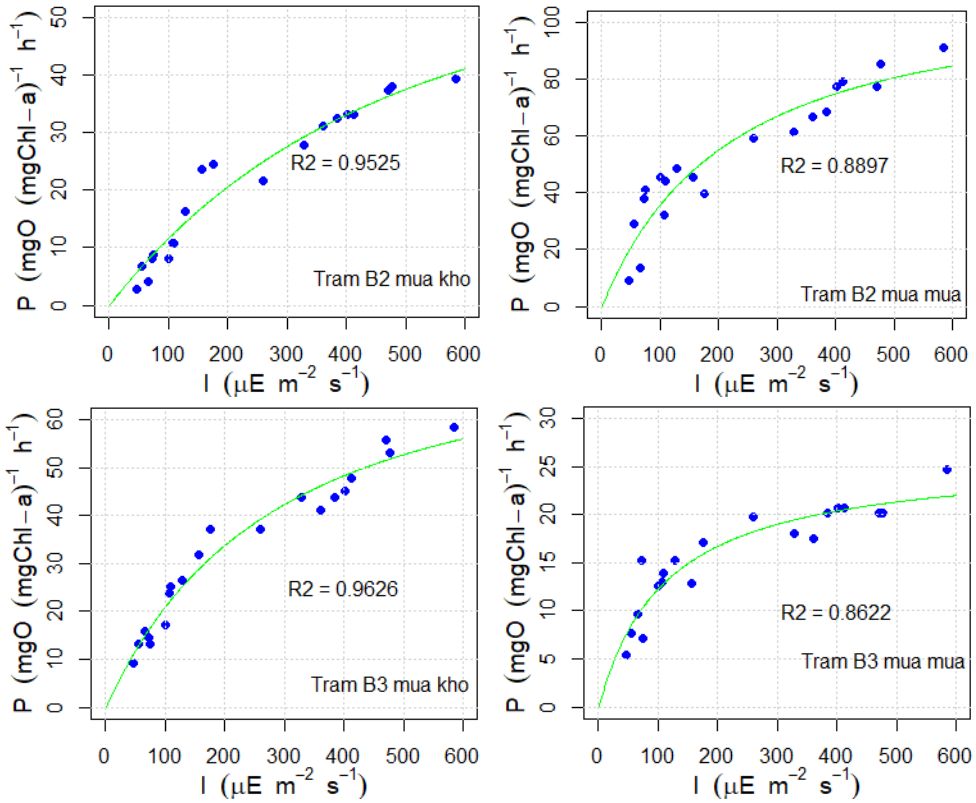
Kiểm định phần dư của mô hình. Kết quả kiểm định shapiro cho thấy phần dư của mô hình phân rã sinh học chất hữu cơ (mô hình 1) và mô hình quang hợp cực đại của thực vật phù du (mô hình 6) đều có phân phối chuẩn ($P > 0,05$), bên cạnh đó giá trị trung bình của phần dư dao động quanh đường thẳng $y = 0$ (hình 6-7).



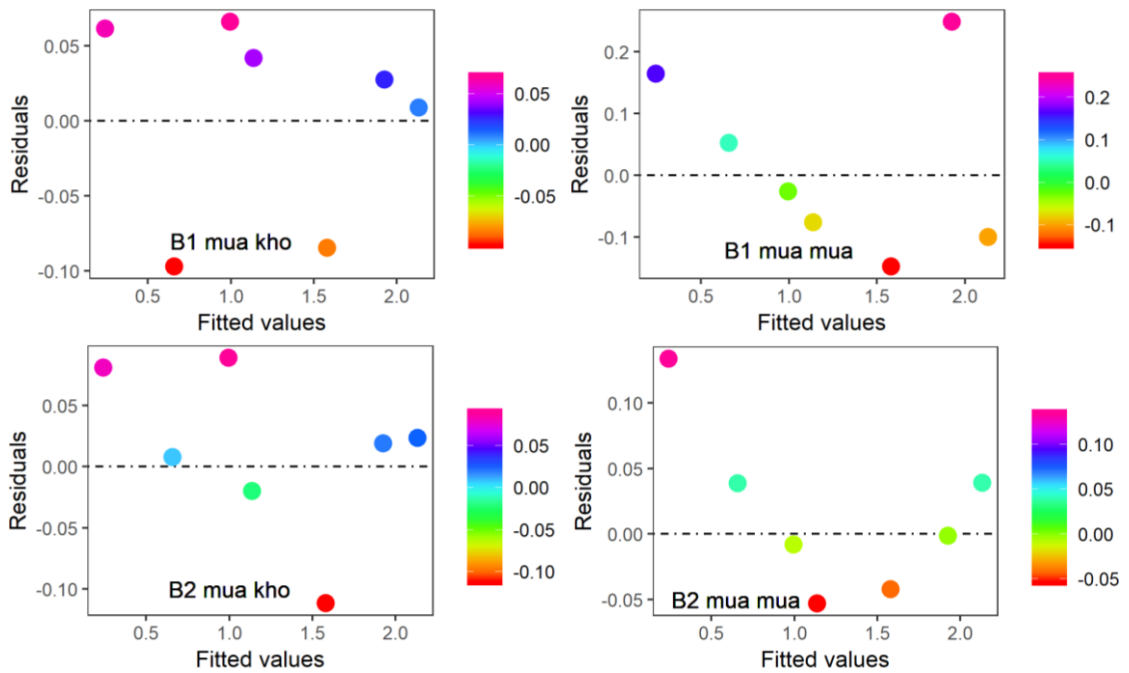
Hình 4. So sánh RMSE giữa 9 thuật toán trên 3 mô hình: 6 (EP), 5 (P) và 4 (W)



