

Математическое моделирование морских систем

УДК 556.114.6:556.556.2

В.А. Иванов, А.В. Багаев, С.Г. Демьшев, С.П. Любарцева

Модельная реконструкция сценария аварийного выброса полихлорбифенилов в прибрежной зоне Черного моря

Проанализированы результаты расчетов, проведенных с помощью комплексной гидрофизической модели динамики полихлорбифенилов на северо-западном шельфе Черного моря. Модель объединяет блок расчета трехмерных полей течений, солёности и температуры, модуль переноса и трансформации детрита с системой уравнений, описывающих концентрацию загрязнения в растворе, на частицах детрита и в верхнем слое донных осадков. Показано, что в рамках сценария аварийного выброса полихлорбифенилов из Георгиевского Гирла Дуная в весенний период доминирующим транспортным механизмом является горизонтальная адвекция. Адсорбция полихлорбифенилов на оседающих частицах детрита приводит к значительному (свыше 20% за первые 2 сут после аварии) уменьшению массы растворенных полихлорбифенилов в воде и ослаблению горизонтальных адвективных потоков вещества. При этом усиливается роль вертикальных потоков, которые вызывают не только быстрый транспорт и депонирование полихлорбифенилов на дне, но и повторное загрязнение водной толщи.

Ключевые слова: полихлорбифенилы, перенос, адсорбция, десорбция, трехмерная модель, потоки вещества, северо-западный шельф Черного моря.

Введение

Планы по разработке Южного нефтегазоносного региона Украины в качестве источника углеводородного сырья создают потенциальную угрозу загрязнения северо-западной акватории Черного моря не только продуктами разлива нефти, но и полихлорированными бифенилами (ПХБ), которые широко используются в насосных системах на буровых платформах.

Полихлорбифенилы – антропогенные стойкие экотоксиканты, склонные к накоплению в верхнем слое донных осадков. В прибрежной и шельфовой зонах под действием течений и диффузии происходит вторичное загрязнение водной толщи. Кроме того, среди известных органических загрязнителей, плохо поддающихся распаду, ПХБ обладают самой сильной склонностью к сорбции [1]. В качестве естественного сорбента в море выступают частицы органического происхождения [2], оседающие под действием силы тяжести.

Потенциальная угроза попадания ПХБ в поверхностные воды в случае атмосферного переноса с последующим выпадением на поверхность бассейна актуальна как для всей прибрежной зоны Черного моря, так и для глубоководной его части. Необходимость проведения комплексных оценок и прогнозов развития аварий, сопровождающихся выбросом ПХБ, стимулировала появление методов математического исследования их распространения в мор-

© В.А. Иванов, А.В. Багаев, С.Г. Демьшев, С.П. Любарцева, 2013

ской среде. Авторами была разработана комплексная модель динамики ПХБ в Черном море [3, 4]. Выполненная в рамках активно развивающегося в последние годы междисциплинарного моделирования, она объединяет современные теоретические представления о механизмах переноса, трансформации и стока неконсервативных растворенных и взвешенных загрязняющих веществ. В ней используются и адаптируются к динамике переноса ПХБ ранее разработанные различными авторами подходы к формализации процессов переноса донных наносов, деструкции органического вещества и транспорта радионуклидов, которые будут подробно описаны ниже при постановке задачи.

Целью данной статьи является анализ полей и потоков загрязнения, полученных в результате численного эксперимента по имитации сценария потенциального аварийного поступления на северо-западный шельф Черного моря относительно высоких концентраций ПХБ.

