

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНОЙ ИМИТАЦИОННОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ПРОЦЕССОВ БИОТРАНСФОРМАЦИИ СОЕДИНЕНИЙ АЗОТА, ФОСФОРА И ДИНАМИКИ РАСТВОРЕННОГО В ВОДЕ КИСЛОРОДА В ЭКОСИСТЕМЕ НЕВСКОЙ ГУБЫ ФИНСКОГО ЗАЛИВА. 1. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ¹

© 2013 г. К. А. Подгорный*, А. В. Леонов**

*Институт биологии внутренних вод РАН

152742 пос. Борок Некоузский р-она Ярославской обл.

E-mail: kap@ibiw.yaroslavl.ru

**Институт океанологии РАН

117997 Москва, Нахимовский проспект, 36

E-mail: leonov@ocean.ru

Поступила в редакцию 21.06.2011 г.

Рассмотрена пространственно-неоднородная имитационная модель экосистемы Невской губы Финского зал., дана характеристика ее основных блоков и применяемых численных методов. Сформулированы основные положения, которые использованы при разработке биогидрохимического блока математической модели для адекватного описания процессов совместной трансформации форм N и P – важнейших для экосистемы Невской губы биогенных элементов, а также режима изменения концентраций растворенного O₂ в водной среде. Показано, каким образом в имитационной модели формализованы важнейшие регуляторные механизмы, которые обеспечивают структурную и функциональную устойчивость экосистемы. При разработке модели открытой водной системы ставилась задача необходимости совместного моделирования динамики компонентов биологической системы и среды ее функционирования на основе синтеза гидробиологических, гидрохимических и гидрофизических знаний об экосистеме Невской губы.

Ключевые слова: экосистема, биогенные элементы, гетеротрофный бактериопланктон, фитопланктон, зоопланктон, детрит, трофическая цепь, математическое моделирование, экологическая имитационная модель Невской губы (Финский зал.)

DOI: 10.7868/S0321059613020065

Невская губа Финского зал. – сложная водная экосистема (и для проведения натурных экологических исследований, и для разработки математических моделей). Своеобразие Невской губы обусловлено рядом причин: на формирование ее водной массы оказывает значительное влияние Ладожское оз., воды которого со стоком р. Невы поступают в Невскую губу в объеме ~2400–2500 м³/с [6, 8, 9, 15, 16, 26, 28–32]; кратность годового водообмена за счет притока речных вод равна 66, что обеспечивает обновление воды в ней в среднем за 5–6 сут, а в центральной транзитной зоне –

почти вдвое быстрее [6–9]. Невская губа – мелководная акватория с преобладающими глубинами 3–5 м, интенсивным ветровым перемешиванием водных масс, разнообразными внутриводоемными процессами биогидрохимической трансформации биогенных веществ (БВ) [6, 8, 9, 30]; она находится под сильным влиянием Балтийского моря, что сказывается на изменении солености и температуры воды (T_w), колебаниях ее уровня и преобразованиях структуры биологических сообществ; ее отличает высокая техногенная нагрузка на окружающую среду [1, 6–9, 15–17, 24, 26, 28–30, 32, 34], а на ее экосистему оказывает влияние стро-

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 09-05-13510-офи_ц).

ящийся комплекс водозащитных сооружений (КЗС) г. Санкт-Петербурга от наводнений [7, 10, 18].

Вследствие совместного действия перечисленных и ряда других биотических и абиотических факторов, значимость которых может существенно меняться во времени, Невской губе свойственна чрезвычайно высокая пространственно-временная изменчивость качества воды. Тем не менее можно говорить о вполне определенной иерархии основных процессов, формирующих неоднородное распределение всех компонентов ее экосистемы. Так, сток р. Невы задает основной общий вклад в водную, биогенную и техногенную нагрузку на водную экосистему в разные периоды времени. Далее в зависимости от текущей гидрометеорологической ситуации в Невской губе формируется определенная структура течений с наличием характерных гидрологических зон, разнонаправленных и разномасштабных вихревых образований, а также условия турбулентного обмена, которые обеспечивают перенос тепла, химических и биотических компонентов экосистемы, формируют неравномерное их распределение и перераспределение по всей акватории. Внутри этих зон создаются локальные условия (температурные, световые и другие), которые вносят свой вклад в формирование скоростей биогидрохимических процессов и влияют на направленность трансформации БВ и развитие биомасс гидробионтов.

Для многих важных показателей качества воды Невской губы очень непросто выявить характер их временной динамики и установить те или иные статистически значимые и устойчивые закономерности. Это можно сделать только лишь при системном рассмотрении комплекса химических, физических и биологических процессов. Однако существующая на данный момент временная дискретность при проведении гидрологических, гидрохимических и особенно гидробиологических мониторинговых наблюдений и перечень измеряемых при этом характеристик водной среды совершенно недостаточны ни для всесторонней оценки состояния экосистемы Невской губы, ни для определения тенденций ее изменения в будущем, ни для разработки системы моделей для описания комплекса процессов в экосистеме Финского зал. в целом. Однако при использовании модельных численных экспериментов можно ответить на ряд вопросов (в том числе и методических), которые требуют проведения широких натуральных наблюдений и лабораторных экспериментов.

К настоящему времени уже имеется определенный опыт разработки математических моделей различного типа и назначения, создания интегрированной системы поддержки принятия решений при управлении водными ресурсами г. Санкт-Петербурга и Ленинградской области [2, 3, 5, 8, 14, 16, 19, 22, 25, 27, 32–38]. Тем не менее пока еще преждевременно говорить о создании полноценной модели экосистемы Невской губы, способной служить инструментом для изучения ряда практических экологических задач.

Цель данной работы – предложить на основе всестороннего системного анализа данных наблюдений и сведений об источниках БВ структуру имитационной пространственно-неоднородной модели экосистемы Невской губы, затем путем численных экспериментов исследовать наиболее важные закономерности трансформации и круговорота соединений N, P и динамики растворенного в воде O₂, оценить адекватность этой модели, а также рассчитать продукционный потенциал экосистемы Невской губы.

ОПИСАНИЕ СТРУКТУРЫ МОДЕЛИ И ПРИМЕНЯЕМЫХ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ

Структура модели формировалась так, чтобы можно было использовать данные стандартных многолетних мониторинговых наблюдений, которые регулярно проводятся на постоянной сетке станций в пределах акватории Невской губы. Эти данные используются также для подбора параметров имитационной модели и проверки адекватности модельных экспериментов. В имитационной модели экосистемы Невской губы выделено, разработано и программно реализовано несколько основных блоков [20, 21, 23].