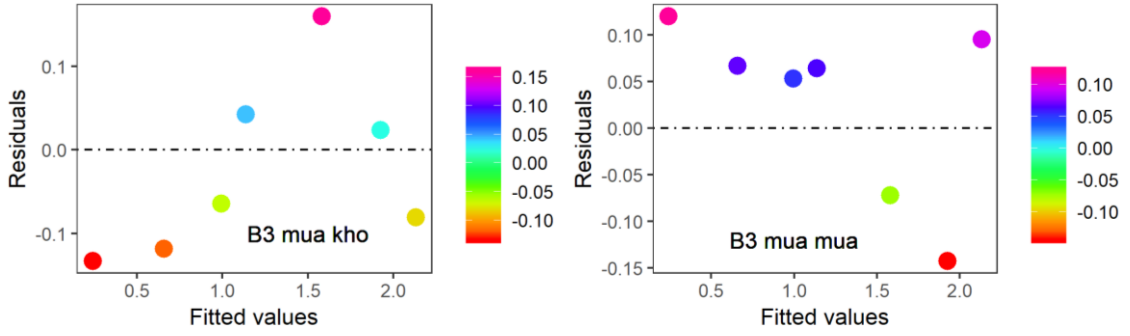
Hình 5. Tương quan phi tuyến giữa năng suất sơ cấp (P) và cường độ ánh sáng (I) theo mô hình Eilers và Peeters