Описание модели

Структурно модель подразделяется на три блока: термогидродинамический; модуль переноса и трансформации детрита и блок транспорта ПХБ. Термогидродинамика представлена численной трехмерной z -координатной моделью [5], которая основана на полной системе нелинейных уравнений движения и переноса тепла и соли в приближении Буссинеска, гидростатики и несжимаемости морской воды. Для расчета коэффициентов вертикальной турбулентной вязкости и диффузии используется параметризация Филандера – Пакановски [6]. Турбулентный обмен импульсом, теплом и солью по горизонтали описывается с помощью бигармонического оператора. В качестве граничных условий на поверхности задаются касательные напряжения трения ветра, суммарный поток тепла и поток соли. На дне и твердых боковых границах ставятся условия непротекания для нормальной составляющей вектора скорости и прилипания – для тангенциальной составляющей. Для температуры и солености на этих границах принимаются условия отсутствия потоков тепла и соли. На участках границы, где вода втекает (реки и проливы), используются краевые условия Дирихле. Для верхнебосфорского течения и Керченского пролива, когда течение направлено из Черного моря в Азовское, задается меридиональная компонента скорости.

В модуле переноса детрита рассчитываются нестационарные поля его концентрации $S_d(x, y, z, t)$, которые определяются уравнением типа адвекция – диффузия – реакция [7]. В уравнении учитываются постоянная по времени скорость гравитационного оседания детрита, а также процесс его деструкции, контролируемый кинетикой первого порядка. На поверхности задается поток взвешенного мертвого органического вещества, насыщенного углеродсодержащими продуктами гумификации, сформированный в ходе продукционно-деструкционных процессов в экосистеме. На дне учитываются потоки эрозии и седиментации. В соответствии с моделью транспорта донных наносов [8] данные потоки являются функциями придонных сдвиговых напряжений. С

одной стороны, такой подход несколько усложняет граничные условия на дне, с другой, – обеспечивает корректное описание перехода взвешенной переменной состояния из воды в донные осадки и обратно, что особенно важно для прибрежной зоны моря. На боковых границах для концентрации детрита задаются граничные условия, аналогичные условиям для температуры и солености из термогидродинамического блока.

Концентрации растворенных ПХБ $C(x, y, z, t)$, ПХБ на детрите $C_d(x, y, z, t)$ и в верхнем слое седиментов $C_b(x, y, t)$ описываются уравнениями, в которых слагаемые типа «источники минус стоки» в соответствии с работой [9] имеют вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = -\kappa_h \nabla^4 C + \frac{\partial}{\partial z} \left(\kappa_v \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{a_{1,2}}{\beta} S_d (K_{ds} C - C_d), \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_d}{\partial t} + u \frac{\partial C_d}{\partial x} + v \frac{\partial C_d}{\partial y} + w \frac{\partial C_d}{\partial z} + w_s \frac{\partial C_d}{\partial z} = -\kappa_h \nabla^4 C_d + \frac{\partial}{\partial z} \left(\kappa_v \frac{\partial C_d}{\partial z} \right) + \\ + \frac{a_{1,2}}{\beta} S_d (K_{ds} C - C_d), \end{aligned} \quad (2)$$

$$\frac{\partial C_b}{\partial t} = a_{1,3} (Z_* K_{db} C - C_b) + F_d^d - F_e^d. \quad (3)$$

Здесь u, v, w – компоненты вектора скорости течения; κ_h и κ_v – коэффициенты турбулентного обмена по горизонтали и вертикали соответственно; w_s – скорость гравитационного оседания детрита; $a_{1,2}$ – удельная скорость обмена в системе вода – детрит с учетом различных скоростей процессов адсорбции и десорбции ПХБ на частицах детрита: $a_{1,2} = \begin{cases} a_{12}, & K_{ds} > C_d / C \\ a_{21}, & K_{ds} < C_d / C \end{cases}$; β – доля детрита во взвеси; K_{ds} – константа равновесия растворенной и сорбированной форм ПХБ; $a_{1,3}$ – удельная скорость обмена в системе вода – донные осадки:

$a_{1,3} = \begin{cases} a_{13}, & K_{db} > C_b / (CZ_*) \\ a_{31}, & K_{db} < C_b / (CZ_*) \end{cases}$; Z_* – толщина эффективного слоя донных отложений; K_{db} – константа равновесия в системе вода – донные осадки; F_d^d и F_e^d – потоки соответственно депонирования и взмучивания для ПХБ на детрите.

