

УДК 551.468.4:574.4

Тучковенко Ю.С.^{*}, Иванов В.А.^{}**

^{*}Одесский государственный экологический университет

^{**}Морской гидрофизический институт НАН Украины

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ КАЧЕСТВА ВОД СЕВЕРО-ЗАПАДНОЙ ЧАСТИ ЧЕРНОГО МОРЯ

Описана математическая структура трехмерной численной имитационной модели формирования качества вод северо-западной части Черного моря. Приведены результаты адаптации термогидродинамического блока и калибровки параметров химико-биологического блока модели к условиям исследуемой акватории, а также обзор примеров использования модели при решении прикладных экологических задач.

Северо-западная часть Черного моря (СЗЧМ) имеет ряд специфических особенностей, отличающих ее от остальной акватории. К их числу относятся: наличие устьевых областей четырех крупных рек (Дунай, Днепр, Днестр, Южный Буг), пресный сток которых оказывает существенное влияние на пространственно-временную изменчивость термохалинной структуры и динамику вод; наличие большого числа относительно мелководных областей – банок, заливов, бухт, лиманов (изолированных, частично или эпизодически изолированных, свободно сообщающихся с морем); доминирующее влияние ветровых условий на динамику и термохалинную структуру вод (изменчивость циркуляции, проникновение речных вод, прибрежный апвеллинг и т.д.); формирование в весенне-летний период на глубинах 5-15 метров пикноклина, разделяющего прогретые и распресненные воды поверхностного слоя и холодные, соленые воды придонного слоя; систематическое развитие ветрового прибрежного апвеллинга, обеспечивающего газо- и массообмен между поверхностным и придонным слоями акватории в весенне-летний период года.

Качество вод СЗЧМ формируется под влиянием речного стока и особенностей гидрологического режима вод. На участках акватории, прилегающих к урбанизированным территориям побережья, где расположены крупные промышленные, транспортные и рекреационные центры, качество морских вод ухудшается в результате сбросов загрязненных вод береговыми антропогенными источниками. Одним из таких участков СЗЧМ является Одесский район [1], который имеет важное рекреационное значение, поскольку его побережье является туристической, пляжной и санаторно-курортной зоной. В связи с тем, что на побережье района расположены промышленный, портовый и коммунальный комплексы городов Одесса, Ильичевск, Южный, со сточными водами которых в морскую среду поступает значительное количество биогенных веществ, СПАВ, нефтепродуктов и других видов загрязняющих веществ [1, 2], то актуальной представляется задача оценки степени влияния береговых антропогенных источников загрязнения на качество вод прилегающей морской акватории. Решение этой задачи необходимо для выбора стратегии управления рекреационными и биологическими ресурсами Одесского района СЗЧМ, поскольку эффективность реализации различных природоохранных мероприятий на региональном уровне, включая нормирование сбросов загрязненных вод и улучшение их очистки, в конечном итоге, определяется степенью влияния береговых антропогенных источников загрязнения на качество вод и экологическую ситуацию в исследуемой акватории.

Для решения поставленной задачи разработана численная трехмерная математическая модель качества вод, описание математической структуры которой, результатов калибровки параметров и адаптации к условиям северо-западной части

Черного моря представляет собой цель данной статьи. В статье также приведен обзор результатов использования модели для решения прикладных экологических задач.

Модель состоит из трех блоков (подмоделей):

- трехмерная гидротермодинамическая модель, описывающая изменчивость термохалинной структуры и динамику вод, адвективный перенос и турбулентную диффузию **примеси в морской среде** при различных гидрометеорологических условиях, с учетом морфологических особенностей бассейна (**батиметрии**, конфигурации берегов) и речного стока;

- блок самоочищения вод от загрязняющих веществ, которые не свойственны морской среде, т.е. поступают в экосистему из внешних, как правило, антропогенных источников;

- блок эвтрофикации и кислородного режима вод, в котором описаны естественные химико-биологические процессы, определяющие баланс веществ и энергии в экосистеме, степень **трофности и сапробности ее вод**.

Гидродинамический блок модели представляет собой известную модель Хесса МЕССА (Model for Estuarine and Coastal Circulation Assessment) [3] для эстуарных зон, дополненную блоком переноса пассивной, консервативной примеси с использованием транспортных конечно-разностных схем. Эта модель позволяет рассчитывать трехмерную термохалинную структуру вод, интенсивность турбулентного обмена, а также ветровые (дрейфовые и компенсационные), плотностные, стоковые и приливные течения в эстуариях, заливах, лиманах и на мелководном континентальном шельфе.

Характерной особенностью данной модели является то, что она позволяет одновременно производить расчеты динамики вод и распространения примеси на акватории сопряженных водных объектов как сеточного, так и подсеточного масштабов. В данном случае, под водными объектами сеточного масштаба подразумеваются заливы, бухты, лиманы, участки морского шельфа, пространственные размеры которых существенно превышают шаг расчетной сетки численной модели. Подсеточными называются водные объекты, одна из горизонтальных геометрических характеристик которых значительно меньше шага расчетной сетки (например, узкие реки, каналы, проливы).

Указанное свойство модели имеет особенно важное значение для корректного описания динамики вод в устьевых областях рек Дунай, Днепр, Южный Буг, а также циркуляции вод как в самих лиманах, где есть узости (например, Сухой лиман), так и водообмена между ними и северо-западной частью Черного моря через узкие проливы, каналы.

Основные уравнения гидродинамического блока модели записываются следующим образом:

$$u_t + B_x^{-1}(B_x uu)_x + (uv)_y + (uw)_z = -\alpha_0 P_x + fv + B_x^{-1}(2B_x A_h u_x)_x + (1 - \beta_c)(A_h[v_x + u_y])_y + (A_v u_z)_z - \beta_c C_{ws} B_x^{-1} u |u|, \quad (1)$$

$$v_t + (vu)_x + B_y^{-1}(B_y vv)_y + (vw)_z = -\alpha_0 P_y - fu + B_y^{-1}(2B_y A_h v_y)_y + (1 - \beta_c)(A_h[u_y + v_x])_x + (A_v v_z)_z - \beta_c C_{ws} B_y^{-1} v |v|, \quad (2)$$

$$B_x^{-1}(B_x u)_x + B_y^{-1}(B_y v)_y + w_z = 0, \quad (3)$$

$$S'_t + B_x^{-1}(B_x u S - B_x D_h S'_x)_{,x} + B_y^{-1}(B_y v S - B_y D_h S'_y)_{,y} + (w S - D_v S'_z)_{,z} = 0, \quad (4)$$

$$T'_t + B_x^{-1}(B_x u T - B_x D_h T'_x)_{,x} + B_y^{-1}(B_y v T - B_y D_h T'_y)_{,y} + (w T - D_v T'_z)_{,z} = R, \quad (5)$$

$$P_z = -\rho g, \quad (6)$$

$$\rho = \rho_0[1 + F_\rho(S, T)], \quad (7)$$

где u , v и w – компоненты вектора скорости течения в направлениях x , y и z , соответственно; t – время; f – параметр Кориолиса; P – давление; g – ускорение свободного падения; $\alpha_0 = 1/\rho_0$ – постоянный удельный объем воды; ρ – плотность воды; A_h и A_v – коэффициенты горизонтального и вертикального турбулентного обмена импульсом; D_h , D_v – коэффициенты горизонтальной и вертикальной турбулентной диффузии тепла и примеси; T – температура и S – соленость воды; R – внутренний источник тепла; B_x и B_y – безразмерная, относительно размера ячейки расчетной сетки, ширина потока в направлениях x и y , соответственно; β_c – множитель, равный нулю, если канал отсутствует, и единице, в случае наличия канала; C_{ws} – коэффициент бокового трения о стенки канала. Индексы 'x', 'y', 'z' и 't' означают соответствующие производные.

Система уравнений (1)-(7) отличается от традиционной наличием множителей $\beta_c, (1 - \beta_c)$, B_x и B_y и последнего члена в правой части уравнений (1)-(2), описывающего боковое трение о стенки узкого канала. В такой модификации модель позволяет рассчитывать течения и перенос субстанции в каналах или реках, имеющих подсеточный масштаб в одном из горизонтальных направлений (ширина потока меньше шага расчетной сетки). Уравнения (1)-(5) автоматически переходят в традиционные уравнения, если положить $\beta_c = 0$ и $B_x = B_y = 1$.

Для улучшения вычислительных свойств модели и более точного описания вертикальной динамической и термохалинной структуры вод в области малых глубин, уравнения модели переводились в σ -систему координат по вертикали с использованием следующего выражения:

$$\sigma = -(h - z)/H; \quad H = h + d, \quad (8)$$

где σ – новая координата, изменяющаяся от поверхности до дна в пределах $[0, -1]$; H – полная глубина; d – невозмущенная глубина; h – возмущение уровня поверхности.

Метод решения гидродинамической задачи предусматривает расщепление полной скорости течений на среднюю по глубине скорость (баротропная составляющая) и отклонения от нее на каждом расчетном горизонте (бароклинная составляющая). Это позволяет использовать при численном решении уравнений динамики различные временные шаги для баротропной и бароклинной составляющих горизонтальной скорости течений, поскольку первая связана с колебаниями уровня моря при прохождении длинных гравитационных волн и изменяется более быстро, чем вторая.

Компоненты баротропной составляющей скорости определяются как

$$U = \int_{-1}^0 u d\sigma \quad \text{и} \quad V = \int_{-1}^0 v d\sigma, \quad (9)$$

а проинтегрированные по вертикали уравнения движения имеют вид:

$$\begin{aligned} (HU)'_t + B_x^{-1}(HB_x \theta_{uu} UU)'_x + (H\theta_{uv} UV)'_y = -gHh'_x - \alpha_0 HP_a'_x - HG_x^* + \\ fHV + B_x^{-1}(2A_h HB_x U'_x)'_x + (1 - \beta_c)(A_h H[v'_x + U'_y])'_y + \tau_{sx} - \tau_{bx} - \\ \beta_c C_{ws} B_x^{-1} H \theta_{su} U|U|, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} (HV)'_t + (H\theta_{uv} UV)'_x + B_y^{-1}(HB_y \theta_{vv} VV)'_y = -gHh'_y - \alpha_0 HP_a'_y - HG_y^* - \\ fHU + B_y^{-1}(2A_h HB_y V'_y)'_y + (1 - \beta_c)(A_h H[v'_x + U'_y])'_x + \tau_{sy} - \tau_{by} - \\ \beta_c C_{ws} B_y^{-1} H \theta_{sv} V|V|, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\text{где } G_x^* = \int_{-1}^0 G_x d\sigma, \quad G_x = \alpha_0 g \left\{ \left[\begin{array}{c} 0 \\ H \int (\rho - \rho_0) d\sigma \\ \sigma \end{array} \right]'_x + (h'_x + \sigma H'_x)(\rho - \rho_0) \right\};$$

$$G_y^* = \int_{-1}^0 G_y d\sigma, \quad G_y = \alpha_0 g \left\{ \left[\begin{array}{c} 0 \\ H \int (\rho - \rho_0) d\sigma \\ \sigma \end{array} \right]'_y + g(h'_y + \sigma H'_y)(\rho - \rho_0) \right\};$$

$$\theta_{uu} = \int_{-1}^0 (uu / UU) d\sigma; \quad \theta_{uv} = \int_{-1}^0 (uv / UV) d\sigma; \quad \theta_{vv} = \int_{-1}^0 (vv / VV) d\sigma;$$

$$\theta_{su} = \int_{-1}^0 (u/U)(u/U) d\sigma; \quad \theta_{sv} = \int_{-1}^0 (v/V)(v/V) d\sigma.$$

