

К.А.Слепчук, Т.В.Хмара

Морской гидрофизический институт РАН, г.Севастополь

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОДЕЛИ КАЧЕСТВА ВОД
ДЛЯ ОПИСАНИЯ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ ПОЛУЗАМКНУТЫХ
ВОДОЕМОВ (НА ПРИМЕРЕ СЕВАСТОПОЛЬСКОЙ БУХТЫ)**

Приведены результаты использования модели качества вод для описания экологического состояния Севастопольской бухты. Показана возможность применения оптимизационного метода для калибровки одномерного варианта биогеохимического блока модели качества вод.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: *биогеохимическое моделирование, калибровка биогеохимической модели, пассивная примесь, Севастопольская бухта*

Длительное загрязнение прибрежной полосы моря от различных источников (речной сток, хозяйственно-бытовые и ливневые стоки, стекающие с населенных, промышленных и сельскохозяйственных территорий, морской транспорт и пр.) часто приводят к необратимым воздействиям на морскую среду и представляют большую опасность для здоровья людей при использовании акватории в целях рекреации. При этом без исследования гидрологического и гидрохимического режимов прибрежных вод изучить поведение загрязняющих веществ и влияние различных источников загрязнения на экологическое состояние морской среды не представляется возможным.

Значительное превышение количества загрязняющих веществ над ассимилирующей способностью морской экосистемы приводит к химическому и биологическому загрязнению морских вод, потере биологических видов, сокращению рыбных ресурсов, снижению качества рекреационных ресурсов. При разработке стратегии улучшения качества вод исследуемой акватории необходима оценка роли каждого источника загрязнения.

В качестве одного из методов контроля качества водной среды целесообразно использовать математические модели. Задача заключается в отработке методов калибровки параметров математической модели качества морских вод, включая сбор необходимой для этого исходной информации, и приемов использования модели для получения практически значимых результатов.

Созданию математической модели, как правило, предшествует экологический мониторинг исследуемой экосистемы [1]. Для оценки интенсивности связей между компонентами экосистемы требуются гидрологические, гидрохимические, биологические, метеорологические наблюдения, которые выполняются на основе различных методик с разной точностью и дискретностью. Не всегда эти натурные наблюдения выполнены в достаточном количестве в разных точках пространства. Применение математического моделирования позволяет не только восполнить пробелы в точках отсутствия натурных данных, но и осуществить модельную оценку состояния экосистемы в условиях изменчивости ее компонентов. Кроме того, использование модели позволяет получить прогноз эволюции экосистемы при взаимном

влиянии природных и антропогенных факторов.

На начальном этапе моделирования функционирования шельфовых экосистем берется упрощенный вариант модели, который отражает изменчивость наиболее значимых компонент экосистемы [2]. Такие модели легче поддаются калибровке и верификации, а получаемые с их помощью результаты могут быть однозначно проинтерпретированы с точки зрения изучения причинно-следственных связей.

Комплексные многоцелевые пространственно-разрешающие модели качества морских вод состоят из следующих блоков: численная гидродинамическая модель, блок переноса примеси, блок самоочищения от загрязняющих веществ, блок эвтрофикации и кислородного режима.

Для прогноза динамики экологических параметров среды в данной работе использовалась модель качества вод *MECCA (Model for Estuarine and Coastal Circulation Assessment)* [3].

В соответствии с принципом осреднения, модель может иметь различную пространственно-временную разрешающую способность. Расчет с использованием трехмерной прогностической модели водной экосистемы требует значительных затрат машинного времени. Поэтому на начальном этапе используется одномерный (с разрешением по вертикали) вариант, где все данные натурных измерений осреднены по пространству и времени и привязаны к точке и к моменту середины каждого месяца. Глубина в этой точке принималась равной средней по бухте.