Гидродинамический блок используется для расчета нестационарной, пространственно неоднородной и осредненной по вертикали структуры течений. Воды Невской губы почти всегда перемешаны до дна, в ней отсутствует выраженный термоклин и имеет место относительная вертикальная однородность (однослойная структура) течений. Поэтому при моделировании пространственно-временной структуры течений использовано приближение теории “мелкой воды”. Значения средних по глубине составляющих скорости течения определяются в результате численного интегрирования системы уравнений Сен-Венана (без учета турбулентного перемешивания). Для получения численного решения использовалась

C-сетка Аракавы и неясная, разнесенная по пространству и времени разностная схема с применением метода переменных направлений [4, 21, 23, 37]. Вычисления полей течений в модели проводились на равномерной прямоугольной сетке (с размером шага 500×500 м). Временной шаг при численном интегрировании разностных уравнений для обеспечения устойчивости вычислений был выбран равным 30 с. Общее число узлов расчетной сетки — 53×36 .

Поля течений вычислялись для свободного ото льда периода — от даты очищения Невской губы ото льда до 31 октября. Скорость и направление ветра задавались по данным срочных метеонаблюдений (осреднены за сутки), и они в каждой точке сеточной области для конкретного момента времени были приняты одинаковыми.

Гидротермический блок необходим для расчета фотопериода, составляющих теплового баланса и температурного режима водоема. Для моделирования пространственно-временной динамики полей средней по вертикали T_w используется уравнение теплопроводности [21, 24]. Из этого уравнения следует, что эволюция поля T_w водоема определяется адвективным переносом тепла, турбулентной диффузией, а также процессами теплообмена между водоемом, атмосферой и деятельным слоем донных отложений. При построении численной схемы на всей твердой границе, в створах вытекающих рек и на открытой границе при направлении движения воды за пределы расчетной области в качестве граничного задавалось условие равенства нулю производной по направлению внешней нормали к границе водоема. На открытой границе при направлении движения воды внутрь расчетной области ставилось первое краевое условие. В створах втекающих рек задавалось значение T_w втекающей реки в данный момент времени.

Задача моделирования термического режима Невской губы решается в два основных этапа. Сначала на заданном шаге по времени τ проводится численное интегрирование системы уравнений гидродинамики (для “мелкой воды”). В результате этого определяются значения средних по глубине составляющих скорости течения. Затем на том же временном интервале интегрируется уравнение теплопроводности. При этом применяются схемы “расщепления” по физическим процессам и пространственным координатам [21]. В результате решения этой задачи находят пространственное распределение средней по вер-

тикали T_w в пределах расчетной области к концу заданного шага по времени. Схемы численного интегрирования указанных выше уравнений, методика расчета фотопериода, тепловых потоков на поверхности водоема при различных условиях стратификации приводного слоя воздуха и варианты расчета потока тепла на дне водоема подробно рассмотрены в [20, 21].

Расчет полей T_w , как и расчет течений, проводился на той же равномерной прямоугольной сетке с размером шага 500×500 м. Временной шаг при численном интегрировании разностных уравнений составлял 120 с. Вычисления полей T_w , как и полей течений, выполняются от момента очищения акватории губы ото льда до 31 октября. Начальное значение T_w по всей акватории было равно 0.5°C . При выполнении расчетов в соответствующих узлах расчетной сетки задавался известный из наблюдений временной ход T_w в реках. Для аппроксимации имеющихся данных наблюдений за T_w в реках применялась процедура построения сплайнов с “растяжением” [20].

Расчеты тепловых потоков в приводном слое атмосферы проводились на основе многолетних данных стандартных срочных метеорологических наблюдений Санкт-Петербургской ГМО в предположении равновесной стратификации приводного слоя воздуха. Для перехода от значений метеорологических элементов, измеренных над сушей, к их значениям над водной поверхностью в каждом узле расчетной сетки дополнительно решается задача о трансформации воздушной массы под влиянием изменений теплофизических свойств подстилающей поверхности. Это необходимо для более точного расчета величин турбулентных потоков тепла и влаги.

Изменение гидрометеорологических параметров во входных данных для расчетов в рамках гидродинамического и гидротермического блоков модели задается в начале каждых новых суток модельного времени [21].

Гидрооптический блок используется для расчета оптических характеристик водной толщи. Для этого используется ряд эмпирических зависимостей, которые были получены на основе данных натуральных измерений непосредственно в Невской губе [15]. Методика расчета коэффициента экстинкции света рассмотрена в [21]. С помощью данного блока модели также можно изучать пространственно-временную динамику ряда других показателей состояния водной среды (в том числе

сестона — одного из наименее изученных компонентов водной среды).

Уравнения модели для гидродинамического, гидротермического и гидрооптического блоков, а также граничные условия представлены в Приложении.

Биогидрохимический блок включает в себя описание совместной трансформации форм N и P (важнейших для экосистемы Невской губы биогенных элементов), поступающих в эту акваторию со сточными водами и речным стоком, а также режим изменения концентраций растворенного O_2 в водной среде. Полнота описания трансформации форм указанных элементов в разрабатываемой модели определяет потенциальные возможности ее использования в будущих исследованиях условий функционирования экосистемы Невской губы. Прежде всего модель должна включать в себя весь известный спектр БВ указанных элементов, а также основных представителей сообщества микроорганизмов, обитающих в водной среде и участвующих в трансформации форм N и P в естественных условиях. Поэтому в модель было решено включить 17 переменных состояния водной среды: концентрации растворенных фракций органического N (DON) и P (DOP); минеральных форм P (DIP) и N (аммония (NH_4^+), нитритов (NO_2^-) и нитратов (NO_3^-)); взвешенных форм N и P — в составе детрита (ND и PD) и биомасс гидробионтов: гетеротрофного бактериопланктона (BN и BP), фитопланктона (FN и FP), простейших (PRN и PRP) и зоопланктона (ZN и ZP); а также растворенный в воде O_2 . Структура взаимодействия переменных показана схематично на рисунке. Это взаимодействие осуществляется в естественных условиях под совместным влиянием природных и антропогенных факторов.

Возможности практического применения модели (в частности — изучения с ее помощью актуальных водно-экологических проблем качества природных водных ресурсов) во многом определяются формализацией процессов собственно совместной трансформации форм N и P.