Уравнение неразрывности для баротропной составляющей:

$$h'_t + B_x^{-1}(B_x HU)'_x + B_y^{-1}(B_y HV)'_y = 0, \quad (12)$$

Бароклинные компоненты вектора скорости определяются как отклонения от средней по глубине скорости $u' = u - U$ и $v' = v - V$, а уравнения для них получают вычитанием уравнений для баротропной составляющей скорости из уравнений для полной скорости:

$$\begin{aligned} (Hu')'_t + B_x^{-1}(B_x H[uu - \theta_{uu} UU])'_x + (H[uv - \theta_{uv} UV])'_y + (\tilde{w}u')'_\sigma = \\ HG_x^* - HG_x + fHv' + B_x^{-1}(2A_h HB_x u'_x)'_x + (1 - \beta_c)(A_h H[v'_x + u'_y])'_y + \\ H^{-1}(A_v u'_\sigma)'_\sigma - \tau_{sx} + \tau_{bx} - \beta_c C_{ws} HB_x^{-1}(u|u| - \theta_{su} U|U|); \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} (Hv')'_t + (H[uv - \theta_{uv} UV])'_x + B_y^{-1}(B_y H[vv - \theta_{vv} VV])'_y + (\tilde{w}v')'_\sigma = \\ HG_y^* - HG_y - fHu' + B_y^{-1}(2A_h HB_y v'_y)'_y + (1 - \beta_c)(A_h H[v'_x + u'_y])'_x + \\ H^{-1}(A_v v'_\sigma)'_\sigma - \tau_{sy} + \tau_{by} - \beta_c C_{ws} HB_y^{-1}(v|v| - \theta_{sv} V|V|); \end{aligned} \quad (14)$$

Уравнение неразрывности для бароклинной составляющей:

$$B_x^{-1}(B_x H u')_x + B_y^{-1}(B_y H v')_y + H^{-1}(\tilde{w})_{,\sigma} = 0. \quad (15)$$

В уравнениях (13) - (15) \tilde{w} - вертикальная скорость, вычисляемая как:

$$\tilde{w} = H d\sigma / dt = w - (1 + \sigma)h_{,t} - u(h_{,x} + \sigma H_{,x}) - v(h_{,y} + \sigma H_{,y}). \quad (16)$$

Уравнения сохранения тепла (4) и солей (5) в σ - системе координат принимают следующий вид:

$$\begin{aligned} (HT)_{,t} + B_x^{-1}(B_x H[uT - D_h T_x])_{,x} + B_y^{-1}(B_y H[vT - D_h T_y])_{,y} + \\ + (\tilde{w}T - H^{-1}D_v T_{,\sigma})_{,\sigma} = HR. \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} (HS)_{,t} + B_x^{-1}(B_x H[us - D_h S_x])_{,x} + B_y^{-1}(B_y H[vs - D_h S_y])_{,y} + \\ + (\tilde{w}S - H^{-1}D_v S_{,\sigma})_{,\sigma} = 0. \end{aligned} \quad (18)$$

Вертикальная турбулентная вязкость аппроксимируется на основе полуэмпирической теории турбулентности как функция локального вертикального сдвига скорости и устойчивости водной колонки:

$$A_v = A_{v0} + A_z [C_{R0}(1 + C_{R1}R_i)^{-C_{R2}}], \quad (19)$$

$$D_v = D_{v0} + A_z [C_{R3}(1 + C_{R4}R_i)^{-C_{R5}}], \quad (20)$$

$$\text{где } A_z = [\kappa z(1 - z/H)]^2 (u'_{,z}{}^2 + v'_{,z}{}^2)^{1/2}. \quad (21)$$

Здесь $\kappa = 0.4$ - постоянная Кармана; $R_i = -g\rho'_{,z} / [\rho_0 (u'_{,z}{}^2 + v'_{,z}{}^2)]$ - число Ричардсона;

A_{v0} - пороговая вязкость; D_{v0} - пороговая диффузия; $C_{R0}, C_{R1}, C_{R2}, C_{R3}, C_{R4}$ и C_{R5} - константы.

Коэффициенты горизонтального турбулентного обмена рассчитываются исходя из значения локального сдвига горизонтальной скорости и пространственного шага горизонтальной конечно-разностной сетки ΔL :

$$A_h = A_{h0} + C_{AH} \Delta L^2 \left[2(u'_{,x}{}^2 + v'_{,y}{}^2) + (u'_{,y} + v'_{,x})^2 \right]^{1/2}, \quad (22)$$

$$D_h = A_h, \quad (23)$$

где коэффициент $C_{AH} = 0.01$ и $A_{h0} = 1.0 \text{ м}^2/\text{с}$ - фоновая величина.

Объединение химико-биологической части модели с гидродинамической в единую модель качества вод осуществляется на основе уравнения переноса неконсервативной примеси:

$$\begin{aligned} & \left(HC_i \right)_t + B_x^{-1} \left(B_x H \left[u C_i - D_h (C_i) \right]_{,x} \right)_{,x} + B_y^{-1} \left(B_y H \left[v C_i - D_h (C_i) \right]_{,y} \right)_{,y} + \\ & + \left((\tilde{w} + w_{gi}) C_i - H^{-1} D_v (C_i) \right)_{,\sigma} = HF_i(\bar{C}, x, y, z, t)_i + HQ_i(x, y, z, t). \end{aligned} \quad (24)$$

Здесь \bar{C} – вектор-функция переменных состояния экосистемы ($i = 1, 2, 3 \dots N$), элементами которой являются концентрации (биомассы) C_i моделируемых компонентов экосистемы или загрязняющих веществ; w_{gi} – скорость гравитационного осаждения примеси; F_i – функции неконсервативности, представляющие собой составленные на основе балансового подхода алгебраические суммы членов, которые описывают локальные потоки i -го вещества между компонентами модели, обусловленные различными (био)химическими реакциями и биологическими взаимодействиями: $\partial C_i / \partial t = F_i$; Q_i – приток вещества от внешних источников, включая антропогенные.

Функции неконсервативности F_i , в зависимости от типа рассматриваемых веществ, определяются в блоках самоочищения или эвтрофикации. На каждом шаге по времени решается система уравнений переноса неконсервативных субстанций. Число уравнений типа (24), составляющих эту систему, соответствует количеству моделируемых компонентов экосистемы или типов загрязняющих веществ.

Граничные условия в модели определяются следующим образом.

На поверхности моря ($z = 0$):

$$(\tau_{sx}, \tau_{sy}) = \rho A_v (u'_{,z}, v'_{,z}); \quad D_v T_{,z} = Q_T / (\rho C_w); \quad D_v S'_{,z} = 0; \quad D_v C'_{,z} = Q_c^{top}. \quad (25)$$

Здесь, τ_{sx} , τ_{sy} – компоненты вектора касательного напряжения трения ветра; Q_T – поток тепла, вычисляемый на основе метеорологических данных; Q_c^{top} – поток примеси через водную поверхность; C_w – удельная теплоемкость воды.

$$\begin{aligned} & \text{На дне } (z = H): \quad (\tau_{bx}, \tau_{by}) = \rho A_v (u'_{,z}, v'_{,z}); \quad D_v S'_{,z} = 0; \quad D_v C'_{,z} = Q_c^{bot}; \\ & D_v T_{,z} = \left[C_{b1} + C_{b2} (u_b^2 + v_b^2)^{1/2} \right] (T_b - T), \end{aligned} \quad (26)$$

где τ_{bx} , τ_{by} – компоненты вектора касательного напряжения придонного трения; u_b и v_b – составляющие вектора придонной скорости течения; C_{b1} , C_{b2} – коэффициенты обмена, принимаемые равными 10^{-6} м/с и 0.003, соответственно; T_b – температура морского дна.

На фронтальных морских границах ставится условие прохождения через нее длинных гравитационных волн:

$$h = h_0 + \bar{V}\bar{n}\sqrt{H/g}, \quad (27)$$

где h_0 – возмущение уровня в открытом море, задаваемое на основе данных наблюдений; $\bar{V}\bar{n}$ – проекция вектора течений, рассчитанного в граничных точках области, на внешнюю нормаль \bar{n} к открытой боковой границе.

Для температуры и солёности условия формулируются следующим образом: если поток входит в расчетную область, то на границе с открытым морем задаются фоновые значения температуры, солёности и примеси (T^* , S^* , C_i^*), характерные для открытого

моря; в противном случае значения моделируемых переменных экстраполируются из расчетной области с помощью упрощенного уравнения адвекции:

$$\begin{aligned}
 T_o = T^*; S_o = S^*, C_{oi} = C_i^* & \quad \text{если } \bar{v}\bar{n} \leq 0 \\
 \frac{\partial T_o}{\partial t} = -\bar{v}\bar{n} \frac{\partial T}{\partial \bar{n}}; \frac{\partial S_o}{\partial t} = -\bar{v}\bar{n} \frac{\partial S}{\partial \bar{n}}; \frac{\partial C_{oi}}{\partial t} = -\bar{v}\bar{n} \frac{\partial C_i}{\partial \bar{n}} & \quad \text{если } \bar{v}\bar{n} > 0
 \end{aligned} \tag{28}$$

где T_o, S_o, C_{oi} - значения моделируемых переменных на открытой морской границе.

В точках впадения рек задаются расходы воды Q_r , а также вертикальные профили бароклинной скорости, температуры, солености и примеси:

$$\begin{aligned}
 U = Q_r / (B_x \Delta L H) \quad \text{и} \quad V = Q_r / (B_y \Delta L H); \quad u' = u_{top} \cos(\pi z / H) \quad \text{и} \quad v' = v_{top} \cos(\pi z / H); \\
 T = T_{top} + (T_{top} - T_{bot}) (1 - \cos(\pi z / H)); \quad S = S_{top} + (S_{top} - S_{bot}) (1 - \cos(\pi z / H)); \\
 C_i = C_i^{top} + (C_i^{top} - C_i^{bot}) (1 - \cos(\pi z / H))
 \end{aligned} \tag{29}$$

Здесь, ΔL – горизонтальный пространственный шаг расчетной сетки; величины с индексом “top” соответствуют поверхностному слою воды, тогда как с индексом “bot” – придонному слою.

Для повышения вычислительной устойчивости, на открытых морских границах принимаются равными нулю: ускорение Кориолиса, ветровые напряжения трения, горизонтальные градиенты атмосферного давления и плотности. При этом используется специальная мультипликативная краевая функция, которая принимает нулевые значения в пограничных расчетных ячейках, 0.5 – в ячейках на удалении одного шага от граничных и 1 – во всех остальных ячейках.

Нелинейные адвективные члены уравнений движения также принимаются равными нулю на открытой морской границе.

Конечно-разностная аппроксимация уравнений модели выполняется с использованием неявных конечно-разностных схем. Программная реализация гидродинамической модели позволяет рассчитывать как суммарные течения, так и выделять отдельно их ветровую, термохалинную и стоковую составляющие. С заданной временной дискретностью в ходе счета модель усваивает новую информацию о скорости и направлении ветра, температуре воздуха, расходах рек, температуре, солености и загрязненности речных вод; термохалинной стратификации, уровне моря и фоновых концентрациях примеси в отдельных точках морской границы. Между вводимыми дискретными значениями выполняется линейная интерполяция: для метеорологических и речных параметров – во времени; для значений уровня моря, вертикального распределения температуры, солености воды и фоновой концентрации примеси на открытых границах – в пространстве и во времени.

Блок самоочищения вод представляет собой набор функциональных зависимостей, описывающих скорости процессов деградации и деструкции загрязняющих веществ в морской среде. Как правило, это загрязняющие вещества токсического действия, для которых применим критерий предельно-допустимых концентраций (ПДК).