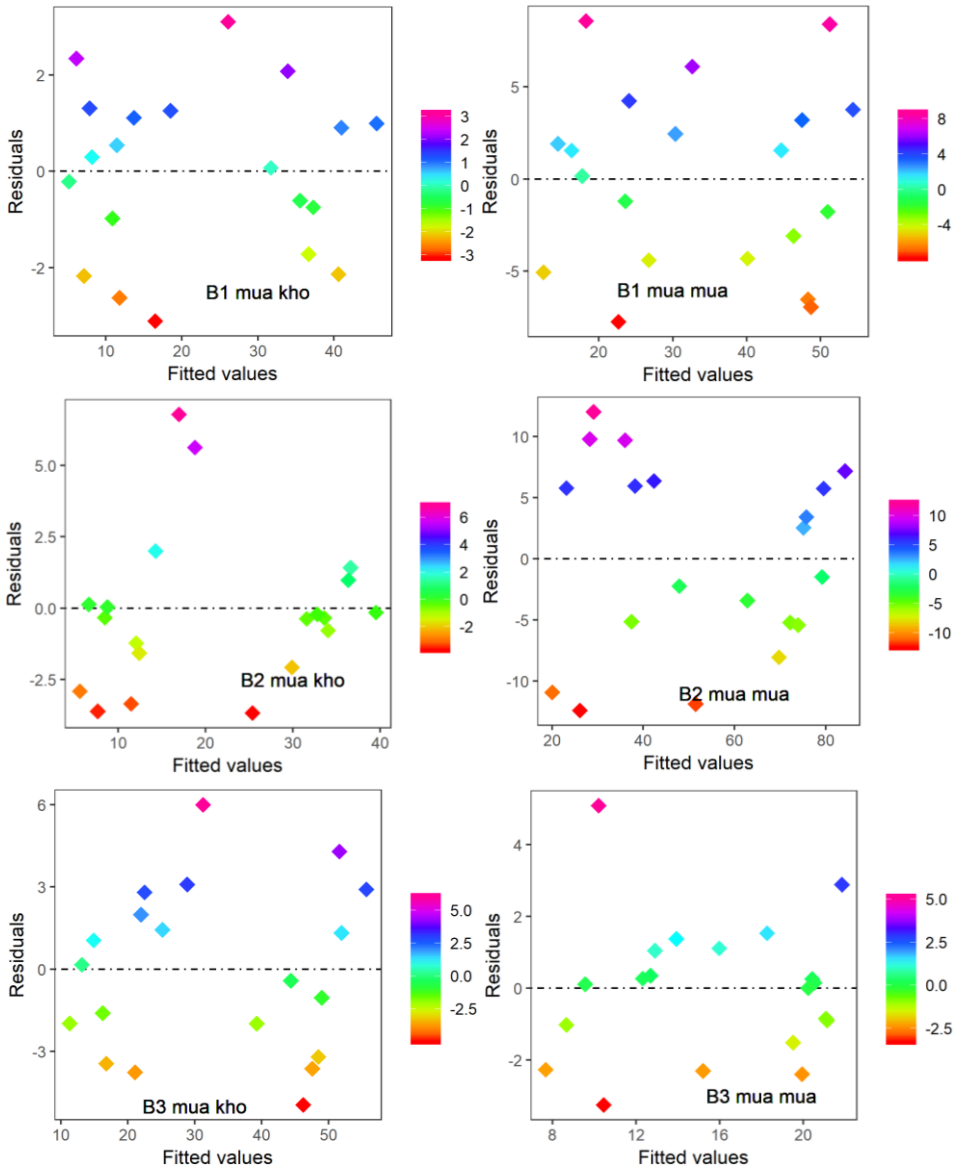
Hình 5. Tương quan phi tuyến giữa năng suất sơ cấp (P) và cường độ ánh sáng (I) theo mô hình Eilers và Peeters (tiếp)



Hình 6. Kiểm định phần dư mô hình phân rã hữu cơ theo Streeter - Phelps



Hình 6. Kiểm định phần dư mô hình phân rã hữu cơ theo Streeter - Phelps (tiếp)



Hình 7. Kiểm định phần dư mô hình hình P-I theo Eilers và Peeters

KẾT LUẬN

Mô hình hồi quy phi tuyến với phương pháp bình phương tối thiểu phù hợp để xác định các thông số trong mô hình phân rã sinh học chất hữu cơ và mô hình quang hợp cực đại của thực vật phù du (hấp thụ muối dinh dưỡng) tại vực nước vịnh Vũng Rô, các kiểm định về phần dư của mô hình đều được đáp ứng. Trong số 9 thuật toán đã sử dụng thì Marq là thuật toán tối ưu nhất so với các thuật toán Port, Newton, Nelder-Mead, BFGS, CG, L-BFGS-B, SANN, Pseudo.

Hằng số tốc độ phân rã sinh học chất hữu cơ trung bình cả năm tại vịnh Vũng Rô đạt $0,1073 \pm 0,0781$ ngày⁻¹ với sai số RMSE đạt $0,0663 \pm 0,0386$; tức là cần khoảng thời gian hơn 6 ngày để chuyển hóa hết 50% lượng chất hữu cơ có khả năng phân hủy sinh học tại thủy vực. Trong đó khả năng phân hủy sinh học chất hữu cơ vào mùa khô tốt hơn so với mùa mưa.