В связи с достаточно большими расхождениями данных, рассчитанных по модели, и натурных данных был применен оптимизационный метод Хука-Дживса. Это метод прямого поиска минимума функционала, состоящий из последовательности шагов исследующего поиска вокруг базисной точки, за которой в случае успеха следует поиск по образцу [4]. Блок эвтрофикации модели состоит из системы 18 дифференциальных уравнений. Для примера здесь приведено уравнение биомассы фитопланктона для локальной точки пространства, которое выглядит следующим образом:

$$\left. \frac{dB_f}{dt} \right|_{local} = (\sigma_f - \varphi_f - \mu_f) B_f,$$

где

$$\sigma_f = V_f^{\max} f_1(I) f_2(C_N, C_{PO4}) f_3(T),$$

$$f_1(I) = \frac{1}{\Delta z} \int_{z_i}^{z_{i+1}} f_z(I_z) dz = \frac{2,718 f_d}{\Delta z \alpha} [\exp(-R_{z_i}) - \exp(-R_{z_{i+1}})]$$

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

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

$$f_2(C_N, C_{PO4}) = \min\left\{\frac{C_N}{\Pi_N + C_N}, \frac{C_{PO4}}{\Pi_{PO4} + C_{PO4}}\right\}, \quad \text{где } C_N = C_{NH4} + C_{NO3}.$$

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

$$\varphi_f = \varphi_r e^{\zeta_\varphi(T-T_r)}, \quad \mu_f = \mu_r e^{\zeta_\mu(T-T_r)}.$$

где B_f – биомасса фитопланктона, мгС/м³; t – время, ч; γ_f – доля продукции фитопланктона, идущая на обеспечение его жизнедеятельности (дыхание); μ_f – удельная скорость естественной смертности и выедания фитопланктона, 1/ч; H – глубина, м; σ_f – удельная скорость роста фитопланктона, 1/ч, определяемая условиями освещенности I и наличием в воде биогенных веществ – минеральных форм азота C_N и фосфора C_{PO_4} ; I_a – средний за световой день поток ФАР, проникающий через поверхность моря, Вт/м²; f_d – доля светового дня в сутках ($0 \leq f_d \leq 1$); φ_f – удельная скорость метаболизма (дыхания), 1/сут; 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 ; φ_r – удельная скорость метаболизма водорослей при температуре T_r , 1/сут; ζ_φ – коэффициент влияния температуры на скорость метаболизма; 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

В уравнения блока эвтрофикации модели включены параметры (удельные скорости химико-биологических процессов) и коэффициенты в эмпирических уравнениях, описывающих изменчивость значений этих параметров в зависимости от характеристик среды и внешних факторов. Осуществляется анализ чувствительности модели к вариациям ее параметров и факторам внешней нагрузки. Такой анализ проводится по каждому параметру p_k в отдельности. Основан он на том, что диапазон возможных изменений параметра установлен на этапе прекалибровки (анализ данных литературных источников о скоростях химико-биологических процессов) или в ходе специальных экспериментов. Далее, варьируя эти параметры в рамках возможного диапазона их изменчивости, проводится попытка достижения максимального соответствия модельных результатов и данных наблюдений, используя минимизацию суммы квадратов отклонений данных, рассчитанных по модели, и натурных данных.

Химико-биологический блок (блок эвтрофикации) используется для расчета функции неконсервативности $F_i(\vec{C}, x, y, z, t)$ для веществ, трансформация которых в каждой локальной точке пространства осуществляется химическим, физико-химическим, биохимическим либо биологическим путем. В самом общем виде модель блока эвтрофикации можно задать в следующем выражении: $y = f(x, p)$.

Для того чтобы найти набор параметров p , который будет максимально приближать множество моделируемых данных $\{y_m\}$ к множеству экспериментальных данных $\{y_e\}$, нужно минимизировать значение

$$E(P) = \sum_{i=1}^n (Y_m(i) - Y_e(i))^2.$$

В данной работе было проведено моделирование годовой динамики экологических параметров в акватории Севастопольской бухты.

Севастопольская бухта является гаванью для военных и торговых судов, зоной активного судоходства и проведения гидротехнических работ, что приводит к нарушению существующих равновесий. Эта ситуация существенно усугубляется тем, что водообмен между бухтой и открытым морем затруднен вследствие сооружения в 1976 – 1977 гг. защитного мола.