Вызванные атмосферным переносом потоки ПХБ на границе вода – воздух неизвестны. Циркумконтинентальный тип распределения концентрации ПХБ в водной толще и донных осадках Черного моря [1, 10] позволяет предположить, что поступление ПХБ из атмосферы пренебрежимо мало по сравнению с латеральными потоками, связанными с нелегальными сбросами.

Тогда в качестве граничных условий для уравнений (1), (2) на поверхности ($z = 0$) можно поставить условия отсутствия потоков ПХБ:

$$\kappa_v \frac{\partial C}{\partial z} = 0, \quad w_s C_d + \kappa_v \frac{\partial C_d}{\partial z} = 0. \quad (4)$$

На дне ($z = H(x, y)$) задаются диффузионный обмен растворенными ПХБ с верхним слоем седиментов; потоки осаждения F_d^d и взмучивания F_e^d для ПХБ на детрите:

$$\kappa_v \frac{\partial C}{\partial z} = a_{1,3}(Z_* K_{db} C - C_b), \quad w_s C_d - \kappa_v \frac{\partial C_d}{\partial z} = F_d^d - F_e^d. \quad (5)$$

Потоки F_d^d и F_e^d являются функциями придонных сдвиговых напряжений τ_b [7]:

$$F_d^d = \begin{cases} w_s C_{db} \left(1 - \frac{\tau_b}{\tau_{cd}}\right), & \tau_b \leq \tau_{cd}, \\ 0, & \tau_b > \tau_{cd}, \end{cases} \quad F_e^d = \begin{cases} M_1 \left(\frac{\tau_b}{\tau_{ce}} - 1\right), & \tau_b \geq \tau_{ce}, \\ 0, & \tau_b < \tau_{ce}, \end{cases} \quad (6)$$

$$\tau_b = \rho_0 K^2 \left[\ln \left(\frac{z_b}{z_0} \right) \right]^{-2} (u^2 + v^2). \quad (7)$$

Здесь C_{db} – концентрация ПХБ на детрите на дне; M_1 – параметр интенсивности взмучивания ПХБ на детрите; τ_{cd} и τ_{ce} – критические по отношению к седиментации и эрозии значения придонных сдвиговых напряжений; K – постоянная Кармана; z_b – толщина слоя трения (расстояние до дна), z_0 – шероховатость дна, ρ_0 – осредненное значение плотности воды.

На жидкой боковой границе L может функционировать источник растворенных ПХБ:

$$u_n C - \sqrt{\kappa_h} \frac{\partial C}{\partial n} \Big|_L = F_C, \quad (8)$$

где u_n – нормальная к жидкой границе компонента горизонтальной скорости течения, F_C – латеральный поток растворенных ПХБ.

На твердых G и жидких L боковых границах выполняется условие отсутствия потока ПХБ на детрите по направлению внешней нормали \vec{n} к границе:

$$u_n C_d - \sqrt{\kappa_h} \frac{\partial C_d}{\partial n} \Big|_{G+L} = 0. \quad (9)$$

Пространственная дискретизация реализуется на равномерной сетке В.И. Лебедева [11] с разрешением $\Delta x = \Delta y = 5$ км. По вертикали расчет скорости течений, температуры, солёности, уровня моря, концентрации детрита, растворенных ПХБ и ПХБ на детрите проводится для 45 неравномерно распределённых горизонтов. Вертикальная компонента скорости вычисляется для глубин между основными горизонтами. Шаг по времени Δt составляет ISSN 0233-7584. Мор. гидрофиз. журн., 2013, № 6

5 мин. Применяется схема *leap-frog* с периодическим включением схемы Матсуно [12]. Дифференциальные уравнения гидродинамического блока модели на этой сетке заменяются дискретными аналогами, которые подробно описаны в работе [5]. Совместно с уравнениями гидродинамического блока численно решаются уравнения переноса и трансформации детрита и ПХБ с учетом граничных и начальных условий и с использованием *TVD*-схемы [13, 14]. Выбор для аппроксимации оператора адвективного переноса *TVD*-схемы был обусловлен необходимостью уменьшения вычислительной дисперсии. Как было показано в статье [14], этот подход позволяет удовлетворительно описать поля с большими градиентами концентрации, в частности фронтальные зоны.