Cường độ quang hợp cực đại trung bình cả năm năm tại vịnh Vũng Rô đạt $57,6881 \pm 25,2211$ mgC (mgChla)⁻¹h⁻¹ với sai số RMSE đạt $3,5900 \pm 2,2170$; thực vật nổi tại đây có thể đồng hóa tối đa khoảng $9,1719 \pm 3,5962$ mgN/m³/h và $1,2693 \pm 0,4977$ mgP/m³/h. Trong đó, khả năng đồng hóa muối dinh dưỡng vào mùa khô tốt hơn so với mùa mưa.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Nguyễn Hữu Huân, Nguyễn Trịnh Đức Hiệu, 2017. Năng suất sinh học sơ cấp của thực vật nổi và một số yếu tố sinh thái liên quan ở vực nước Vũng Rô (Phú Yên). *Tạp chí Sinh học*, **39**(1), 40–50.
- [2] Streeter, H. W., and Phelps, E. B., 1925. A Study of the Pollution and Natural Purification of the Ohio River, III, Factors Concerned in the Phenomena of Oxidation and Reaeration. US Public Health Service. *Public Health Bulletin*, 146, 75.
- [3] Moore, E. W., Thomas, H. A., Snow, W. B., and Ruchhoft, C. C., 1950. Simplified method for analysis of BOD data [with discussion]. *Sewage and Industrial Wastes*, 1343–1355.
- [4] Thomas Jr, A. H., 1950. Graphical determination of BOD curve constants. *Water & Sewage Works*, **97**, 123–124.
- [5] Navone, R., 1960. A new method for calculating K and L for sewage. *Water and Sewage Works*, **107**, 285–286.
- [6] Fujimoto, Y., 1964. Graphical use of first stage BOD equation. *Journal of Water Pollution Control Federation*, **36**(1), 69–71.
- [7] Hewitt, J., Hunter, J. V., and Lockwood, D., 1979. A multiorder approach to BOD kinetics. *Water Research*, **13**(3), 325–329.
- [8] Adrian, D. D., and Sanders, T. G., 1992. Oxygen sag equation for half order BOD kinetics. *Journal of Environmental Systems*, **22**(4), 341–351.
- [9] Young, J. C., and Clark, J. W., 1965. Second order equation for BOD. *Journal of the Sanitary Engineering Division*, **91**(1), 43–58.
- [10] Adrian, D. D., and Sanders, T. G., 1998. Oxygen sag equation for second-order BOD decay. *Water Research*, **32**(3), 840–848.
- [11] Borsuk, M. E., and Stow, C. A., 2000. Bayesian parameter estimation in a mixed-order model of BOD decay. *Water Research*, **34**(6), 1830–1836.
- [12] Mason, I. G., McLachlan, R. I., and Gérard, D. T., 2006. A double exponential model for biochemical oxygen demand. *Bioresource Technology*, **97**(2), 273–282.
- [13] Webb, W. L., Newton, M., and Starr, D., 1974. Carbon dioxide exchange of *Alnus rubra*: A mathematical model. *Oecologia*, **17**(4), 281–291.
- [14] Jassby, A. D., and Platt, T., 1976. Mathematical formulation of the relationship between photosynthesis and light for phytoplankton. *Limnology and Oceanography*, **21**(4), 540–547.
- [15] Platt, T., Gallegos, C. L., and Harrison, W. G., 1980. Photoinhibition of photosynthesis in natural assemblages of marine phytoplankton. *Journal of Marine Research (USA)*, **38**, 687–701.
- [16] Eilers, P. H. C., and Peeters, J. C. H., 1988. A model for the relationship between light intensity and the rate of photosynthesis in phytoplankton. *Ecological Modelling*, **42**(3-4), 199–215.