Задача самоочищения вод исследуемой акватории моря от загрязняющих веществ антропогенного происхождения является корректной в случае локального характера источника загрязнения и отсутствия в водной среде естественных значимых источников поступления загрязняющих веществ. Первое условие означает, что влияние источника загрязнения на качество вод и функционирование экосистемы прослеживается лишь в

локальной области, пространственные масштабы которой во много раз меньше исследуемой морской акватории. Примером загрязняющих веществ (ЗВ) удовлетворяющих второму условию могут служить нефть и нефтепродукты, синтетические поверхностно-активные вещества (СПАВ), фенолы, тяжелые металлы и другие токсиканты. Попадая в морскую среду эти вещества вовлекаются в различного рода физические, химические, биологические и смешанные процессы, в результате чего трансформируются в пассивные (по отношению к биотическим составляющим экосистемы) химические элементы и соединения, либо выводятся из водной среды. К рассматриваемому типу ЗВ относится и один из наиболее опасных для человека биологических загрязнителей – патогенные бактерии, которые попадая в морскую среду подвергаются биодеградации.

В первом приближении, при построении блока самоочищения вод от неконсервативных загрязняющих веществ и патогенной микрофлоры предполагают, что деструкция загрязняющих веществ в результате их физико-химической и (или) биохимической трансформации описывается кинетическим уравнением реакции 1-го порядка:

$$F_i = \left. \frac{dC_i}{dt} \right|_{\text{local}} = -K_{ci}C_i, \quad (30)$$

где F_i – функция неконсервативности примеси в уравнении (24); K_{ci} – коэффициент неконсервативности (деструкции) загрязняющего вещества, представляющий собой удельную скорость его трансформации в результате совокупного действия химических, физико- и биохимических процессов, без детализации их вкладов. Его значение для конкретных типов ЗВ может быть взято из литературных источников, либо определено эмпирическим путем с использованием зависимостей вида:

$$K_{ci} = \frac{1}{t-t'} \ln \frac{C_i^0}{C_i^t} \quad \text{или} \quad K_{ci} = \ln 2 / \tau_i, \quad (31)$$

где C_i^0 – начальная концентрация загрязняющего вещества i ; C_i^t – его концентрация через время t ; t' – время, в течение которого практически не происходит изменения концентрации C_i^0 (время адаптации микроорганизмов), τ_i – период полураспада вещества i .

При наличии необходимой информации, коэффициент неконсервативности ЗВ может быть представлен в мультипликативной форме как функция от определяющих его характеристик водной среды.

На рис. 1 представлены результаты расчетов, выполненные с помощью модели самоочищения вод от нефтепродуктов, поступающих с речным стоком Днестра и Южного Буга, скорость деструкции которых в весеннем диапазоне температур полагалась равной 0.03 сут^{-1} [4, 5], а концентрация в речных водах, в соответствии с данными экспедиционных наблюдений Одесского филиала Института биологии южных морей НАН Украины за 1995 г., 0.7 мг/л – для Южного Буга и 0.13 мг/л – для Днестра. Из расчетов следует, что за счет поступления нефтепродуктов с речным стоком, в Одесском районе СЗЧМ формируются фоновые концентрации этого ЗВ порядка $5 - 10 \text{ мкг/л}$, что составляет $10 - 20 \%$ от величины ПДК.

К числу мощных береговых антропогенных источников загрязнения прибрежной зоны г.Одессы относятся ливневые стоки. На рис. 2 приведены результаты модельных расчетов загрязнения вод прибрежной зоны нефтепродуктами, поступающими с

ливневыми стоками города. Рассматривался ливень, прошедший 10 июля 2004 г., продолжительность которого составила 3 час. 25 мин. и за этот период времени выпало 15,3 мм осадков. При расчетах, для учета влияния сезонного пикноклина на вертикальную диффузию ЗВ, задавалось вертикальное распределение температуры воды, свойственное летнему периоду. Коэффициент неконсервативности для нефтепродуктов в летнем диапазоне изменчивости температуры воды полагался равным 0.046 сут^{-1} .

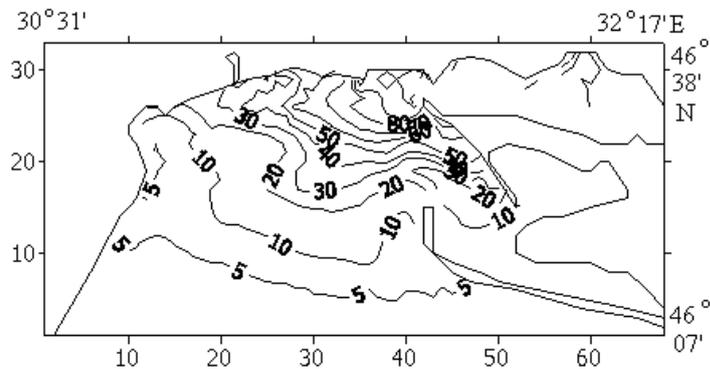


Рис. 1. Рассчитанное по модели самоочистения распределение нефтепродуктов, в мкг/л, поступающих со стоком рек Днепр и Южный Буг, в середине мая при метеорологических условиях 1986 г.

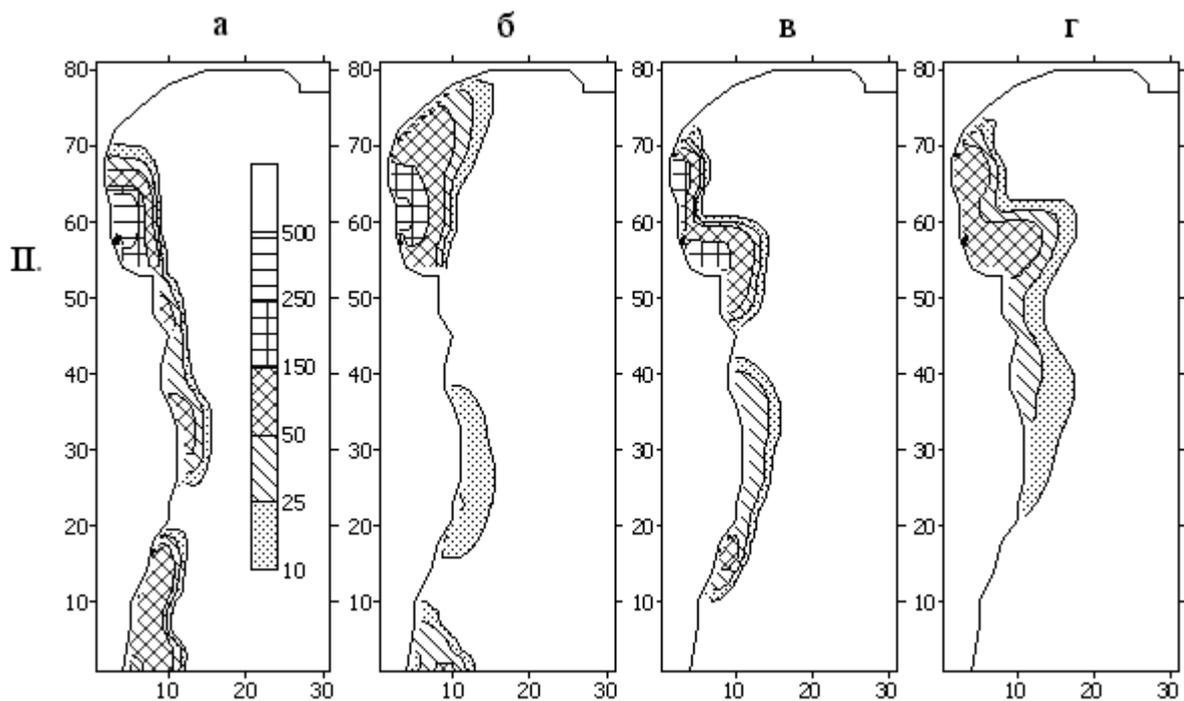


Рис. 2. Рассчитанные с помощью модели самоочистения вод превышения фоновых концентраций нефтепродуктов, в мкг/л, через 15 часов после начала (и ≈ 12 часов после окончания) (а, в) и ≈ 24 часа после окончания (б, г) стока ливневых вод в прибрежную зону моря, при СЗ (а, б) и ЮВ ветрах силой 5 м/с.

Полученные результаты свидетельствуют, что ливневые стоки существенно ухудшают качество морских вод в прибрежной рекреационной зоне г.Одессы. В первые сутки после выпадения осадков концентрация нефтепродуктов на большей части побережья превышает ПДК даже без учета фонового уровня загрязнения. Однако, благодаря высоким скоростям деструкции ЗВ в летний период года и кратковременности сброса ливневых вод, в течение 2-3 суток после выпадения интенсивных осадков уровень загрязнения прибрежных вод уменьшается до фоновых значений.

Блок эвтрофикации вод включает в себя 11 химико-биологических элементов: фитопланктон – V_f , фосфаты – C_{PO_4} , азот аммония – C_{NH_4} , азот нитратов – C_{NO_3} , растворенный органический фосфор – C_{DOP} и азот – C_{DON} , взвешенный органический фосфор – C_{POP} и азот - C_{PON} , детритная – V_{org}^{det} и растворенная – V_{org}^{dis} формы кислородного эквивалента косного органического вещества (БПК, перманганатная окисляемость), растворенный кислород – C_{O_2} . Азот нитритов включается в нитраты. Рассчитывается также показатель БПК₅. Диаграмма связей между элементами модели представлена на рис. 3.

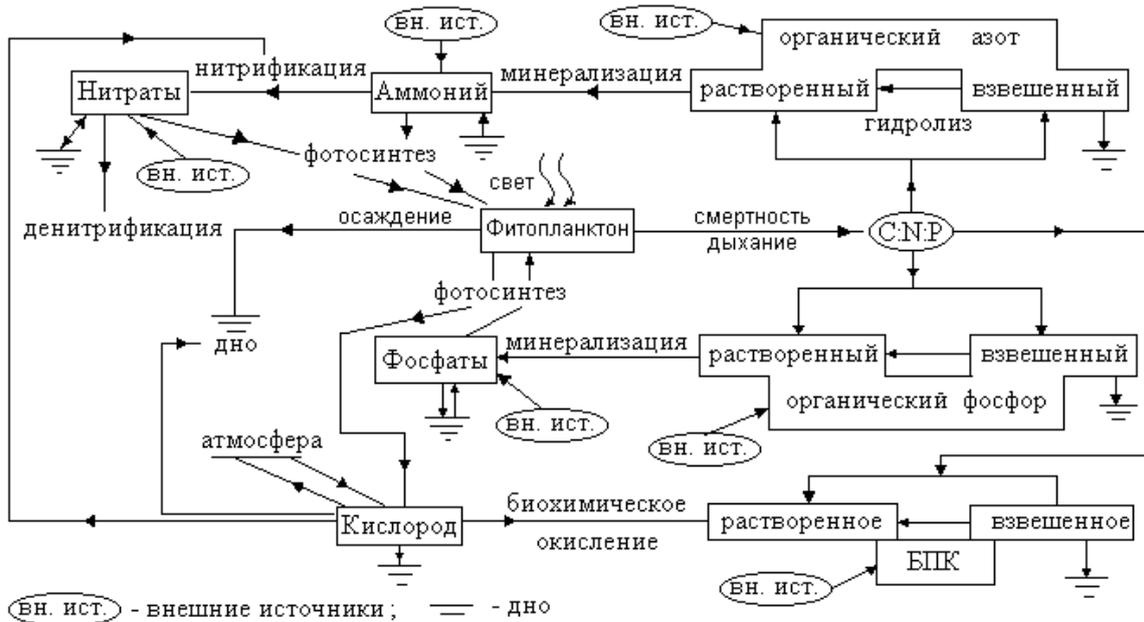


Рис. 3. Диаграмма связей между элементами блока эвтрофикации модели качества вод северо-западной части Черного моря

Система уравнений блока эвтрофикации для локальной точки пространства записывается следующим образом.