Опыт разработки большинства экологических моделей и их применения показывает, что комплексные экологические проблемы качества природных вод практически невозможно исследовать на основе моделей, строящихся на традиционно используемых принципах описания процессов трансформации БВ кинетическими уравнениями I-го порядка или уравнениями в форме Михаэлиса—Ментен—Моно для отдельных БВ. Такие мо-

дели не могут описать переходные состояния водных экосистем (от олиго- к мезо- и далее к более высокому трофическому их статусу), которые претерпевают водоемы при антропогенных воздействиях (например, при сбросах загрязненных сточных вод) или в локальных районах, находящихся под периодическим влиянием речных стоков. Смена состояния водных экосистем типична и в естественных условиях, в частности при переходе от весеннего активного развития планктона к летнему заторможенному его функционированию из-за дефицита БВ.

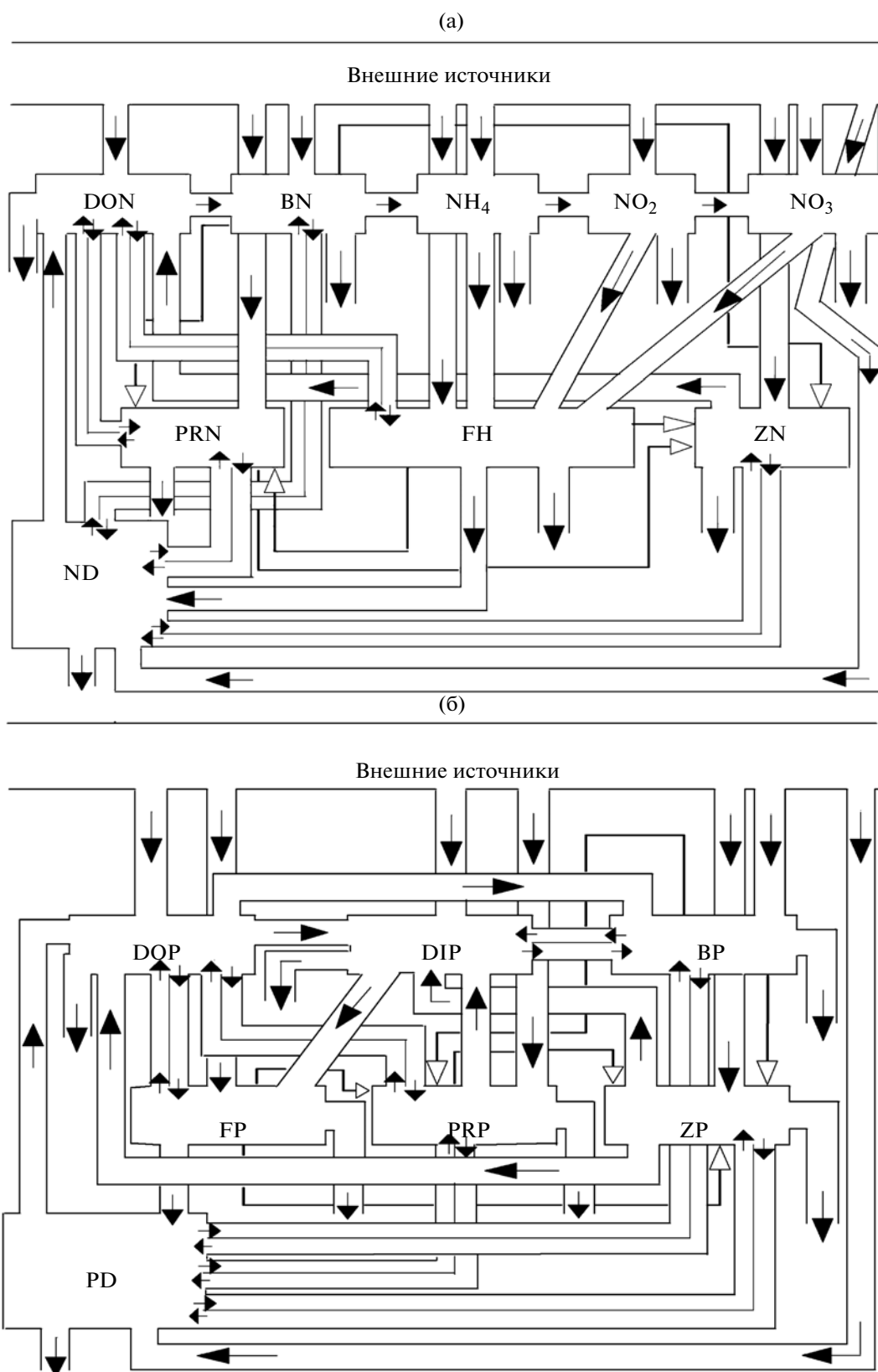
Между тем приемы совершенствования в описании биохимических процессов в экологических моделях известны, они использованы в данной модели и основываются на следующих постулатах [11–13]:

— трансформация БВ в водной среде формализуется на основе имеющихся представлений о процессах их круговорота: образование живой биомассы микроорганизмов сопровождается одновременным потреблением ими отдельных БВ, выделением продуктов обмена веществ и формированием детрита;

— удельные скорости потребления микроорганизмами отдельных БВ определяются содержанием имеющихся в водной среде субстратов, приходящихся на единицу биомассы рассматриваемого гидробионта; эти скорости регулируют внутренние потоки вещества в процессе образования биомассы и определяют их активности по метаболическим выделениям продуктов обмена веществ и образованию детрита;

— водная среда экосистемы полисубстратна и содержит смесь субстратов; потребляемые микроорганизмами субстраты подразделяются на взаимозаменяемые (соединения одного элемента) и невзаимозаменяемые (соединения разных элементов); содержание форм разных элементов влияет на итоговую кинетику процессов утилизации разных субстратов микроорганизмами;

— воспроизводятся переходные процессы формирования биомасс микроорганизмов и изменения концентраций БВ (органических и минеральных), что фактически отражает реакцию экосистемы на внешние воздействия, передаваемые информацией об изменении факторов состояния водной среды (водный режим, T_w , освещенность и прозрачность водной среды, биогенная нагрузка), каждый из которых влияет на условия формирования биомасс микроорганизмов, участвующих в трансформации БВ;



Структура циклов форм N (а) и P (б) биогидрохимического блока имитационной модели Невской губы Финского зал. Стрелки – направления потоков веществ и трофических взаимодействий между выделенными биотическими компонентами экосистемы.

— для каждого выделенного участка водной экосистемы оцениваются мгновенные переходные состояния в скоростях изменения и значениях концентраций БВ и биомасс микроорганизмов в зависимости от внешних воздействий, определяемых значениями факторов среды обитания и антропогенным воздействием;

— результаты расчетов на модели позволяют выявить особенности внутригодовой динамики биомасс и концентраций БВ в зависимости от комплекса океанологических условий для описания развития процессов трансформации БВ в изучаемых акваториях экосистемы по достаточно полному набору расчетных характеристик (скорости отдельных процессов, внутренние и внешние потоки веществ, их баланс, биогенная нагрузка).