- [17] Archontoulis, S. V., and Miguez, F. E., 2015. Nonlinear regression models and applications in agricultural research. *Agronomy Journal*, **107**(2), 786–798.
- [18] TCVN 5998:1995. Chất lượng nước - lấy mẫu - hướng dẫn lấy mẫu nước biển.
- [19] Clesceri, L. S., Greenberg, A. E., Eaton, A. D., Rice, E. W., and Franson, M. A. H., 2005. Standard methods for the examination of water and wastewater (No. 628.161 S7/2005). *American Public Health Association, Washington, DC*.
- [20] Mackey, D. J., Parslow, J. S., Griffiths, F. B., Higgins, H. W., & Tilbrook, B. (1997). Phytoplankton productivity and the carbon cycle in the western Equatorial Pacific under El Niño and non-El Niño conditions. *Deep Sea Research Part II: Topical Studies in Oceanography*, **44**(9–10), 1951–1978.
- [21] Phan Minh Thụ, Tôn Nữ Mỹ Nga, 2015. Khả năng tự làm sạch sinh học và lý học của nước đầm Thủy Triều, Khánh Hòa, *Tạp chí Khoa học - Công nghệ thủy sản*, 57–62.
- [22] Đặng Ngọc Thanh, Nguyễn Trọng Nho, 1983. Năng suất sinh học vực nước. *Nxb. Khoa học và Kỹ thuật, Hà Nội*. 145 tr.
- [23] Parsons, T. R., Maita, Y., and Lalli, C. M., 1984. Manual of chemical and biological methods for seawater analysis. In *Manual of chemical and biological methods for seawater analysis*. Pergamon Press. 173 p.
- [24] Madsen, K., Nielsen, H. B., and Tingleff, O., 2004. Methods for non-linear least squares problems, Informatics and Mathematical Modeling, Technical University of Denmark. URL Available online: <http://www.imm.dtu.dk>.
- [25] R Development Core Team, R. F. F. S. C., 2011. R: A language and environment for statistical computing. *R Foundation for Statistical Computing*.
- [26] Bloomfield, V. A., 2014. Using R for numerical analysis in science and engineering. *Chapman and Hall/CRC*.
- [27] Chai, T., and Draxler, R. R., 2014. Root mean square error (RMSE) or mean absolute error (MAE)?-Arguments against avoiding RMSE in the literature. *Geoscientific Model Development*, **7**(3), 1247–1250.
- [28] Mangiafico, S. S., 2015. An R Companion for the Handbook of Biological Statistics, Version 1.09 c, 274 p. Web version: rcompanion.org/rcompanion.
- [29] Fox, J., and Weisberg, S., 2010. Nonlinear regression and nonlinear least squares in R: An appendix to an R companion to applied regression. Retrieved from *McMaster University*: <http://socserv.mcmaster.ca/jfox/Books/Companion/appendix/Appendix-Nonlinear-Regression.pdf>.
- [30] Nguyễn Tác An, Lê Lan Hương, Phan Minh Thụ, 1999. Sơ bộ đánh giá khả năng tự làm sạch ở vực nước ven bờ Nha Trang. *Tuyển tập Nghiên cứu biển*, **9**, 123–136.
- [31] Phan Minh Thụ, Tôn Nữ Mỹ Nga, Nguyễn Thị Miên, 2014. Đánh giá mức độ phân rã hữu cơ sinh học ở Cửa Bé - Khánh Hòa. *Tạp chí Khoa học và Công nghệ Thủy sản*, (2), 57–61.
- [32] Phan Minh Thụ, Nguyễn Hữu Huân, Lê Trần Dũng, Lê Trọng Dũng, Võ Hải Thi, Lê Hoài Hương, Hoàng Trung Du và Trần Thị Minh Huệ, 2012. Chỉ số đồng hóa của thực vật nổi ở Cửa Bé (Nha Trang). *Tuyển tập Nghiên cứu biển*, **18**, 79–88.

INITIAL APPLICATION OF NONLINEAR REGRESSION MODELS TO ASSESS BIOLOGICAL SELF-PURIFICATION CAPACITY IN VUNG RO BAY (PHU YEN)

Nguyen Huu Huan, Nguyen Trinh Duc Hieu

Institute of Oceanography, VAST, Vietnam

Abstract. The self-purification of waters is a complex process, including physical, biological and chemical processes. Based on experimental data in May 2014 and December 2014 in Vung Ro bay (Phu Yen), this paper assesses biological self-purification capacity through the biodegradation of organic matter and nutrient assimilation. The capacity of biodegradation of organic matter is represented by nonlinear regression models of the relationship between BOD and decay time: model of Streeter - Phelps, Young and Clark (1965); Mason et al., (2006). The capacity of nutrient assimilation is represented by the nonlinear regression models of the relationship between photosynthesis and irradiance: Model of Webb et al., (1974); Platt et al., (1980); Eilers and Peeters (1988). Using the least squares method on the nonlinear regression model, the parameters characterizing the self purification process in Vung Ro waters were identified. The study results indicated that the rate of organic biodegradation in Vung Ro waters was $0.1073 \pm 0.0781 \text{ days}^{-1}$ (with $\text{RMSE} = 0.0663 \pm 0.0386$); the half-time of decay was about 6 days. The maximum intensity of photosynthesis in Vung Ro waters was $57.6881 \pm 25.2211 \text{ mgC (mgChal)}^{-1}\text{h}^{-1}$ (with $\text{RMSE} = 3.5900 \pm 2.2170$); maximum nutrient assimilation of phytoplankton was $9.1719 \pm 3.5962 \text{ mgN/m}^3\text{/h}$ and $1.2693 \pm 0.4977 \text{ mgP/m}^3\text{/h}$.

Keywords: Biological self-purification capacity, biodegradation of organic matter, nutrient assimilation, nonlinear regression models.