Фитопланктон, $гС/м^3$.

$$\left. \frac{dV_f}{dt} \right|_{local} = (\sigma_f - \varphi_f - \mu_f) V_f, \quad (32)$$

где σ_f – удельная скорость роста, 1/сут; φ_f – удельная скорость метаболизма (дыхания), 1/сут; μ_f – удельная скорость выедания и естественной смертности фитопланктона, 1/сут, которые задаются в виде функциональных зависимостей вида:

$$\sigma_f = V_f^{\max} f_1(I) f_2(C_N, C_{PO_4}) f_3(T), \quad (33)$$

$$f_1(I) = \frac{1}{\Delta z} \int_{z_i}^{z_{i+1}} f_z(I_z) dz = \frac{2.718 f_d}{\Delta z \alpha} \left[\exp(-R_{z_i}) - \exp(-R_{z_{i+1}}) \right] \quad (34)$$

$$R_0 = \frac{I_a}{I_{opt}}, \quad R_{z_i} = R_0 \exp(-\alpha z_i), \quad \Delta z = z_{i+1} - z_i$$

$$f_z(I_z) = \frac{I_z}{I_{opt}} \exp\left(1 - \frac{I_z}{I_{opt}}\right), \quad I_z = I_a \exp(-\alpha z).$$

$$f_2(C_N, C_{PO_4}) = \min\left\{ \frac{C_N}{\Pi_N + C_N}, \frac{C_{PO_4}}{\Pi_{PO_4} + C_{PO_4}} \right\}, \quad (35)$$

где $C_N = C_{NH_4} + C_{NO_3}$.

$$f_3(T) = \begin{cases} e^{-\zeta_1(T-T_m)^2}, & \text{если } T \leq T_m \\ e^{-\zeta_2(T_m-T)^2}, & \text{если } T > T_m. \end{cases} \quad (36)$$

$$\varphi_f = \varphi_r e^{\zeta_\varphi(T-T_r)}, \quad (37)$$

$$\mu_f = \mu_r e^{\zeta_\mu(T-T_r)}. \quad (38)$$

Здесь V_f^{\max} – максимальная удельная скорость роста фитопланктона, 1/сут; I_a – средний за световой день поток ФАР, проникающий через поверхность моря, Вт/м²; I_{opt} – оптимальная для фотосинтеза облученность, Вт/м²; f_d – доля светового дня в сутках ($0 \leq f_d \leq 1$); I_z – облученность на глубине z , Вт/м²; α – интегральный коэффициент ослабления интенсивности ФАР с глубиной; Π_N, Π_{PO_4} – константы полунасыщения скорости процесса утилизации фитопланктоном минеральных форм азота и фосфора, соответственно, мг/л; T – температура морской воды, °С; T_m – оптимальная для роста водорослей температура воды, °С; ζ_1, ζ_2 – коэффициенты, определяющие характер влияния температуры на рост водорослей в диапазонах выше и ниже T_m , 1/°С²; φ_r – удельная скорость метаболизма водорослей при температуре T_r , 1/сут; ζ_φ – коэффициент влияния температуры на скорость метаболизма, 1/°С; μ_r – удельная скорость выедания и гибели фитопланктона при температуре T_r , 1/сут; ζ_μ – коэффициент влияния температуры на скорость выедания и смертности водорослей, 1/°С.
Фосфор фосфатов, гР/м³.

$$\left. \frac{dC_{PO_4}}{dt} \right|_{local} = (\varphi_f \alpha_P + \mu_f g_{Pl} - \sigma_f) \beta_{P/C} B_f + K_{PO_4} C_{DOP}, \quad (39)$$

где α_p – доля фосфатов в метаболических выделениях водорослей, ($0 \leq \alpha_p < 1$); g_{p1} – доля фосфатов, продуцируемая в результате выедания и смертности фитопланктона, ($0 \leq g_{p1} < 1$); $\beta_{P/C}$ – коэффициент, выражающий стехиометрическое соотношение между углеродом и фосфором в органическом веществе, гP/гC; K_{PO4} – удельная скорость минерализации растворенного органического фосфора, 1/сут, определяемая выражением:

$K_{PO4} = K_{PO4}^{20} \left(\frac{B_f}{P_C + B_f} \right) \theta_{PC}^{(T-20)}$, где K_{PO4}^{20} – удельная скорость минерализации растворенного органического фосфора при 20°C, 1/сут; θ_{PC} – температурный коэффициент; P_C – константа полунасыщения, определяющая лимитирующее влияние биомассы фитопланктона на регенерацию минеральных соединений фосфора и азота [6], гC/м³.

Азот аммония, гN/м³.

$$\left. \frac{dC_{NH4}}{dt} \right|_{local} = (\varphi_f \alpha_N + \mu_f g_{N1} - \chi \sigma_f) \beta_{N/C} B_f + K_{NH4} C_{DON} - v_{12} C_{NH4}, \quad (40)$$

где α_N – доля аммонийного азота в метаболических выделениях водорослей; g_{N1} – доля аммонийного азота, продуцируемая в результате выедания и смертности фитопланктона; χ – доля минерального азота, потребляемая фитопланктоном в форме аммония, определяемая по формуле:

$$\chi = C_{NH4} \frac{C_{NO3}}{(P_N + C_{NH4})(P_N + C_{NO3})} + C_{NH4} \frac{P_N}{(C_{NH4} + C_{NO3})(P_N + C_{NO3})},$$

$\beta_{N/C}$ – стехиометрическое соотношение между углеродом и азотом в органическом веществе, гN/гC; K_{NH4} – удельная скорость минерализации органического азота, 1/сут,

определяемая как $K_{NH4} = K_{NH4}^{20} \left(\frac{B_f}{P_C + B_f} \right) \theta_{NC}^{(T-20)}$, где K_{NH4}^{20} – удельная скорость

минерализации органического азота при температуре воды 20°C, 1/сут; θ_{NC} – температурный коэффициент; v_{12} – удельная скорость нитрификации, 1/сут;

описываемая выражением $v_{12} = v_{12}^{20} \varepsilon_{ing} \theta_{NIT}^{(T-20)}$, где v_{12}^{20} – удельная скорость нитрификации при температуре 20°C, 1/сут; θ_{NIT} – температурный коэффициент;

$\varepsilon_{ing} = \frac{C_{O2}}{P_{O2} + C_{O2}}$ – множитель, учитывающий лимитирующее влияние содержания в

воде растворенного кислорода на процесс нитрификации, P_{O2} – константа полунасыщения процесса в отношении наличной концентрации кислорода, гO₂/м³.

Азот нитратов, гN/м³.

$$\left. \frac{dC_{NO3}}{dt} \right|_{local} = (\chi - 1) \sigma_f \beta_{N/C} B_f + v_{12} C_{NH4} - v_{DN} C_{NO3}, \quad (41)$$

где ν_{DN} – удельная скорость процесса денитрификации, 1/сут, рассчитываемая по формуле $\nu_{DN} = \nu_{DN}^{20} \frac{I_{DN}}{I_{DN} + C_{O_2}} \theta_{DN}^{(T-20)}$, ν_{DN}^{20} – удельная скорость денитрификации при температуре 20°C, 1/сут; θ_{DN} – температурный коэффициент; I_{DN} – константа, учитывающая влияние содержания растворенного в воде кислорода на развитие процесса денитрификации, гО₂/м³.

Растворенный органический фосфор, гР/м³.

$$\left. \frac{dC_{DOP}}{dt} \right|_{local} = (\varphi_f (1 - \alpha_P) + \mu_f g_{P2}) \beta_{P/C} B_f + \delta_P C_{POP} - K_{PO4} C_{DOP} \quad (42)$$

Здесь g_{P2} – доля растворенного органического фосфора, поступающая в результате выедания и смертности фитопланктона; δ_P – удельная скорость гидролиза лабильного взвешенного органического фосфора, зависящая от температуры воды: $\delta_P = \delta_P^{20} \theta_{par}^{(T-20)}$, где δ_P^{20} – скорость гидролиза при температуре 20°C, θ_{par} – температурный коэффициент.

Лабильный взвешенный органический фосфор, гР/м³.

$$\left. \frac{dC_{POP}}{dt} \right|_{local} = \mu_f g_{P3} \beta_{P/C} B_f - \delta_P C_{POP}, \quad (43)$$

где g_{P3} – доля лабильного взвешенного фосфора, продуцируемая в результате выедания и смертности фитопланктона. Заметим, что $g_{P1} + g_{P2} + g_{P3} < 1$, поскольку в модели рассматривается только лабильная часть косного органического вещества.

Растворенный органический азот, гN/м³.

$$\left. \frac{dC_{DON}}{dt} \right|_{local} = (\varphi_f (1 - \alpha_N) + \mu_f g_{N2}) \beta_{N/C} B_f + \delta_N C_{PON} - K_{NH4} C_{DON}, \quad (44)$$

где g_{N2} – доля растворенного органического азота, поступающая в результате выедания и смертности фитопланктона; δ_N – удельная скорость гидролиза лабильного взвешенного органического азота, 1/сут, определяемая по аналогии с фосфорным циклом.

Лабильный взвешенный органический азот, гN/м³.

$$\left. \frac{dC_{PON}}{dt} \right|_{local} = \mu_f g_{N3} \beta_{N/C} B_f - \delta_N C_{PON}. \quad (45)$$

g_{N3} – доля лабильного взвешенного азота, продуцируемая в результате выедания и смертности фитопланктона.

Растворенная часть БПК (биохимического потребления кислорода), $\text{гO}_2/\text{м}^3$, рассматриваемая в модели как кислородный эквивалент растворенного органического углерода.

$$\left. \frac{dB_{\text{org}}^{\text{dis}}}{dt} \right|_{\text{local}} = (\alpha_c \varphi_f + \mu_f g_{C2}) \beta_{\text{O}_2/\text{C}} B_f + \delta_c B_{\text{org}}^{\text{det}} - K_{\text{BOD}} B_{\text{org}}^{\text{dis}} - \beta_{\text{O}_2/\text{DN}} \nu_{\text{DN}} C_{\text{NO}_3}, \quad (46)$$

Здесь α_c – доля растворенного органического вещества в метаболических выделениях водорослей; g_{C2} – доля растворенного органического углерода, поступающая в результате выедания и смертности фитопланктона; $\delta_c = \delta_c^{20} \theta_c^{(T-20)}$ – удельная скорость растворения лабильного взвешенного органического углерода, 1/сут, δ_c^{20} – удельная скорость растворения при температуре 20°C, θ_c – температурный коэффициент процесса; K_{BOD} – удельная скорость биохимического окисления органического вещества, 1/сут, рассчитываемая как $K_{\text{BOD}} = K_{\text{BOD}}^{20} \theta_{\text{BOD}}^{(T-20)} \varepsilon_{\text{ing}}$, где K_{BOD}^{20} – удельная скорость биохимического окисления органического вещества при $T=20$ °C, 1/сут; θ_{BOD} – температурный коэффициент; $\beta_{\text{O}_2/\text{DN}}$ – кислородный эквивалент использования органического углерода в ходе реакции денитрификации, $\text{гO}_2/\text{гN}$.
Детритная часть БПК, $\text{гO}_2/\text{м}^3$.

$$\left. \frac{dB_{\text{org}}^{\text{det}}}{dt} \right|_{\text{local}} = \mu_f g_{C3} \beta_{\text{O}_2/\text{C}} B_f - \delta_c B_{\text{org}}^{\text{det}}, \quad (47)$$

где g_{C3} – доля лабильной части взвешенного органического углерода, поступающая в результате выедания и смертности фитопланктона.
Растворенный кислород, $\text{гO}_2/\text{м}^3$.

$$\left. \frac{dC_{\text{O}_2}}{dt} \right|_{\text{local}} = [\sigma_f (1.3 - 0.3\chi) - (1 - \alpha_c) \varphi_f] \beta_{\text{O}_2/\text{C}} B_f - K_{\text{BOD}} B_{\text{org}}^{\text{dis}} - \nu_{12} C_{\text{NH}_4} \beta_{\text{O}_2/\text{NT}}, \quad (48)$$

где $\beta_{\text{O}_2/\text{NT}}$ – кислородный эквивалент процесса нитрификации, $\text{гO}_2/\text{гN}$.