Постановка численного эксперимента

Полученные для Черного моря экспериментальные данные [1, 10] свидетельствуют о том, что периодически в прибрежную зону осуществляются сбросы ПХБ, а основные источники полихлорбифенилов локализованы в акваториях устьевой зоны Дуная (средняя концентрация растворенных ПХБ на поверхности 86,5 пг/л, сорбированной фракции – 16,2 пг/л, в донных осадках – 40,2 нг/г). Из-за отсутствия системы мониторинга этих загрязнений можно лишь предположить, что, подобно разливам нефти, имеют место кратковременные случайные выбросы средней интенсивности. В данной работе была решена с помощью представленной модели нестационарная (*spin up*) задача эволюции трехмерных полей ПХБ, сформировавшихся в результате возможного аварийного сброса в устьевой зоне Дуная. Исследуемый регион Дунайского взморья и место модельного выброса указаны на рис. 1.



Р и с. 1. Исследуемый район Дунайского взморья (звездочка – точка модельного выброса ПХБ; *V* – область, для которой рассчитываются потоки; цифры на изолиниях – глубина)

В качестве вынуждающей силы на поверхности в гидродинамическом блоке использовались суточные поля тангенциального напряжения трения ветра. Соответствующий массив был получен в результате осреднения данных 1988 – 1998 гг. с дискретностью 6 ч, которые были восстановлены по распределениям приземного давления [15]. Ежедневные значения потоков тепла, осадков, испарения были получены по реальным измерениям [16, 17]. Поля климатических течений строились на основе методики последовательного усвоения климатических данных о потоках тепла и соли [18, 19]. Стоки рек определялись по данным работы [20].

Период ранней весны в данном регионе характеризуется цветением холодоустойчивых форм фитопланктона и, как следствие, значительным потоком взвешенного мертвого органического вещества. Мгновенный выброс растворенных ПХБ происходит на фоне сформированного пятна детрита, которое поддерживается постоянным потоком на поверхности

$$F_s = \begin{cases} 320 \text{ мгС}/(\text{м}^2 \cdot \text{сут}) & \text{при } (x, y) \in \Omega, \\ 0 & \text{при } (x, y) \notin \Omega \end{cases} \quad (10)$$

вблизи устья Дуная в двумерной области Ω (30×55 км).

Считается, что начальная концентрация ПХБ $C_0 = 12,8 \cdot 10^{-12}$ г/см³, что соответствует мгновенному поступлению в некоторый момент времени в точке, которая располагается в районе Георгиевского Гирла, суммарной массы ПХБ, равной 4 кг. Заметим, что ежегодная поставка со стоком Дуная оценивается в 20 кг ПХБ [1]. В начальный момент времени область аварийного сброса имеет размер 5×5 км и располагается на Дунайском взморье (см. рис. 1).

Набор неуниверсальных констант модели приводится в работах [3, 4].

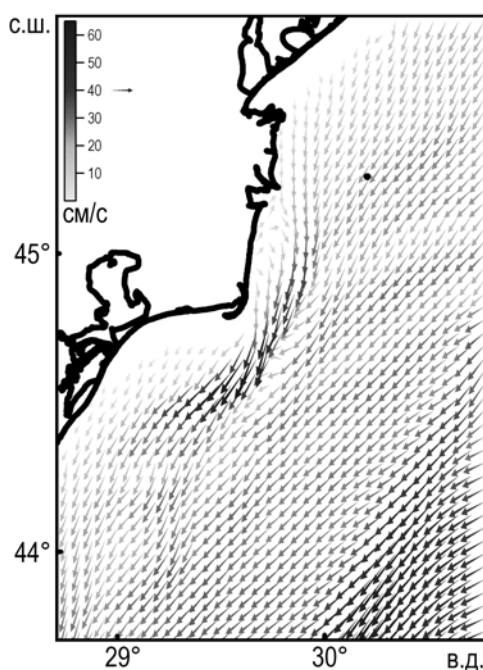
Описанная выше модельная задача инициализируется на 9600-й модельный день расчета гидродинамического блока (что соответствует дате 4 марта климатического массива данных). Массив значений гидротермодинамических переменных состояния для данного момента времени был получен ранее в работах [21, 22]. Продолжительность расчета определялась временем достижения периодического режима циркуляции. Отслеживание переноса и трансформации детрита и ПХБ производится в течение одного модельного месяца с дискретностью в одни сутки.