Эти особенности описания биохимических процессов свидетельствуют об оригинальности разработанной модели и отличают ее от многих других экологических моделей.

В естественной водной среде присутствуют органические и минеральные соединения N и P (рисунки). Различные микроорганизмы потребляют их и своими прижизненными выделениями, а также образованием детрита они влияют на состав компонентов водной среды [12]. Круговорот БВ описывает наиболее важные взаимодействия между химическими и биологическими компонентами водной экосистемы и, в частности, экосистемы Невской губы.

Специфика роста биомассы микроорганизмов с точки зрения полисубстратности среды заключается в том, что субстраты акцептируются и конвертируются различными ферментными системами. Стадии взаимодействия субстратов с активным центром фермента разделены. При этом весьма вероятно наличие хотя бы одной необратимой стадии между точками ввода субстратов в каталитический цикл. Именно такой (с несвязанными формами ферментов) механизм представляется наиболее вероятным для полисубстратных реакций при описании кинетики потребления веществ микроорганизмами. При этом в модели учитывается предпочтение микроорганизмов в потреблении отдельных БВ, что позволяет отразить переход лимитирования развития гидробионтов от одного биогенного элемента (или его отдельных соединений) к другому элементу.

Скорости метаболических выделений гидробионтов в единицах N и P составляют определенные доли суммарных скоростей потребления указанных биогенных элементов. Доли выделений

метаболитов определяются коэффициентами выделительной активности. Величины этих коэффициентов зависят от содержания БВ и биомасс гидробионтов в водной среде. Они возрастают с увеличением потребления гидробионтами субстратов и уменьшаются до некоторой предельной сравнительно малой величины при снижении потребления ими субстратов (условия голодания). Таким образом, реализуется еще один важнейший регуляторный механизм, который определяет структурно-функциональную целостность всей экосистемы.

При описании удельных скоростей отмирания гидробионтов предполагается, что этот процесс регулируется как их биомассой, так и удельными скоростями потребления гидробионтами БВ. При избыточном питании в случае высоких удельных скоростей потребления биогенных элементов и низких биомассах выживаемость гидробионтов, которая обеспечивается потреблением компонентов пищи, должна быть высокой. Это обеспечивает снижение смертности и приводит к росту биомассы. Наоборот, при лимитированном питании, что имеет место в случае низкой удельной скорости потребления БВ, скорость отмирания гидробионтов повышается и биомасса в целом будет снижаться. Величины биомасс гидробионтов регулируются и трофическими взаимодействиями микроорганизмов в сообществе, которое также учитывается в модели при формулировании процессов потребления БВ в соответствии со схемой взаимозаменяемости форм N и P [11–13].

При расчетах коэффициентов трансформации БВ учитывалась их зависимость от T_w . С учетом диапазона изменения T_w в Невской губе коррекция констант трансформации ND и PD на условия по T_w выполняется в модели с использованием линейной аппроксимации данной зависимости. В общем случае такая зависимость нелинейна. Однако она может рассматриваться как линейная в определенном диапазоне изменения T_w . Для описания коррекции на T_w скоростей трансформации неорганических химических соединений и процесса обмена O_2 между водой и атмосферой использовалась показательная зависимость.

Таким образом, в данной имитационной модели используется несколько важнейших регуляторных механизмов, которые обеспечивают структурную и функциональную устойчивость экосистемы. При разработке модели открытой водной системы необходимо совместное моделирование динамики компонентов биологической системы

и среды ее функционирования на основе синтеза гидробиологических, гидрохимических и гидрофизических знаний об экосистеме Невской губы. Адекватная математическая формализация био-гидрохимических процессов позволяет рассматривать циклы соединений важнейших биогенных элементов в их взаимосвязи, системно. Такое описание дает реальную возможность изучать механизмы сопряжения различных циклов при анализе закономерностей динамики биомасс гидробионтов и концентраций БВ в водной среде. Предложенный химико-кинетический аппарат [11–13] позволяет изучать сложные биохимические, химические и физико-химические процессы и осуществлять математическое моделирование биотрансформации вещества в воде.

Данная модель фактически воспроизводит переходные процессы и описывает реакцию водной экосистемы на изменения условий среды обитания или на изменение хотя бы одного из учитываемых в модели факторов (T_w , водный режим, освещенность, биогенная нагрузка). Общее уравнение для био-гидрохимического блока приведено в Приложении, а его полное математическое описание дано в [21].

Вспомогательный блок позволяет выполнять процедуры оценки эмпирических параметров имитационной модели по имеющимся данным наблюдений. Для решения данной оптимизационной задачи реализован двухэтапный алгоритм прямого поиска [21]. На первом этапе используется алгоритм случайного поиска возможной области существования глобального минимума целевой функции в заданном параметрическом пространстве. На втором этапе выполняется локальный поиск. Для этого используется модифицированный симплексный метод Нелдера–Мида [36]. Локальный поиск уточняет положение минимума целевой функции, найденное на первом этапе работы алгоритма. В качестве целевой функции и показателя адекватности модели используется критерий Тейла [39] (далее по тексту T -критерий), его значение зависит от некоторого множества \bar{p} параметров модели:

$$f(\bar{p}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{N_{obs}} (C_{n_obs} - C_{n_sim})_i^2} / \left(\sqrt{\sum_{i=1}^{N_{obs}} C_{n_obs_i}^2} + \sqrt{\sum_{i=1}^{N_{obs}} C_{n_sim_i}^2} \right), \quad n = \overline{1, N}, \quad (1)$$

где C_{n_obs} – наблюдаемые значения переменной; C_{n_sim} – рассчитанные значения переменной, полученные в результате моделирования; N_{obs} – количество измерений экспериментальных данных; N – количество переменных модели, для которых имеются данные наблюдений. Значение целевой функции $f(\bar{p})$ может меняться от нуля до единицы. При полном совпадении модельных и наблюдаемых значений $f(\bar{p}) = 0$. В том случае, если должны минимизироваться отклонения модельных значений от наблюдаемых по многим переменным (а именно это и имеет место при выполнении процедур поиска наилучших параметров модели), желательно использовать взвешенное по N переменным среднее значение этого критерия с весовыми коэффициентами W_j :

$$\langle f(\bar{p}) \rangle = \sum_{j=1}^N (W_j f_j(\bar{p})). \quad (2)$$

Весовые коэффициенты определяются при этом по формуле

$$W_j = f_j(\bar{p}) / \sum_{i=1}^N f_i(\bar{p}), \quad j = \overline{1, N}. \quad (3)$$