BPK_5 , $\text{гO}_2/\text{м}^3$. Эта формальная по сути величина включена в модель, поскольку является одним из самых распространенных гидрохимических показателей качества вод. Для ее оценки используется диагностическая формула:

$$\text{BOD}_5 = B_{\text{org}}^{\text{dis}} \left(1 - e^{-5K_{\text{BOD}}^{\text{lab}}} \right) + \beta_{\text{O}_2/\text{NT}} C_{\text{NH}_4} \left(1 - e^{-5\nu_{12}^{\text{lab}}} \right) + \beta_{\text{O}_2/\text{C}} B_f \left(1 - e^{-5\varphi_f^{\text{lab}}} \right), \quad (49)$$

где BOD_5 – величина БПК₅; K_{BOD}^{lab} , v_{12}^{lab} , ϕ_f^{lab} – удельные скорости процессов биохимического окисления органического вещества, нитрификации и дыхания фитопланктона в лабораторных условиях инкубации пробы.

В блоке эвтрофикации рассчитываются также потоки кислорода на верхней и нижней границах водной колонки и массообмен биогенными элементами между водой и донными отложениями.

Газообмен кислородом с атмосферой рассчитывается на основе зависимости [7]:

$$Q_{O_2}^{atm} = \zeta_{e,i} n_v n_T (C_{O_2}^S - C_{O_2}), \quad (50)$$

а поглощение кислорода донными осадками – с помощью функциональной зависимости [6]:

$$Q_{O_2}^{bot} = \frac{C_{O_2}^b}{\Pi_{O_2} + C_{O_2}^b} Q_{O_2}^{Tb} e^{\zeta_o (T - T_b)}, \quad (51)$$

где $Q_{O_2}^{atm}$ – поступление (инвазия) или выделение (эвазия) кислорода, мг/м²·ч, $\zeta_{e,i}$ – коэффициент инвазии (эвазии), л/м²·ч; n_T – температурный коэффициент; n_v – интегральный ветровой коэффициент:

$$n_v = \begin{cases} 1.0 + 0.27W^2, & \text{для } W \leq 8 \text{ м/с} \\ -7.4 + 0.4W^2, & \text{для } W > 8 \text{ м/с;} \end{cases}$$

W – скорость ветра, м/с; $C_{O_2}^S$ – насыщающая (при данной температуре и солености воды) концентрация кислорода, мг/л; $Q_{O_2}^{Tb}$ – поток поглощения кислорода донными осадками, гO₂/м²сут, при температуре придонных вод T_b , °C; $C_{O_2}^b$ – содержание кислорода в воде придонного слоя, гO₂/м³; ζ_o – коэффициент, описывающий влияние температуры на поглощение кислорода донными осадками, 1/°C.

Поток нитратов в системе вода – донные отложения определяется соотношением их концентраций в воде и донных отложениях, скоростью массообмена через границу раздела и интенсивностью процесса денитрификации в донных отложениях [9]:

$$Q_{NO_3}^{bot} = k_{sw} (C_{NO_3}^{bot} - C_{NO_3}^b) e^{\zeta_{dn} (T - T_{rNO_3})}. \quad (52)$$

Здесь k_{sw} – скорость переноса массы через границу вода-донные отложения, м/сут; $C_{NO_3}^b$ – концентрация нитратов в поровых водах донных отложений, гN/м³; $C_{NO_3}^{bot}$ – концентрация нитратов в водах придонного слоя, гN/м³; ζ_{dn} – коэффициент, описывающий влияние температуры на скорость денитрификации, 1/°C; T_{rNO_3} – температура, для которой определяется поток нитратов.

В модели учитывается влияние температуры на задаваемые пользователем потоки аммонийного азота и фосфатов в системе вода-донные отложения:

$$Q_{C_i}^{bot} = Q_{C_i}^{br} e^{\zeta_{ci}(T-T_{br})}, \quad (53)$$

где $Q_{C_i}^{bot}$ – донный поток субстанции C_i , г/м²сут, при температуре T ; $Q_{C_i}^b$ – донный поток субстанции C_i , г/м²сут, определенный при температуре T_{br} ; ζ_{ci} – температурный коэффициент, 1/°С.

Зависимость интенсивности массообмена с донными отложениями от температуры воды обусловлена тем, что в умеренных широтах при прогреве вод придонного слоя в весенне-летний период возрастают скорости минерализации аккумулированного в донных отложениях органического вещества, что приводит к интенсификации потоков минеральных соединений биогенных элементов из донных отложений в толщу воды и потока поглощения кислорода донными отложениями.

Исходные данные для калибровки блока эвтрофикации. На протяжении 1988-1999 гг. Одесским филиалом Института биологии южных морей (Оф ИнБИОМ) НАН Украины проводился комплексный экологический мониторинг морской акватории, прилегающей к побережью г.Одессы и ее городов-спутников: Ильичевска и Южного. За указанный период в Одесском районе СЗЧМ была проведена 31 комплексная съемка акватории, с общим числом станций - 557. Число съемок варьировало от 1 до 6 в год. Количество станций на съемках также изменялось от 16 до 42-х, составляя в среднем 27. Годовой цикл мониторинга в большинстве случаев включал в себя две съемки, соответствующие весеннему (апрель-май) и второй половине летнего (август-сентябрь) гидрологических сезонов. Всего в апреле было выполнено 3 съемки, в мае – 9, в июле – 1, в августе – 9, в сентябре – 2, в октябре – 2, в ноябре – 3, в декабре – 1 и феврале - 1.

Поскольку мониторинг проводился с целью контроля качества морской среды Одесского района СЗЧМ, то его программа предусматривала определение в поверхностном и придонном слоях стандартных гидрологических (температуры, солености) и гидрохимических (содержания биогенных веществ, растворенного кислорода и т.д.) характеристик вод акватории, а также содержания различного рода загрязняющих веществ.

С 1992 года в систему наблюдений были включены определения содержания хлорофилла «а». В мае и августе 1994–1995 гг., мае и октябре 1996 г., в сентябре 1997 г., в мае и августе 1998 г. на отдельных станциях отбирались количественные пробы фитопланктона.

Вышеперечисленные гидробиологические исследования хотя и выполнялись в минимальном объеме, но могут быть использованы при адаптации модели к условиям СЗЧМ и калибровки параметров блока эвтрофикации вод.

Адаптация и калибровка модели. На первом этапе адаптация и калибровка модели проводились в одномерном (с разрешением по вертикальной координате) пространственном ее варианте, когда отключались члены уравнений, описывающие горизонтальный турбулентный обмен и адвективный перенос, а также предполагалась независимость всех функций от горизонтальных координат. В такой постановке учитывается только бароклинная ветровая составляющая скорости течений, которая используется для расчета коэффициентов вертикального турбулентного обмена и диффузии. Таким образом, фактически решалась задача формирования вертикальной термохалинной структуры вод в результате вертикального турбулентного обмена импульсом, диффузии тепла и солей.

Цель расчетов заключалась, во-первых, в изучении адекватности воспроизведения моделью годовой изменчивости вертикальной термохалинной структуры вод исследуемой акватории под воздействием ветра и теплообмена с атмосферой, а, во-вторых, в

достижении соответствия порядков и характера внутригодовой изменчивости, получаемых по модели в фотическом слое и наблюдаемых величин моделируемых компонентов экосистемы. Эта цель достигалась путем коррекции в допустимых пределах начальных значений констант блока эвтрофикации, задаваемых на основе данных литературных источников. В качестве базовых в модели были использованы коэффициенты и параметры моделей CE-QUAL-ICM и WASP5 [6, 8]. Коррекция этих параметров в рамках допустимого интервала их изменчивости [6, 8-13] выполнялась путем сравнения кривых внутригодовой изменчивости элементов экосистемы, получаемых с помощью модели, с осредненными по пространству данными экологического мониторинга Одесского региона СЗЧМ, проведенного Оф ИнБЮМ в 1988 – 1999 гг.

Численные эксперименты с моделью проводились с усвоением данных ежесрочных 6 - часовых наблюдений за температурой воздуха, скоростью и направлением ветра, выполненных на ГМС Одесса-порт. Задавался также годовой ход среднемесячных значений солености на поверхностном и придонном горизонтах водной колонки и температура морского дна (соответствующая температуре вод придонного слоя по данным наблюдений). Вертикальное распределение температуры и солености морской воды формировалось моделью в ходе счета. Результаты расчетов приведены на рис. 4 - 5.

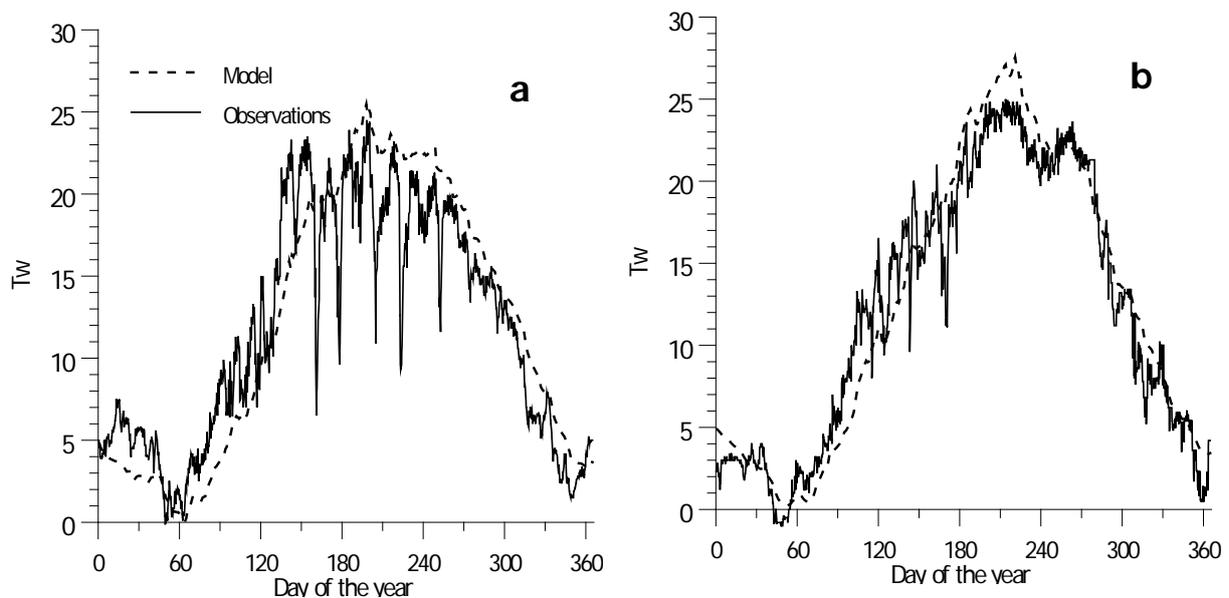


Рис. 4 Измеренный и рассчитанный в одномерном варианте модели годовой ход температуры поверхностного слоя воды при метеоусловиях 1983 (а) и 1994 гг. (б)

Видно, что модель правильно описывает годовой ход температуры поверхностного слоя воды, формирование и разрушение сезонного термоклина, сезонную изменчивость толщины верхнего квазиоднородного слоя (ВКС), хотя расхождения результатов расчетов с данными наблюдений также имеют место. В первую половину года модель занижает на несколько градусов температуру воды поверхностного слоя, а в летние месяцы, наоборот, завышает. Эти расхождения объясняются исключением вклада горизонтальной адвекции в формирование термического режима вод СЗЧМ. В зимне-весенний период охлаждение вод акватории меньше за счет притока тепла с Основным Черноморским потоком, а летом – наоборот. Кроме того, после формирования сезонного слоя скачка плотности в весенне-летний период, важную роль в обеспечении

теплообмена между поверхностной и придонной водными массами играют обусловленные ветром сгонно-нагонные явления в прибрежных зонах акватории, которые не учитываются в одномерном варианте модели. Эффект влияния на температуру поверхностного слоя воды прибрежного ветрового апвеллинга особенно ярко проявляется на рис. 4.а, где ему соответствуют резкие понижения температуры в летний период, отмеченные в данных наблюдений.