Выполненные гидролого-гидрохимические наблюдения показали [5, 6], что вследствие длительного антропогенного воздействия на полузамкнутую акваторию бухты наступили устойчивые изменения основных режимобразующих факторов – речного стока (в восточной части бухта принимает воды реки Черной) вследствие зарегулирования, а также постоянного загрязнения акватории при сбросе сточных и ливневых вод. На гидрохимический режим эти негативные изменения действуют следующим образом:

- изменения естественного режима растворенного кислорода и его насыщенности – нарушается его сезонный характер;
- накопления в воде биогенных элементов до концентраций, которые превышают характерные для открытых вод моря уровни на порядок;
- перестройки внутриводоёмных процессов, что выражается в появлении резких экстремумов гидрохимических параметров между поверхностными и придонными слоями вод, накоплении биогенных веществ и изменении направленности окислительно-восстановительных процессов в придонном слое.

Используя описанный оптимизационный метод, были получены значения параметров и коэффициентов химико-биологического блока модели (таблица), динамика фитопланктона (рис.1) и других экологических параметров.

Любые изменения в темпах развития фитопланктонных сообществ влияют на процессы жизнедеятельности в морской экосистеме в целом. Поэтому первым шагом в моделировании экосистемы Севастопольской бухты является моделирование динамики фитопланктона.

Натурные данные по фитопланктону изменялись от 0,015 гС/м³ в марте до 0,236 гС/м³ в октябре. Модельные данные – от 0,011 гС/м³ в апреле до 0,235 гС/м³ в октябре. Максимум биомассы фитопланктона в октябре в натурных данных объясняется «цветением» крупноразмерной диатомеи *Cerataulina pelagica* (Cl.) Hend и *Nitzschia tenuirostris* Gran [7].

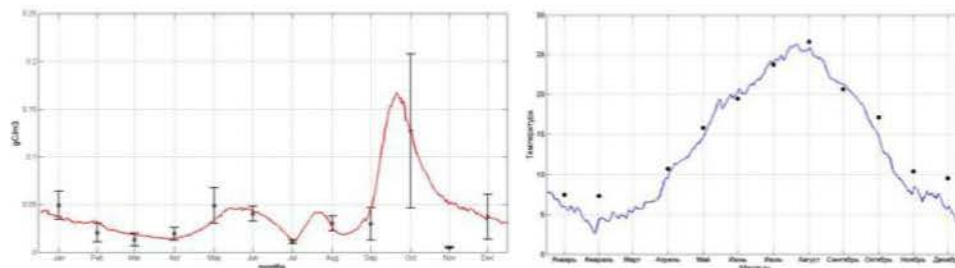
Ключевым экосистемным критерием качества водной среды загрязненных морских акваторий является внутригодовая динамика содержания растворенного в морской воде кислорода. Сезонное распределение кислорода в бухте определяется двумя главными природными факторами: климатическими (температурный режим и гидродинамика вод) и биологическими. Поверхностные слои значительно насыщаются кислородом. Прослеживается связь кислорода с температурой: при высоких температурах воды интенсивность окислительных процессов усиливается и понижается растворимость кислорода.

Результаты калибровки одномерного варианта модели позволяют использовать полученный набор эмпирических коэффициентов в трехмерном варианте модели.

Т а б л и ц а . Значения коэффициентов химико-биологического блока модели для севастопольской бухты, определенные в результате калибровки.

параметр	обозначение	значение	размерность
максимальная удельная скорость роста фитопланктона	V_f^{max}	0,78 (0,92) ¹ (1,0) ²	1/сут
коэффициенты, определяющие характер влияния температуры на рост водорослей в диапазонах выше и ниже T_m	ϵ_1	0,006 (0,004) ²	1/°C ²
	ϵ_2	0,004 (0,008) ¹ (0,006) ²	
оптимальная для роста водорослей температура воды	T_m	7 (17) ¹ (23) ²	°C
константы полунасыщения интенсивности процесса утилизации фитопланктоном минеральных соединений азота и фосфора	Π_N	0,023	гN/м ³
	Π_{PO_4}	0,0023	гP/м ³
удельная скорость метаболизма водорослей при температуре T ,	φ	0,05	1/сут
скорость гравитационного осаждения клеток фитопланктона	w_{gf}	0,7	м/сут

Примечание: индекс «1» указывает на период с 46 по 198 день расчетного года; индекс «2» – с 199 по 290 день расчетного года.



Р и с . 1 . Годовая динамика биомассы фитопланктона и температуры поверхностных вод Севастопольской бухты по данным моделирования.

Исследования показали, что гидрологический режим бухты является важнейшим фактором формирования экосистемы полузакрытой акватории, подверженной антропогенному воздействию.