Анализ полученных результатов

Гидродинамические характеристики и термохалинный режим. При проведении численного эксперимента доминирующими были северное и северо-восточное направления ветра, иногда они сменялись северо-западным. Средняя скорость ветра составляла 5 м/с. Данные характеристики векторного поля скорости ветра над морем определяются малоградиентными барическими полями без выраженного переноса воздушных масс.

Такие ветровые условия, а также связанный с пресноводным стоком поток плавучести генерируют соответствующие течения (рис. 2). Видно, что в прибрежной зоне северо-западного шельфа в этот период преобладает циклоническая циркуляция. Хорошо выделяется направленное на юго-запад вдольбереговое течение. Оно характеризуется средней скоростью 30 см/с. Система

течений в районе м. Калиакра формируется в процессе взаимодействия Основного Черноморского течения с вдольбереговой струей, максимальные скорости достигают здесь 60 см/с. Полученная в результате моделирования циркуляция на поверхности моря неплохо соответствует экспериментальным данным [23].



Р и с. 2. Модельное поле горизонтальных течений на 7-е сут после аварийного выброса ПХБ на горизонте 3 м

Свободная поверхность моря отклоняется от нулевого уровня вверх вблизи берега и вниз в области мористее границы шельфа. Структура поля вертикальной скорости движения вод отличается высокой пространственно-временной изменчивостью. Имеются четко выраженная область даунвеллинга на устьевом взморье Дуная, а также множество локальных зон опускания вод на шельфе. Среднее значение вертикальной скорости составляет $5 \cdot 10^{-6}$ см/с.

В структуре поля солёности вблизи ячеек сетки, соответствующих устью Дуная, наблюдается фронтальная зона, вызванная пресноводным стоком. Качественно похожая зона образуется и в поле концентрации ПХБ уже на 2-е сут расчета, т. е. до начала модельного выброса. В приустьевых зонах крупных рек и возле проливов формируются области, в которых концентрация в два раза меньше фоновой. Это свидетельствует об адекватном отображении в модели поступления чистой воды как источника «отрицательной» концентрации ПХБ. После начала аварийного выброса данная фронтальная зона становится менее заметной на фоне высоких концентраций внутри пятна ПХБ.