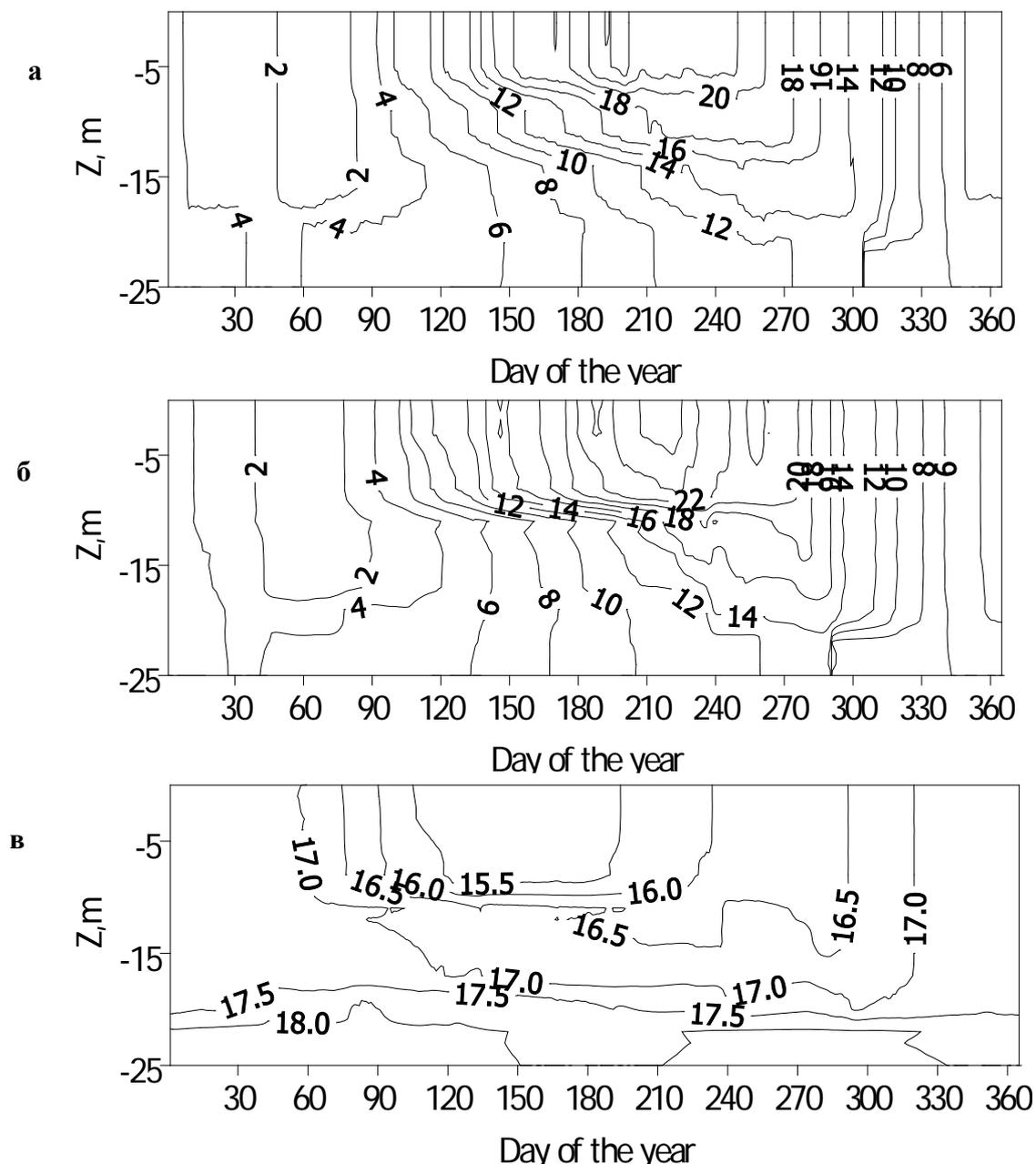


Рис. 5. Рассчитанная в 1-мерном варианте модели по метеорологическим данным внутригодовая изменчивость вертикального распределения температуры воды T , °C (а – 1983 г., б – 1994 г.) и солёности S , ‰ (в – 1994 г.).

В сезонной изменчивости вертикальной термохалинной структуры вод, полученной в одномерном варианте модели (рис. 5), обращает на себя внимание образование в

весенне-летний период термоклина и разрушение его в осенне-зимний период. Толщина ВКС в летний период года составляет ≈ 6 м в 1983 г. и 10 м в 1994 г. Указанные особенности соответствуют общим представлениям об особенностях гидрологического режима вод акватории, установленным по данным наблюдений.

Внутригодовая динамика моделируемых элементов экосистемы определяется сезонной изменчивостью температуры, прозрачности вод и потока (ФАР). Температура воды является одной из переменных гидродинамического блока и рассчитывается в самой модели. Прозрачность вод Z_d связана с интегральным коэффициентом ослабления ФАР с глубиной α зависимостью вида: $\alpha = 2.3/Z_d$. Коэффициент α представляется в модели в виде суммы двух слагаемых: $\alpha = \alpha_s + \alpha_f$, где α_s и α_f – составляющие, учитывающие вклад в ослабление потока ФАР аллохтонной взвеси и фитопланктона (самозатемнение), соответственно.

Поскольку минеральная взвесь поступает в море с речным стоком, то естественно предположить, что соленость поверхностного слоя морских вод в исследуемом районе и содержание в воде минеральной взвеси – две взаимосвязанные характеристики. На основе анализа данных наблюдений и литературных источников [14] была построена следующая эмпирическая зависимость: $Z_d = 0.157 \exp(0.233 \cdot S)$, где S – соленость вод поверхностного слоя. На основе этой зависимости и рассчитанных по модели значений солености, в каждой точке вычислительной области определялось значение α_s . Для вычисления α_f использовалась эмпирическая зависимость вида [15, 16]: $\alpha_f = 0.18 \cdot V_{f, \text{хл.а}}^{0.395}$, где $V_{f, \text{хл.а}}$ – биомасса фитопланктона, в мг.хл.а/м³. Сезонная изменчивость оптимальной для фотосинтеза освещенности задавалась на основе эмпирической зависимости: $I_{\text{opt}} = 17.0 \cdot \exp(0.066 \cdot T)$, Вт/м², где T – температура воды.

Расчет потока коротковолновой радиации, проникающей через водную поверхность, проводился на основе среднесуточных значений данных наблюдений за относительной влажностью воздуха и облачностью на Геофизической обсерватории ОГЭКУ по методике [3]. По ней же оценивалась длительность светового дня. Предполагалось, что ФАР составляет 50 % от полного потока радиации.

Для учета поступления биогенных веществ с речным стоком и сбросными водами береговых антропогенных источников, в одномерном варианте модели использовалась зависимость [17]:

$$Q_i = \sum_k \frac{q_k}{W_{\text{tot}}} (C_i - C_{ki}),$$

где Q_i – приток i -го вещества от внешних источников (в качестве которых рассматривается речной сток и береговые антропогенные источники Одесского района); q_k – расход k -го источника загрязнения, м³/с; C_{ki} , C_i – концентрация i -го загрязняющего вещества в водах k -го источника загрязнения и в водах исследуемой акватории, соответственно; W_{tot} – суммарный объем вод зоны разбавления. Предполагалось, что разбавление происходит в пределах верхнего 10-метрового слоя. Горизонтальный масштаб зоны разбавления при учете вклада береговых антропогенных источников определялся границами Одесского района СЗЧМ, а для речного стока – границами всей вычислительной области Днепроовско-Бугской приустьевой зоны, включая Одесский район.

Калибровка параметров модели выполнялась в следующей последовательности. Первоначально внутригодовой ход минеральных соединений азота и фосфора, а также растворенного кислорода задавался из данных наблюдений. Варьировались параметры и коэффициенты уравнений для фитопланктона, органических соединений азота и фосфора, БПК с целью достижения максимально возможного соответствия между модельными кривыми и наблюдаемыми значениями. Затем в систему последовательно включались уравнения для минеральных соединений азота и фосфора. Последним включалось уравнение баланса для растворенного кислорода. При этом на каждом этапе проводилась коррекция параметров модели.

Результаты калибровки параметров одномерного варианта модели приведены на рис. 6. При моделировании динамики биомассы фитопланктона, в соответствии с данными [18 - 21], предполагалось, что в годовом ходе его биомассы наблюдаются два максимума – в марте-апреле и июле-августе, с величиной пиков до 8-16 г/м³ в сыром весе или 0.4 – 0.8 гС/м³. Минимумы биомассы следует ожидать в декабре-январе и мае.