Динамический режим в акватории бухты рассчитывался при использовании гидродинамического блока численной трехмерной нестационарной модели *MECCA* [3]. Расчетная область акватории бухты, к которой была адаптирована модель, аппроксимировалась горизонтальной сеткой 47 × 97 узлов с шагом 80 м. В качестве граничных условий используются данные об атмосферных факторах (температуре воздуха, скорости и направлении ветра, осадках и т.п.), поверхностной температуре воды и уровне моря, получен-

ные на ГМС «Севастополь», расположенной в «центре» бухты на м. Павловский, а также данные о средних расходах втекающей в бухту р.Черной (расход 2,3 м³/с, скорость потока 0,2 м/с).

Моделирование при стационарном ветре показало, что прямой поток из бухты в поверхностном слое вод формируется под воздействием восточного ветра, также сохраняется при северном и южном ветрах. Это объясняется ориентацией, морфометрией бухты и поступлением в её вершину пресных вод, создающих уклон водной поверхности и обуславливающих стоковые течения. В придонном слое картина идентична при всех направлениях ветра: поток направлен в бухту через пролив и сохраняется по всей протяженности бухты, на отмелях участках наблюдаются разного рода циркуляционные образования.

Для исследования влияния ливневых и канализационных сбросов, поступающих в бухту со стоком реки Черная, на формирование качества вод в бухте модель была дополнена блоком самоочищения морских вод от загрязняющих веществ антропогенного происхождения. Расчеты проводились на примере патогенных микроорганизмов – наиболее распространенном типе загрязняющих веществ, которые могут поступать с неочищенными сточными водами, смываются с территории водосбора рек при сильных дождях, паводках, и уровень очистки которых является неудовлетворительным. Они относятся к «биологически мягким» загрязняющим веществам.

При расчетах учитывалось самоочищение вод от указанного типа загрязняющих веществ в результате процессов их физической, химической и биологической трансформации. Деструкция и деградация загрязняющего вещества в водной среде описывались уравнением реакции 1-го порядка

$$F_i = \frac{dC_i}{dt} \Big|_{local} = -K_{ci}C_i,$$

где F_i – функция неконсервативности i -ой примеси в уравнении переноса; K_{ci} – коэффициент неконсервативности (деструкции), который является удельной скоростью трансформации в результате совокупности действий физико-химических и химико-биологических процессов самоочищения вод без детализации их вклада.

Удельная скорость деструкции патогенных микроорганизмов группы кишечной палочки (коли-формы (*Coliforms*) – аналог коли-индекса), согласно с [8], определялась зависимостью вида $K_{coli} = k_n \rho_S^{(S)} \rho_T^{(T-20)}$, где k_n – скорость гибели коли-форм в темноте при температуре воды 20 °С и солености 0 ‰ ($k_n \approx 0,8 \text{ сут}^{-1} \approx 0,033 \text{ ч}^{-1}$); $\rho_S^{(S)}$, $\rho_T^{(T-20)}$ – поправочные коэффициенты на термohалинные условия *in situ*, где $\rho_S = 1,006$ и $\rho_T = 1,07$.

Рассматриваемое загрязняющее вещество можно считать примесью нейтральной плавучести, его концентрация в речных водах считалась равной 100 условным единицам (процентам).

Результаты расчетов приведены на рис.2. При ветре западных румбов происходит запираение загрязненных вод в кутовой части бухты. В придонной области загрязненные воды занимает гораздо меньшую площадь. При ветрах восточных румбов продвижению загрязненных вод в основную часть Севастопольской бухты способствуют ветер сгонных направлений.