В простейшем случае можно считать все весовые коэффициенты одинаковыми. Тогда формула (2) будет иметь следующий вид:

$$\langle f(\bar{p}) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f_j(\bar{p}). \quad (4)$$

Задача моделирования динамики компонентов в пространственно-неоднородной водной экосистеме решается в два этапа. Сначала на заданном шаге по времени τ проводится численное интегрирование системы уравнений термогидродинамики. В результате моделирования гидрологического комплекса определяются значения средних по глубине составляющих скорости течения, потоков коротковолновой солнечной радиации, величины фотопериода и средней по вертикали T_w . Затем на том же временном интервале (в данном случае 120 с, как и при расчете поля T_w) и на той же пространственной сетке численно интегрируется система уравнений турбулентной диффузии и трансформации компонентов химико-биологического комплекса. Решение этой задачи позволяет найти значения средних по вертикали концентраций биотических компонентов экосистемы к концу заданного шага по времени.

Эволюция полей химических и биологических характеристик определяется четырьмя основными факторами:

- адвективным переносом субстанций вдоль траекторий частиц;
- гравитационным осаждением взвешенных веществ;
- турбулентной диффузией;
- трансформацией химико-биологических субстанций.

Для численного интегрирования применяются схемы “расщепления” по физическим процессам и пространственным координатам, которые подробно рассмотрены в [21]. Вычисления полей концентраций химических и биотических компонентов модели, как и параметров в других блоках модели, проводятся для свободного ото льда периода (от даты очищения Невской губы ото льда до 31 октября). Принималось, что начальные значения концентраций компонентов модели по всей акватории равны соответствующим значениям концентраций химических и биотических компонентов в р. Неве на момент очищения Невской губы ото льда.

В зимний период характерная картина течений в Невской губе более неоднородна, чем в летний, поскольку ледяной покров изолирует водную среду от прямого воздействия ветра. Средние скорости переноса воды в центральной зоне снижаются на 20–30%. При этом пульсации скоростей уменьшаются в 1.5–2 раза в северной части губы и в 5–6 раз в южной [6, 31]. В результате устойчивость течений становится более однородной по всей акватории. Если нет значительных подъемов уровня на западной границе акватории губы, то устанавливается преимущественно стоковый режим подледных течений, которые направлены на запад. При этом концентрации гидрохимических параметров воды в Невской губе близки по значениям к таковым в р. Неве.

В качестве граничного условия при построении численной схемы на всей твердой границе, в створах вытекающих рек и на открытой границе при направлении движения воды за пределы расчетной области задавалось условие равенства нулю производной по направлению внешней нормали к границе водоема. На открытой границе при направлении движения воды внутрь расчетной области ставилось первое краевое условие: в створах втекающих рек задавались значения концентраций химических и биотических компонен-

тов в воде реки в данный момент времени. Для аппроксимации имеющихся данных по концентрациям компонентов модели в реках, как и для T_w , применялась процедура построения сплайнов с “растяжением” [20].

Для исследования структурно-функциональных изменений в водной экосистеме, вызванных колебаниями естественных параметров состояния водной среды и/или антропогенных факторов, вычисляются дополнительные характеристики (время оборота и потоки веществ между выделенными агрегированными компонентами экосистемы).

Для Невской губы проблемными являются комплексные задачи совместного изучения гидробиологического режима и условий загрязнения ее водной экосистемы, формирования застойных зон, окислительной трансформации веществ в водной среде, тенденций евтрофирования акватории и реакции водной экосистемы на возрастание биогенной нагрузки, потенциала самоочищения водной среды, режимов изменчивости концентраций органических веществ. Эти и многие другие экологические исследования могут быть выполнены с помощью рассмотренной в данной работе модели.

ВЫВОДЫ

Практическая значимость разработки математической модели для экосистемы Невской губы, в которой особенно важны условия пространственно-неоднородного переноса и совместной биотрансформации БВ, не вызывает сомнения. Применение методов математического моделирования крайне целесообразно при исследованиях разных вариантов антропогенного воздействия (строительство гидротехнических сооружений, повышенная нагрузка по БВ) на водную экосистему Невской губы. Использование математической модели и выполненных модельных экспериментов дает возможность установить такие гидродинамические режимы и такие предельные нагрузки на водные экосистемы, при которых качество водных ресурсов остается в пределах допустимых норм и количественных показателей.

Разработка полноценных моделей совместной трансформации БВ, учитывающих различную детализацию описания гидродинамического переноса веществ внутри акватории Невской губы, позволит провести количественные исследования фундаментальных экологических проблем, включая и проблемы загрязнения водной среды.

Опыт их применения в самой ближайшей перспективе даст возможность в комплексе выйти на качественно новую ступень понимания естественного состояния данной водной экосистемы и ее реакции на изменение природных факторов и антропогенных воздействий на среду обитания.

Принятие оптимальных управленческих решений в настоящее время требует создания и всестороннего развития комплексных экосистемных математических моделей, баз данных и интерактивных систем принятия решений. Именно они являются необходимой основой для изучения, анализа и прогнозирования состояния водных экосистем. Рассматриваемая пространственно-неоднородная имитационная математическая модель для исследований гидрологических, гидрохимических и экологических процессов на акватории Невской губы может и должна стать единицей программного комплекса при создании единой информационной системы Финского зал. Балтийского моря. Данная разработка объединяет информационные системы региона – метеорологическую, гидрологическую, гидробиологическую и гидрохимическую. Ядром подобных систем станут библиотеки математических моделей (различных иерархии и назначения), связанные со структурированными базами данных и программами обработки информации.

Результаты исследований с применением экосистемной модели для Невской губы Финского зал. могут представлять интерес для организаций Федеральной службы России по гидрометеорологии и мониторингу окружающей среды. В частности, такой интерес может быть связан с изучением и прогнозированием экологического состояния акватории Невской губы, условий ее загрязнения, оптимизации режимов работы водопропускных отверстий защитной дамбы, с решением вопросов охраны окружающей среды.

Конкретно с помощью разработанной модели для экосистемы Невской губы Финского зал. Балтийского моря могут изучаться:

– условия функционирования водной экосистемы (в естественных и проектных режимах при разных вариантах работы КЗС) на основе анализа результатов расчетов при учете внутригодовых особенностей динамики вод, изменений гидрометеорологических параметров окружающей среды и показателей биогенной нагрузки на экосистему;

– экологические проблемы качества водных ресурсов в акватории Невской губы;

– вопросы биотрансформации компонентов природного и антропогенного происхождения в акватории Невской губы;

– особенности состояния водной экосистемы Невской губы в условиях специфичной ветровой обстановки.