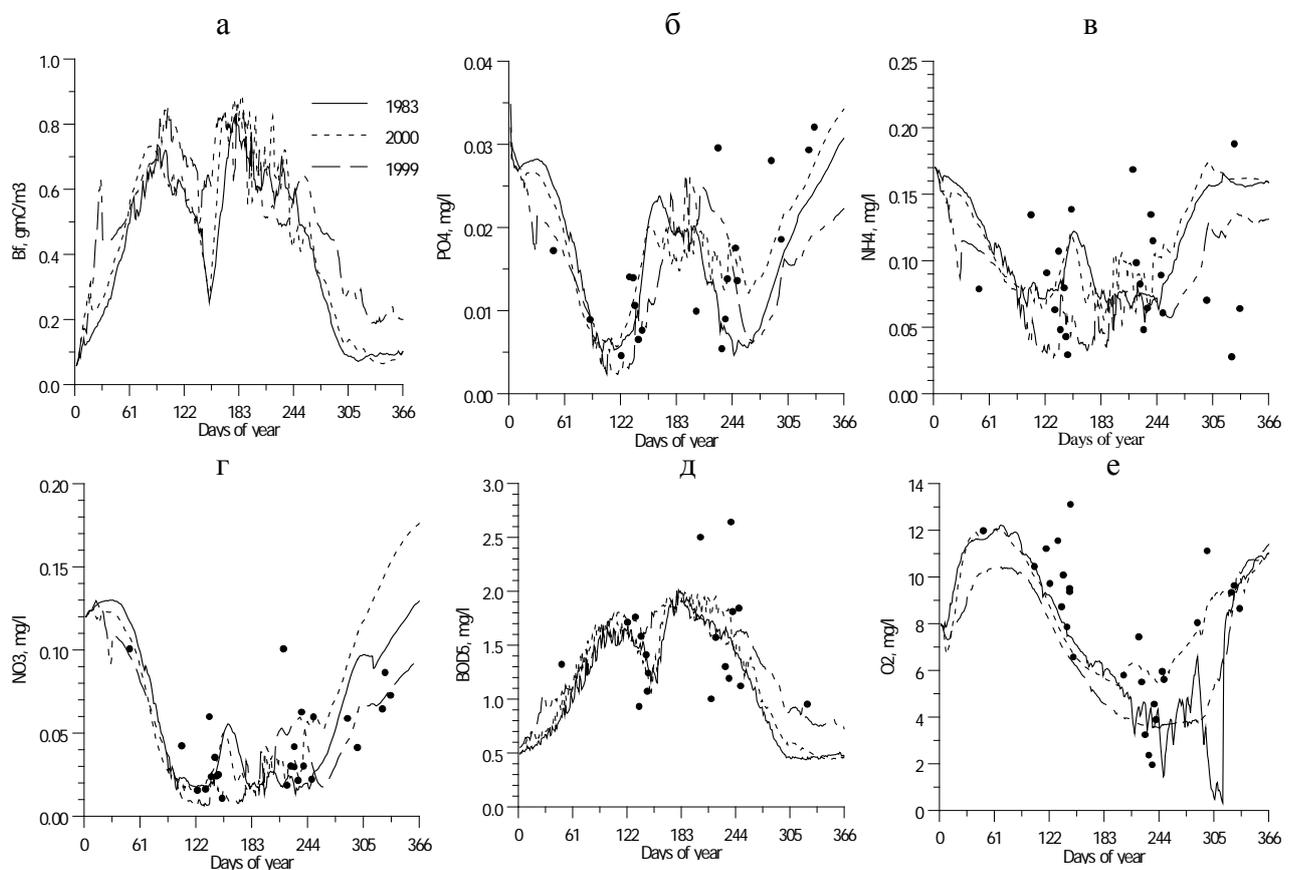


Рис. 6 Рассчитанный в 1-мерном варианте модели эвтрофикации годовой цикл биомассы фитопланктона (а), гС/м³, концентрации фосфора фосфатов (б), мгР/л, азота аммония (в) и нитратов (г), мгN/л, БПК₅ (д), мгО₂/л, в поверхностном слое и содержания кислорода (е), мг/л, в придонном слое Одесского района СЗЧМ при гидрометеорологических условиях различных лет. Точками отмечены осредненные по пространству полигона наблюдаемые значения, полученные в период мониторинга 1988 – 1999 гг. в Одесском районе.

Уточнение значений отдельных констант проводилось в ходе численных экспериментов с трехмерным вариантом модели. Параметры и коэффициенты модели, принятые в результате ее калибровки, приведены в таблице 1.

Таблица 5.1

Значения параметров и коэффициентов блока эвтрофикации модели качества вод СЗЧМ, принятые в результате калибровки

Параметр	Значение	Ед.изм.	Параметр	Значение	Ед.изм.
V_f^{\max}	2.25 (2.0)*	1/сут	g_{N1}	0.	–
ζ_1	0.008 (0.004)*	1/°C ²	g_{N2}	0.65	–
ζ_2	0.010 (0.006)*	1/°C ²	g_{N3}	0.3	–
T_m	25. (10.)*	°C	ν_{NO3}^{20}	0.1	1/сут
Π_N	0.050	гN/м ³	Π_{DN}	0.09	гO ₂ /м ³
Π_{PO4}	0.005	гP/м ³	θ_{DN}	1.09	–
φ_T	0.1 (0.08)*	1/сут	δ_N^{20}	0.03	1/сут
T_T	25.	°C	g_{C2}	0.6	–
ζ_φ	0.069	1/°C	g_{C3}	0.3	–
μ_T	0.10 (0.22)*	1/сут	δ_c^{20}	0.03	1/сут
ζ_μ	0.069	1/°C	θ_c	1.1	–
w_{gf}	0.1	м/сут	K_{BOD}^{20}	0.16	1/сут
$\beta_{P/C}$	0.022	гP/гC	θ_{BOD}	1.06	–
α_P	0.	–	$\beta_{O2/DN}$	2.86	гO ₂ /гN
K_{PO4}^{20}	0.14	1/сут	$\beta_{O2/C}$	2.67	гO ₂ /гC
θ_{PC}	1.1	–	$\beta_{O2/NT}$	4.57	гO ₂ /гN
Π_C	0.6	гC/м ³	ζ_e, ζ_i	22.0, 11.5	л/м ² ч
g_{P1}	0.	–	Q_{O2}^{Tb}	-3.5	гO ₂ /м ² сут
g_{P2}	0.5	–	ζ_o	0.07	1/°C
g_{P3}	0.3	–	T_b	8.0	°C
δ_P^{20}	0.03	1/сут	Q_{NH4}^{br}	0.05	гN/м ² сут
θ_{par}	1.1	–	Q_{PO4}^{br}	0.005	гP/м ² сут
$\beta_{N/C}$	0.205	гN/гC	ζ_{ci}	0.07	1/°C
α_N	0.	–	T_{br}	20.	°C
K_{NH4}^{20}	0.06	1/сут	k_{sw}	0.2	м/сут
θ_{NC}	1.08	–	ζ_{dn}	0.07	1/°C
ν_{12}^{20}	0.04	1/сут	T_{TNO3}	20.0	°C
θ_{NIT}	1.16	–	w_{gPOP}	0.5	м/сут
Π_{NIT}	0.5	гN/м ³	w_{gPON}	0.5	м/сут

P_{O_2}	1.0	$гO_2/м^3$	w_{gdet}	0.5	м/сут
-----------	-----	------------	------------	-----	-------

*– значение параметра в период с марта по май

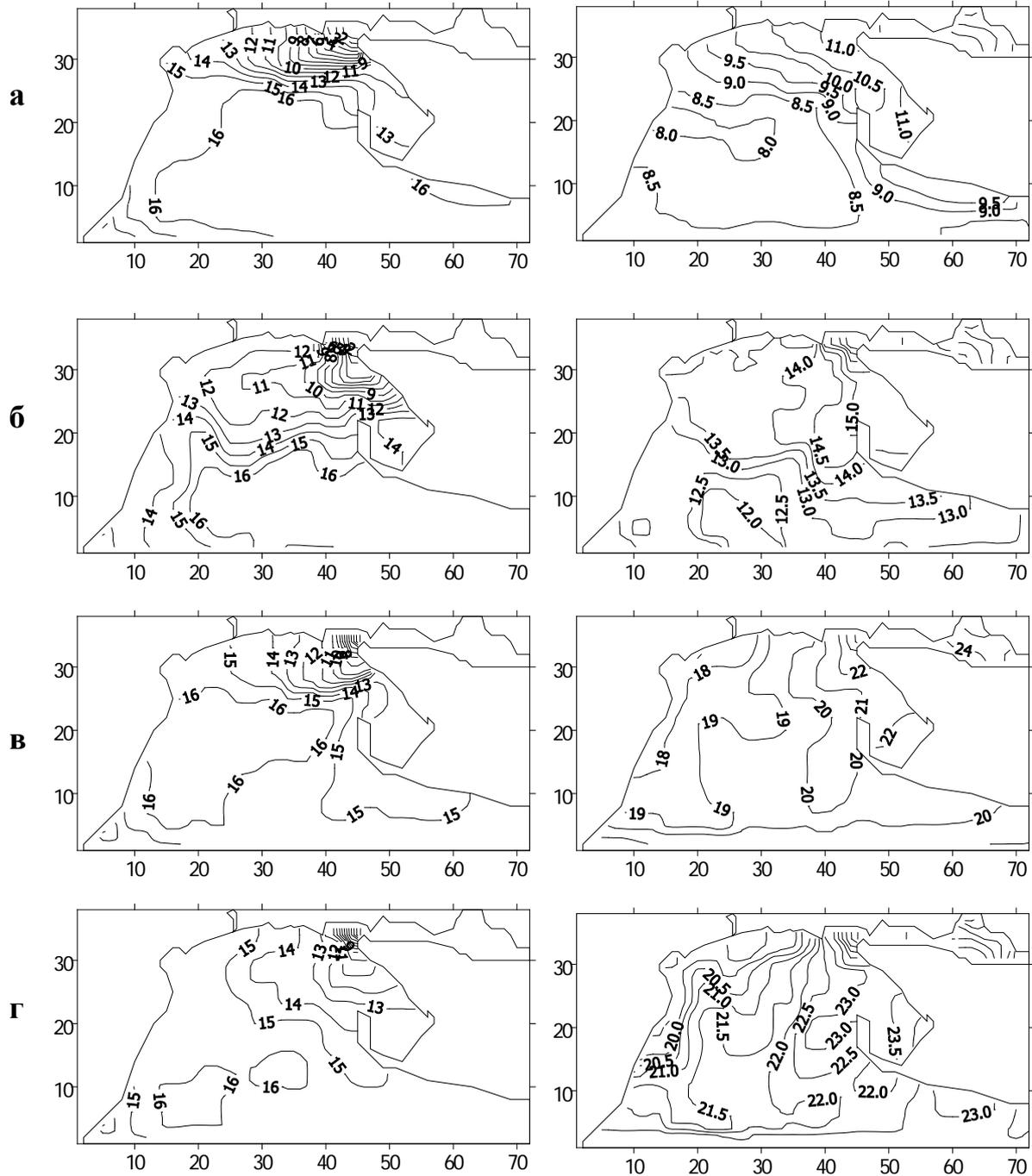


Рис. 7 Рассчитанные по модели поля солёности (слева) и температуры (справа) поверхностного слоя воды, относящие к датам: а) 30 апреля, б) 20 мая, в) 20 июля; г) 10 августа. Ветровые условия 1981 г.