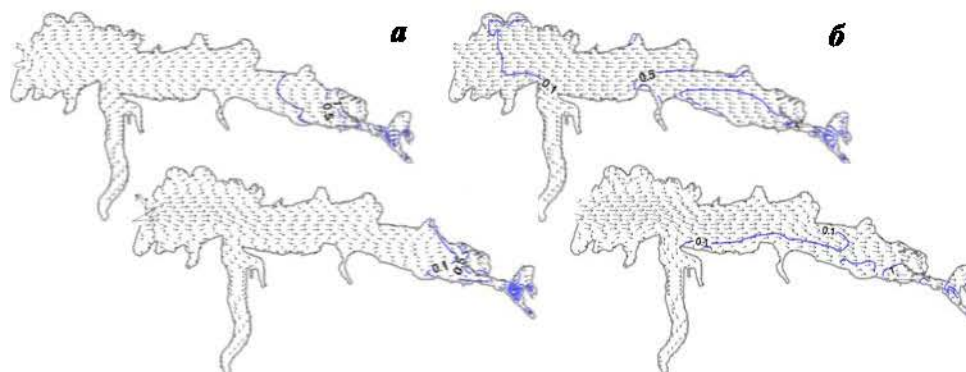


Рис. 2. Схема течений и уровень загрязнения вод Севастопольской бухты патогенными микроорганизмами (в % от концентрации в источнике), которые поступают в кутовую часть на поверхности (вверху), на дне (внизу) при западном (а) и восточном (б) ветрах 10 м/с.

Выводы. Примененный в работе метод оптимизации Хука-Дживса позволил откалибровать биогеохимический блок модели *MECCA*. Модель в одномерном варианте хорошо воспроизводит годовую динамику экологических параметров. Также трехмерный вариант гидродинамического блока модели использовался для моделирования структуры циркуляции в Севастопольской бухте. Был выявлен ряд особенностей полей течений, присущих данной области. В формировании циркуляции определяющую роль играют рельеф дна и направление ветра, течения имеют существенно трехмерный характер.

Установленные при калибровке значения параметров и коэффициентов биогеохимического блока могут быть использованы в качестве исходных при калибровке трехмерного варианта модели качества вод бухты.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Жулько Л.М., Иванов В.А., Ильин Ю.П. и др. Система экологического мониторинга морской среды Севастопольского региона: обоснование и организационная концепция // Глобальная система наблюдения Черного моря. Фундаментальные и прикладные аспекты. – Севастополь: Аквавита, 2000. – С.109-118.
2. Беляев В.И. Моделирование морских систем. – Киев: Наук. думка – 1987. – 204 с.
3. Иванов В.А., Тучковенко Ю.С. Прикладное математическое моделирование качества вод шельфовых морских экосистем. – Севастополь: ЭКОСИ-Гидрофизика, 2006. – 368 с.
4. Банди Б. Методы оптимизации. Вводный курс: Пер. с англ. – М.: Радио и связь, 1988. – 128 с.
5. Иванов В.А., Овсяный Е.И., Репетин Л.Н., Романов А.С., Игнатъева О.Г. Гидролого-гидрохимический режим Севастопольской бухты и его изменения под воздействием климатических и антропогенных факторов / Препринт. – Севастополь: ЭКОСИ-Гидрофизика, 2006. – 90 с.
6. Лопухин А.С., Овсяный Е.И., Романов А.С., Ковардаков С.А., Сысоева И.В. и др. Сезонные особенности гидролого-гидрохимической структуры вод Севастопольской бухты, микрошланктон и распределение его биохимических компонентов (Черное море, наблюдения 2004 – 2005 гг.) // Экологическая безопасность

прибрежных и шельфовых зон и комплексное использование ресурсов шельфа.– Севастополь: ЭКОСИ-Гидрофизика, 2007.– вып.15.– С.74-109.

7. *Лопухина О.А., Манжос Л.А.* Фитопланктон Севастопольской бухты (Черное море) в теплый и холодный периоды 2001 – 2002 гг. // Экология моря.– 2005.– вып.69.– С.25-31
8. *Mancini J.J.* Numerical estimation of coliform mortality rates under various conditions // J. Water Pollution Control Federation.– 1978.– v.50.– P.2477.

Материал поступил в редакцию 12.02.2016 г.
После доработки 19.11.2016 г.

К.А.Слепчук, Т.В.Кхмара

**USING THE WATER QUALITY MODEL FOR DESCRIPTION
OF ECOLOGICAL STATE OF SEMI-ENCLOSED WATER AREA
(THE SEVASTOPOL BAY AS AN EXAMPLE)**

The water quality model for describing the ecological state of the Sevastopol Bay is used. The optimization method to calibrate one-dimensional biogeochemical block of the water quality model is applied.

KEYWORDS: biogeochemical simulation, calibration of biogeochemical model, passive impurity, the Sevastopol Bay