С помощью модели поведение водной экосистемы оценивается по особенностям внутригодовых изменений ряда следующих характеристик:

– расчетных концентраций химических веществ – органических и минеральных фракций биогенных элементов N, P и растворенного в воде O_2 ;

– биомасс микроорганизмов – основных трансформаторов БВ в природных водах (гетеротрофные бактерии, фитопланктон, простейшие, зоопланктон) и расчетных показателей продукции изучаемого сообщества водных микроорганизмов;

– скоростей отдельных стадий процессов биотрансформации органических и минеральных БВ;

– значений внутренних потоков БВ (внутренняя нагрузка) по учитываемым в модели путям их трансформации;

– расчетных поступлений БВ из внешних источников;

– итоговой биогенной нагрузке, включающей поступление БВ из внешних источников и их рециклинг за счет осуществления процессов биотрансформации БВ;

– тенденции и причины изменения расчетных балансов БВ.

Результаты таких расчетов могут быть использованы для характеристики экологического состояния экосистемы Невской губы Финского зал., оценки способности водной среды к самоочищению, а в перспективе – для прогноза качества ее вод и тенденций возможных изменений ее биопродуктивности. Рассчитанные поступления БВ, выявленные особенности характера их биотрансформации и круговорота в водной среде могут служить основой для планирования рациональной хозяйственной и природоохранной деятельности в бассейне Финского зал. Балтийского моря.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Краткое описание отдельных блоков
экосистемной модели Невской губы

Гидродинамический блок. Система уравнений Сен-Венана (без учета турбулентного перемешивания) имеет следующий вид:

$$U = \frac{1}{h + \zeta} \int_{-h}^{\zeta} u dz, \quad V = \frac{1}{h + \zeta} \int_{-h}^{\zeta} v dz, \quad (1)$$

$$H = h + \zeta, \quad (2)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial U}{\partial y} + g \frac{\partial \zeta}{\partial x} - fV + g \frac{U\sqrt{U^2 + V^2}}{C^2 H} - \frac{1}{\rho H} \tau_x^s = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + U \frac{\partial V}{\partial x} + V \frac{\partial V}{\partial y} + g \frac{\partial \zeta}{\partial y} + fU + g \frac{V\sqrt{U^2 + V^2}}{C^2 H} - \frac{1}{\rho H} \tau_y^s = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{\partial(HU)}{\partial x} + \frac{\partial(HV)}{\partial y} = 0, \quad (5)$$

где U, V – проекции вектора средней по глубине скорости на оси координат, ось OX направлена на восток, ось OY – на север, ось OZ – вверх; ζ – возвышение свободной поверхности над отсчетной поверхностью уровня; h – расстояние от отсчетной поверхности уровня до дна; H – полная глубина водоема в заданный момент времени t ; f – параметр Кориолиса; g – ускорение свободного падения; τ_x^s, τ_y^s – проекции касательного напряжения ветра на оси координат; ρ – плотность воды; C – коэффициент Шези.

Система (3)–(5) дополняется следующими граничными условиями:

– на твердом контуре задается условие непротекания, равенство нулю нормальной составляющей средней по глубине скорости течения: $\vec{U}_n = 0$;

– на жидкой границе используется условие излучения

$$\vec{U}_\tau = \zeta \sqrt{\frac{g}{H}}, \text{ если } \vec{U}_n \geq 0 \text{ и } \begin{cases} \vec{U}_n = \zeta \sqrt{\frac{g}{H}}, & \text{если } \vec{U}_n \leq 0, \\ \vec{U}_\tau = 0, & \end{cases}$$

где \vec{U}_τ – касательная составляющая средней по глубине скорости течения;

– в местах впадения рек используется энергетическое условие

$$U_n^2 + g\zeta = \frac{Q_{\text{river}}^2}{W_{\text{river}}^2 h_{\text{river}}^2},$$

где Q_{river} – расход воды, W_{river} – ширина створа, h_{river} – средняя глубина в створе реки.

Гидротермический блок. Для моделирования пространственно-временной динамики полей T_w используется уравнение теплопроводности с конвективными слагаемыми в недивергентной (характеристической) форме

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_w}{\partial t} + \underbrace{U \frac{\partial T_w}{\partial x} + V \frac{\partial T_w}{\partial y}}_I &= \\ &= \underbrace{(A_\eta)_T \Delta_\eta T_w}_II + \underbrace{\frac{Q_{\text{surf}} - Q_{\text{bott}}}{H}}_III. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь T_w – средняя по вертикали T_w ; $(A_\eta)_T$ – коэффициент горизонтальной турбулентной теплопроводности; Δ_η – двумерный оператор Лапласа; $Q_{\text{surf}}, Q_{\text{bott}}$ – кинематические потоки тепла на поверхности водоема и на дне соответственно. Остальные обозначения прежние. Из уравнения (6) следует, что в модели эволюция поля T_w водоема определяется тремя основными факторами: *I.* адвективным переносом тепла; *II.* турбулентной диффузией; *III.* процессами теплообмена между водоемом, атмосферой и деятельным слоем донных отложений.

В качестве граничных условий при построении численной схемы на всей твердой границе, в створах вытекающих рек и на открытой границе при направлении движения воды за пределы расчетной области задается условие равенства нулю производной по направлению внешней нормали n к границе водоема: $\partial T_w / \partial n = 0$. На открытой границе при направлении движения воды внутрь расчетной области должно ставиться первое краевое условие или заданы конкретные значения T_w . В створах втекающих рек задается условие вида $\partial T_w / \partial n - V_n (T_w - T_{\text{river}}) = 0$, где V_n – проекция скорости течения воды на внешнюю нормаль к границе, T_{river} – заданное значение T_w во втекающем в водоем речном потоке.

Гидрооптический блок. Процедура расчета концентрации сестона и определения характеристик прозрачности воды в Невской губе состоит в следующем. В начальный момент времени по глубине видимости белого диска Z_{White} с помощью эмпирической формулы $C_{\text{Seston}} = (8.74 \pm 0.03) Z_{\text{White}}^{-(1.31 \pm 0.08)}$ вычисляется концентрация сестона в воде (мг/л).