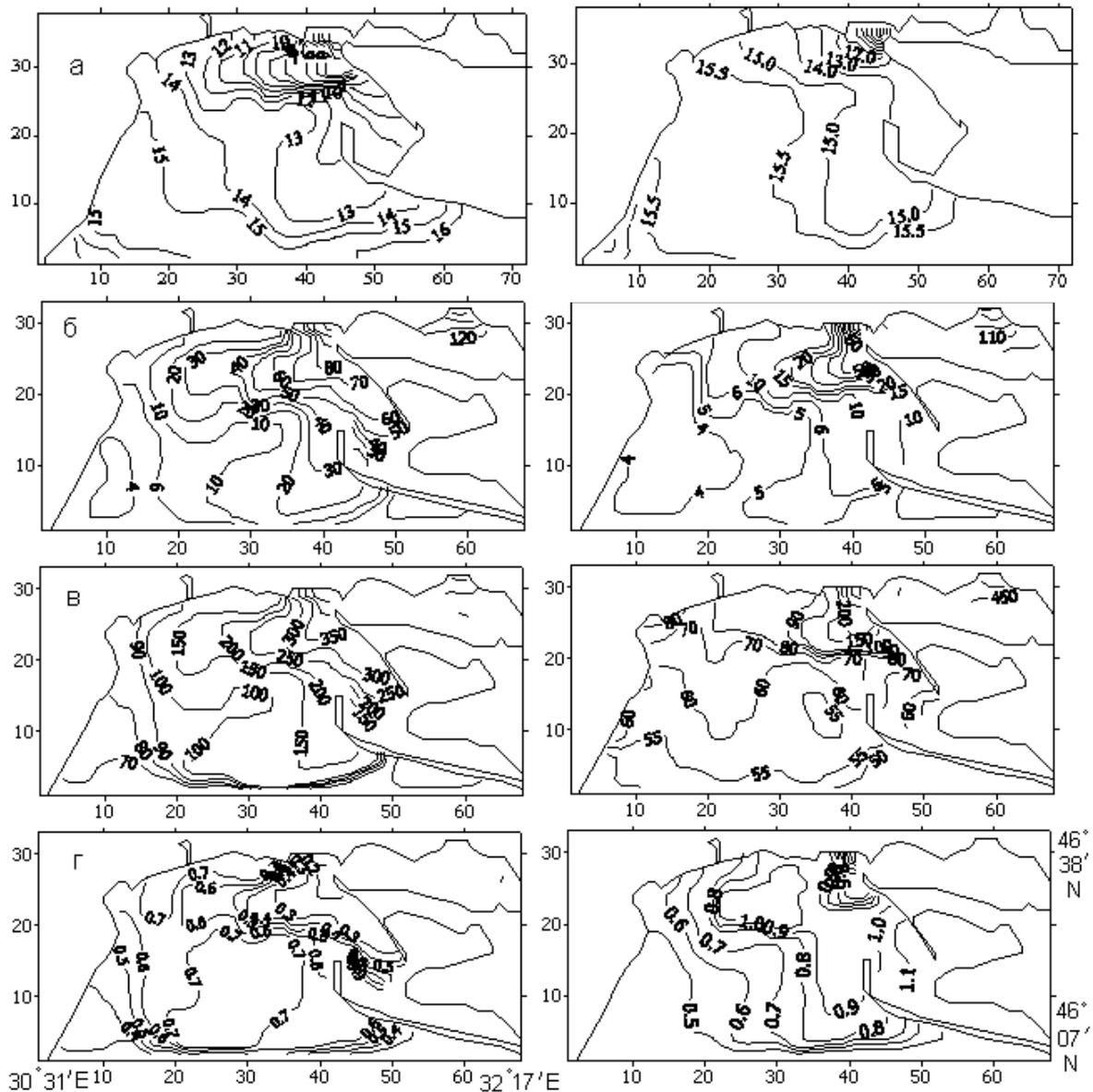


Рис. 8 Полученное в 3-мерном варианте модели пространственное распределение концентрации фосфатов (а, б), мгP/м^3 , азота аммония (в, г), мгN/м^3 , биомассы фитопланктона (д, е), гC/м^3 , для Днепроовско-Бугского района СЗЧМ в конце мая (слева) и начале августа (справа)

Расчеты пространственно-временной изменчивости термохалинной структуры вод с помощью 3-мерного варианта модели проводились на временном отрезке с начала второй декады марта до конца сентября. Отдельные результаты расчетов для метеоусловий 1981 и 1986 гг. приведены на рис. 7, 8. Видно, что модель правильно отражает основные особенности изменчивости пространственного распределения температуры и солёности воды в весенне-летний период. Весной отмечается проникновение языка распресненных вод из Днепроовско-Бугского лимана вдоль Одесской банки в Одесский район СЗЧМ, где солёность понижается до 13‰ . Второй, менее выраженный язык трансформированных речных вод распространяется на юг вдоль Тендровской косы. Летом, из-за сезонного уменьшения речного стока и развития ветрового прибрежного апвеллинга, солёность

поверхностных вод в Одесском районе увеличивается до 15 - 16 ‰. Весной распресненные воды прогреваются больше, чем морские [14]. В летний период в Одесском районе СЗЧМ отмечается прибрежный апвеллинг, сопровождающийся понижением температуры воды поверхностного слоя в прибрежной зоне моря.

На рис. 8 приведены некоторые результаты моделирования изменчивости пространственного распределения фосфатов, аммонийного азота и биомассы фитопланктона в поверхностном слое Днепровско-Бугского и Одесского районов СЗЧМ, полученные с помощью трехмерного варианта модели.

Численные эксперименты с моделью показали, что доминирующее влияние на продуктивность вод Одесского района СЗЧМ оказывает речной сток Днепра и Южного Буга. Максимумы биомассы фитопланктона соответствуют району Одесской банки и северной оконечности Тендровской косы. В Одесском районе максимальные биомассы в весенне-летний период отмечались в северной части акватории; визуально прослеживалось повышение концентраций биогенных элементов в фотическом слое у побережья, обусловленное функционированием береговых антропогенных источников загрязнения, расположенных в Одесском мегаполисе. Указанные закономерности подтверждаются данными полевых наблюдений.

Прикладное использование модели. В приведенной постановке модель качества вод использовалась для определения степени влияния речного стока и береговых антропогенных источников на сложившийся уровень трофности и загрязнения вод акватории Одесского района СЗЧМ веществами токсического действия [22, 23]. При решении задачи модельные расчеты проводились в два этапа: с учетом и без учета сбросов биогенных веществ береговыми источниками загрязнения Одесского региона. Затем результаты расчетов сравнивались и в каждой точке расчетной области определялось процентное соотношение между полученными значениями моделируемых веществ, которое характеризует вклад береговых антропогенных источников в наблюдаемые в фотическом слое их концентрации.

Использование модели позволило установить насколько экологическая ситуация в исследуемой акватории может быть управляемой на региональном уровне. Показано, что путем нормирования сбросов береговых антропогенных источников возможно существенно улучшить экологическую ситуацию лишь в районах основных выпусков сточных вод в пределах двухмильной природоохранной прибрежной зоны; нормирование сбросов биогенных веществ береговыми источниками наиболее эффективно в весенний период; предпочтительно уменьшать сбросы загрязняющих веществ, содержащих фосфор – биогенный элемент, лимитирующий первичную продукцию органического вещества; уровень трофности вод в мористой части акватории формируется под доминирующим влиянием речного стока Днепра и Южного Буга.

Модель использовалась также для поиска путей решения задачи стабилизации гидрологического и гидрохимического режимов Тузловской группы лиманов, расположенных в Дунай-Днестровском междуречье [24]. На основании модельных расчетов была решена задача оптимизации количества и размеров каналов, соединяющих лиманы с морем, с целью предотвращения чрезмерного обмеления и осолонения лиманов в маловодные годы.

Выводы. Предложенная модель качества вод обладает всеми необходимыми свойствами, позволяющими использовать ее для решения прикладных экологических задач, связанных с определением стратегии управления качеством вод прибрежных морских акваторий и лиманов северо-западной части Черного моря, в том числе - со сложными морфологическими и гидрологическими характеристиками. Численные эксперименты с моделью продемонстрировали ее работоспособность и адекватность в описании изменчивости термохалинной структуры, а также химико-биологических

показателей экологического состояния вод исследуемой акватории и ее составных частей. Модель успешно апробирована при решении ряда практических задач и может быть включена составной частью в геоинформационные и другие системы поддержки принятия решений, связанные с управлением экологическим состоянием водных объектов и акваторий северо-западной части Черного моря, подверженных сильной антропогенной нагрузке.

Литература

1. Тучковенко Ю.С., Сапко О.Ю. Оценка вклада антропогенных источников Одесского региона в загрязнение морской среды // Метеорология, климатология и гидрология.– 2003.– № 47. – С. 130-139.
2. Тучковенко Ю. С., Чугай А. В., Сапко О. Ю., Дятлов С. Е. Интегральная оценка качества вод Одесского региона северо-западной части Черного моря // Метеорология, климатология и гидрология.– 2005.– № 49. – С. 360 - 367.
3. Hess K.W. MECCA Programs documentation: Technical Report / NOAA.– NESDIS 46.– Washington, D.C., 1989.– 97 p.
4. Процессы самоочищения морских вод от химических загрязнений / Под ред. А.И. Симонова. – М.: Гидрометеиздат, Труды ГОИН.– 1983.– вып.167. – 152 с.
5. Родзиллер И.Д. Прогноз качества воды водоемов – приемников сточных вод.– М.: Стройиздат, 1984.– 263 с.
6. Cerco C.F., Cole T. User's Guide to the CE - QUAL - ICM. Three - Dimensional Eutrophication Model.-U. S. Army Corps of Engineers, Waterways Experiment Station.1995.– 150 p.
7. Ляхин Ю.И. О скорости обмена кислородом между океаном и атмосферой // Океанология.– 1980.– Т. 18, № 6. – С. 1014 - 1021.
8. Ambrose R. B., Wool T. A., Martin J. L. The Water Quality Analysis Simulation Program, WASP5. Part A: Model documentation.-USA, Environmental Research
9. Проблемы исследования и математического моделирования экосистемы Балтийского моря. Вып. 3. Моделирование компонентов экосистемы / Под ред. И.Н. Давидана, Р.В. Пяковского, О.П. Савчука.– Л.: Гидрометеиздат, ЛО ГОИН, 1987.– 255 с.
10. Моделирование процессов переноса и трансформации вещества в море / Под ред. Ю. Н. Сергеева.– Л.: Из-во Ленингр. ун-та, 1979.– 291 с.
11. Модели океанских процессов / Антонова Л. В., Бадалов А. Б., Баженова О. В. и др. / Под ред. М. Е. Виноградова, А. С. Моница, Д. Г. Сеидова.– М.: Наука, Ин-т океанологии АН СССР, 1989.– С. 252 – 309.
12. Sarmiento J. L., Slater R. D., Fashman M. J. R. and other. A seasonal three-dimensional ecosystem model of nitrogen cycling in the North Atlantic euphotic zone// Global biogeochemical cycles, vol.7, N 2, 1993.– P. 417 – 450.
13. Tufford D. L., McKellar H. N. Spatial and temporal hydrodynamic and water quality modeling analysis of a large reservoir on the South Carolina (USA) coastal plain // Ecological modelling.– 1999.– № 114.– P. 137 – 173.
14. Виноградов К. А., Розенгурт М. Ш., Толмазин Д. М. Атлас гидрологических характеристик северо-западной части Черного моря.– К.: Наукова Думка, 1966.
15. Модели океанских процессов / Антонова Л. В., Бадалов А. Б., Баженова О. В. и др. / Под ред. М. Е. Виноградова, А. С. Моница, Д. Г. Сеидова.– М.: Наука, Ин-т океанологии АН СССР, 1989.– С. 252 – 309.

16. *Ведерников В. И.* Вертикальные изменения потенциальной фотосинтетической активности морского фитопланктона // Экология морского фитопланктона.– М.: ИОАН СССР, 1981.– С. 117 – 125.
17. *Страшкраба М., Гнаук А.* Пресноводные экосистемы. Математическое моделирование: Пер. с англ.– М.: Мир, 1989.– 376 с.
18. *Виноградова Л.А., Василева В.Н.* Многолетняя динамика и моделирование состояния экосистемы прибрежных вод северо-западной части Черного моря.– СПб: Гидрометеиздат, УкрНЦЭМ, Одесса, 1992.– 107 с.
19. *Гусяков Н.Е., Теренько Г.В.* Сезонная динамика фитопланктона прибрежной зоны Одесского залива Черного моря (Украина) // Альгология.– 1999.– Т. 9, № 4.– С. 10 - 22.
20. *Нестерова Д.А., Теренько Л.М.* Фитопланктон Одесского региона в современных условиях // Экологическая безопасность прибрежной и шельфовой зон и комплексное использование ресурсов шельфа. – Севастополь, 2000. – С. 383 - 390.
21. *Павлова Е.В., Черепанов О.А.* Функционирование экосистемы / Природные условия взморья реки Дунай и острова Змеиный: современное состояние экосистемы. – Севастополь: Мор. гидрофиз. ин-т.- 1999. – С. 100 -109.
22. *Тучковенко Ю.С., Сапко О.Ю.* Эвтрофирование вод Одесского региона северо-западной части Черного моря береговыми источниками загрязнения // Вестник Одесского государственного экологического университета. – Киев: КНТ, ОГЭКУ.- 2005.- Вып.1. – С. 195 - 205.
23. Монография
24. *Гопченко Е.Д., Тучковенко Ю.С., Сербов Н.Г., Бузиян Г.Д.* Стабилизация гидрологического и гидрохимического режимов Тузовских лиманов путем регулирования водообмена с морем // // Вестник Одесского государственного экологического университета. – Киев: КНТ, ОГЭКУ.- 2005.- Вып.1. – С. 187 - 194.