Затем по известному значению C_{Seston} с помощью формулы $C_{\text{POM}} = (1.0 \pm 0.04)C_{\text{Seston}}^{(0.31 \pm 0.03)}$ определяется концентрация ВОВ (мг/л) в воде. Зная ВОВ и допуская, что в ВОВ содержится 50% С, находим концентрацию С в составе ВОВ ($C_{\text{POM}}^C = 0.5C_{\text{POM}}$). Принимая, что детрит в Невской губе составляет 80–85% ВОВ, найдем концентрацию С в составе детрита ($C_{\text{C_detr}} = 0.85C_{\text{POM}}^C$). Считая, что отношение $C : N : P$ в детрите в среднем равно 40 : 10 : 1, можно найти концентрацию N и P в составе детрита ($C_{\text{N_detr}}$ и $C_{\text{P_detr}}$). Коэффициент экстинкции вычисляется по известному значению глубины видимости белого диска (Z_{White}) с помощью соотношения $\epsilon = 1.8/Z_{\text{White}}$.

Далее после выполнения расчетов на один шаг по времени в обратном порядке по известной концентрации N в составе детрита $C_{\text{N_detr}}$ последовательно находим концентрацию С в составе детрита $C_{\text{C_detr}}$ ($C_{\text{N_detr}} = 4.0C_{\text{N_detr}}$), затем концентрацию C_{POM}^C ($C_{\text{POM}}^C = C_{\text{C_detr}}/0.85$), концентрацию ВОВ ($C_{\text{POM}} = 2.0C_{\text{POM}}^C$), концентрацию сестона ($C_{\text{Seston}} = (3.23 \pm 0.08)C_{\text{POM}}^{(1.73 \pm 0.19)}$) и Z_{White} ($Z_{\text{White}} = (8.74/C_{\text{Seston}})^{1/1.31}$). После этого снова можно вычислять коэффициент экстинкции ϵ , и указанный цикл вычислений продолжается на последующих шагах по времени.

Биогидрохимический блок. Для моделирования пространственно-временной динамики полей концентраций компонентов модели используется система уравнений адвекции, турбулентной диффузии и трансформации БВ химико-биологического комплекса с конвективными слагаемыми в недивергентной (характеристической) форме:

$$\partial C_n / \partial t + U \partial C_n / \partial x + V \partial C_n / \partial y + (W_s)_n \partial C_n / \partial z = (A_n)_n \Delta_n (C_n) + F_n(t, C_1, \dots, C_n), \quad n = \overline{1, N}, \quad (7)$$

здесь C_n – значения концентраций компонентов экосистемы; $(W_s)_n$ – скорости гравитационного оседания взвесей; $(A_n)_n$ – коэффициенты горизонтального турбулентного обмена для компонентов модели; Δ_n – двумерный оператор Лапласа; $F_n \equiv \text{Rate}_n$ – оператор, описывающий функциональные выражения связей между компонентами экосистемы (скорости изменений компонентов экосистемы); N – число переменных в модели. Остальные обозначения – прежние.

Постановка граничных и начальных условий существенным образом зависит от гидрологических особенностей конкретного водоема, задач

исследования и обеспеченности данными наблюдений. В частности, граничные условия, как и при вычислении T_w , могут быть следующего вида: на всей твердой границе, в створах вытекающих рек и на открытой границе при направлении движения воды за пределы расчетной области задается условие равенства нулю производной по направлению внешней нормали n к границе водоема

$$\partial C_n / \partial n = 0. \quad (8)$$

На открытой границе при направлении движения воды внутрь расчетной области должно ставиться первое краевое условие, т. е. должны быть заданы конкретные значения концентраций химических и биотических компонентов экосистемы на открытой границе. В створах втекающих рек задается условие вида

$$\partial C_n / \partial n - V_n (C_n - C_{n_river}) = 0, \quad (9)$$

где C_{n_river} – концентрация химических и биотических компонентов в воде реки. Также в соответствующих узлах сеточной области учитываются дополнительные источники поступления БВ в результате сбросов сточных вод из очистных сооружений.

Из уравнения (7) следует, что эволюция полей химических и биологических характеристик определяется воздействием четырех основных факторов: переносом субстанций вдоль траекторий частиц, гравитационным осаждением взвешенных веществ, турбулентной диффузией и трансформацией химико-биологических субстанций.

Уравнения модели для описания скоростей изменения концентраций веществ за счет взаимодействия химических и биологических компонентов строятся на основе принятой в модели схемы взаимодействия веществ (рисунок).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Алимов А.Ф., Никулина В.Н., Панов В.Е. и др. Гидробиологическая характеристика Невской губы Финского залива // Гидробиол. журн. 1993. Т. 29. № 3. С. 3–14.
2. Андреев О.А., Соколов А.В. Численное моделирование динамики вод и переноса пассивной примеси в Невской губе // Метеорология и гидрология. 1989. № 12. С. 78–85.
3. Афанасьев С.В. Результаты численных экспериментов по моделированию распространения примеси в Невской губе // Системы и методы автоматизации исследований и управления. М.: Наука, 1982. С. 30–34.
4. Баклановская В.Ф., Пальцев Б.В., Чечель И.И. О краевых задачах для системы уравнений Сен-Ве-

- нана на плоскости // Журн. вычислительной математики и мат. физики. 1979. Т. 19. № 3. С. 708–725.
5. *Вольцингер Н.Е., Зольников А.В., Клеванный К.А., Преображенский Л.Ю.* Расчет гидрологического режима Невской губы // Метеорология и гидрология. 1990. № 1. С. 70–77.
 6. Гидрология устьевой области Невы / Под ред. Байдина С.С. М.: Гидрометеиздат, 1965. 384 с.
 7. *Драбкова В.Г., Беляков В.П., Каурова З.Г.* Особенности процессов антропогенного эвтрофирования в эстуарии р. Невы (восточная часть Финского залива) // Биология внутренних вод. 1999. № 1–3. С. 58–69.
 8. Интегрированное управление водными ресурсами Санкт-Петербурга и Ленинградской области. Опыт создания системы поддержки принятия решений / Под ред. Алимова А.Ф., Руховца Л.А., Степанова М.М. СПб.: Coreu Print, 2001. 420 с.
 9. Исследования водной системы Ладожское озеро – река Нева – Невская губа и Восточная часть Финского залива // Тр. ГГИ. 1988. Вып. 321. 152 с.
 10. *Клеванный К.А.* Наводнения в Санкт-Петербурге при незавершенном комплексе защитных сооружений // Изв. АН. Сер. геогр. 2002. № 2. С. 80–88.
 11. *Леонов А.В.* Математическое моделирование трансформации соединений фосфора в пресноводных экосистемах (на примере озера Балатон). М.: Наука, 1986. 152 с.
 12. *Леонов А.В.* Кинетика биотрансформации соединений органогенных элементов в природных водах (математическое моделирование и анализ закономерностей круговорота). Автореф. дис. ... докт. хим. наук. Ростов-на-Дону: ГХИ, 1991. 65 с.
 13. *Леонов А.В., Сапожников В.В.* Биогидрохимическая модель трансформации органогенных веществ и ее использование для расчета первичной продукции в экосистеме Охотского моря // Комплексные исследования экосистемы Охотского моря. М.: ВНИРО, 1997. С. 143–166.
 14. *Меншуткин В.В., Гришман З.М., Пинчук Н.М.* Концептуальная модель экосистемы Невской губы // Физиология человека. 1993 Т. 19. № 6. С. 126–136.
 15. Невская губа: гидробиологические исследования / Под ред. Винберга Г.Г., Гутельмахера Б.Л. Л.: Наука, 1987. 216 с.
 16. Невская губа – опыт моделирования / Под ред. Меншуткина В.В. СПб.: Coreu Print, 1997. 375 с.
 17. *Никулина В.Н.* Сезонная динамика фитопланктона мелководного района восточной части Финского залива при антропогенном воздействии // Биология внутренних вод. 2003. № 4. С. 43–50.
 18. *Никулина В.Н., Большакова В.А.* Фитопланктон эстуария р. Невы в зоне строительства сооружений защиты г. Санкт-Петербурга от наводнений // Гидробиол. журн. 1998. Т. 34. № 1. С. 25–33.
 19. *Пинчук Н.М., Гришман З.М., Дитятев А.Э. и др.* Исследование и прогнозирование экологического состояния Невской губы и восточной части Финского залива методами имитационного моделирования // Физиология человека. 1992. Т. 18. № 5. С. 131–135.
 20. *Подгорный К.А.* Расчет параметров термогидродинамического взаимодействия, характеристик теплового баланса и температуры воды в нестратифицированных водоемах. Ярославль: Изд-во ЯГТУ, 2000. 100 с.
 21. *Подгорный К.А.* Математическое моделирование пресноводных экосистем нестратифицированных водоемов (алгоритмы и численные методы). Рыбинск: Рыбинский дом печати, 2003. 328 с.
 22. *Подгорный К.А.* Моделирование пространственно-временной динамики полей температуры воды в Невской губе Финского залива // Тр. VII-й конф. “Динамика и термика рек, водохранилищ и прибрежной зоны морей”. М.: РУДН, 2009. С. 207–215.
 23. *Подгорный К.А.* Пространственно-неоднородная имитационная модель экосистемы Невской губы Финского залива // Изв. Самарского НЦ РАН. 2009. Т. 11. № 1 (7). С. 1574–1580.
 24. *Подгорный К.А., Смирнова Н.Ф.* Распределение токсических веществ в Невской губе за период с 1984 по 1987 гг. // “Гидрология Южного океана и Северной Атлантики”. Сб. науч. тр. Л.: Изд-во ЛГМИ, 1990. Вып. 109. С. 130–139.
 25. *Пясковский Р.В., Молчанов В.Н.* Моделирование динамического переноса загрязняющих веществ в Невской губе // Метеорология и гидрология. 1976. № 3. С. 68–77.
 26. *Румянцева Э.А., Скакальский Б.Г.* Оценка временной и пространственной неоднородности вод Невской губы и восточной части Финского залива по гидрохимическим показателям // Метеорология и гидрология. 2008. № 1. С. 98–106.
 27. *Руховец Л.А.* Математическое моделирование водообмена и распространения примесей в Невской губе // Метеорология и гидрология. 1982. № 7. С. 78–87.
 28. *Скакальский Б.Г., Румянцева Э.А.* Гидрохимическое районирование Невской губы // Метеорология и гидрология. 1989. № 9. С. 110–113.
 29. *Смирнова Н.Ф.* Особенности структуры вод Невской губы в период 1979–1983 гг. // Вопросы охраны и рационального использования вод суши. Л.: Изд-во ЛПИ, 1985. Вып. 89. С. 51–57.
 30. *Смирнова Н.Ф., Подгорный К.А.* Пространственно-временные изменения структуры вод Невской губы за период с 1984 по 1987 гг. // Динамика русловых потоков и охрана природных вод. Л.: Изд-во ЛГМИ, 1990. Вып. 107. С. 136–149.
 31. Финский залив в условиях антропогенного воздействия / Под ред. Румянцева В.А., Драбковой В.Г. СПб.: НЦ РАН, 1999. 368 с.
 32. Экологическое состояние водоемов и водотоков бассейна реки Невы / Под ред. Алимова А.Ф., Фролова А.К. СПб.: НЦ РАН, 1996. 225 с.

33. *Klevanny K.A., Smirnova E.V.* Simulation of current and water pollution changes in the Neva Bay after completion of St. Petersburg flood Protection Barrier // Environmental and chemical physics. 2002. V. 24. P. 144–150.
34. *Korpinen P., Kiirikki M., Rantanen P. et al.* High resolution 3D-ecosystem model for the Neva Bay and Estuary – model validation and future scenarios // Oceanologia. 2003. V. 45. № 1. P. 67–80.
35. *Molchanov M., Eremina T.R., Neelov I.A.* Modeling of suspended matter transport in the Neva Bay and the Eastern part of the Gulf of Finland // Proc. the 2nd Intern. Conf. (school) on Dynamics of Coastal Zone of Non-Tidal Seas. Baltiysk / Ed. Chubarenko B. Kaliningrad: Terra Baltica, 2010. P. 207–211.
36. *Nelder J.A., Mead R.* A simplex method for function minimization // Comp. J. 1964. V. 7. № 4. P. 308–313.
37. *Podgornyj K.A.* Mathematical modeling of spatial-temporal dynamics of current fields in the Neva Bay, the Gulf of Finland // Proc. the 2nd Intern. Conf. (school) on Dynamics of Coastal Zone of Non-Tidal Seas. Baltiysk / Ed. Chubarenko B. Kaliningrad: Terra Baltica, 2010. P. 225–231.
38. *Ryabchenko V.A., Dvornikov A., Haapala J., Myrberg K.* Modeling ice conditions in shallow-water estuaries: the case study of the Neva Bay // Proc. the 2nd Intern. Conf. (school) on Dynamics of Coastal Zone of Non-Tidal Seas. Baltiysk / Ed. Chubarenko B. Kaliningrad: Terra Baltica, 2010. P. 128–139.
39. *Theil H.* Applied economic forecasting. Amsterdam: North-Holland, 1971. 474 p.