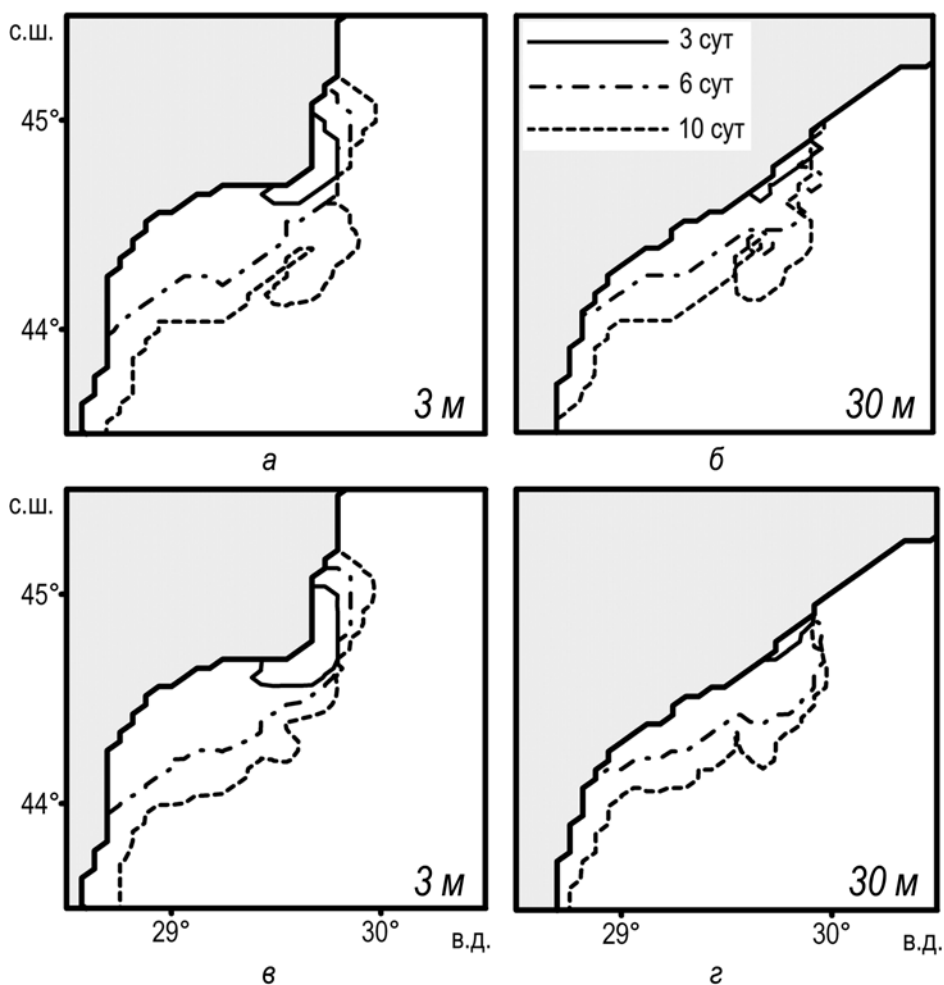
Поле температуры характеризуется относительно гладкими распределениями, соответствующими весеннему прогреву водной толщи на ранней ста-

дии эволюции термоклина. Температура на северо-западном шельфе меняется в направлении с севера на юго-восток от 3,5 до 6,5°C.

Пространственно-временная изменчивость полей концентрации ПХБ. Образовавшееся в результате аварийного выброса пятно полихлорбифенилов на поверхности следует в струе вдольберегового течения, которое генерируется потоками плавучести и полями тангенциальных напряжений ветра на границе вода – атмосфера (рис. 3). Гидродинамический режим акватории, а также слабый уклон дна на исследуемом участке континентальной отмели на выбранном масштабе фактически ограничивают распространение загрязнения изобатой 75 м. На 3-и сут после аварии концентрация растворенных ПХБ в поверхностном слое составляет 10^3 пг/л в ядре загрязнения и быстро снижается к периферии до 10^{-4} пг/л, четко обозначая фронтальную зону шириной примерно 5 км с относительно гладкой границей. При этом поперечный размер пятна ПХБ составляет около 30 км. На глубине 30 м концентрации составляют 10 – 80 пг/л, а ширина пятна – 15 км. В поле концентрации ПХБ на детрите также формируется фронтальная зона с максимальной концентрацией 10^2 пг/л на поверхности (10 пг/л – на горизонте 30 м) и примерно такой же ширины, как и для растворенных ПХБ. На 10-е сут после аварии концентрация растворенных ПХБ в ядре уменьшается на поверхности до 10^2 пг/л (на детрите – до 10 пг/л). Область максимальных концентраций достигает г. Констанца (Румыния), а южная авангардная часть пятна – м. Калиакра. Наблюдается диффузионное размывание фронта концентрации. Сложное взаимодействие между вертикальными движениями среды, гравитационным оседанием взвешенных компонент, процессами сорбции/десорбции ПХБ на их поверхности и депонированием/взмучиванием на дне приводит к нарушению гладкости границы фронтальной зоны, ее разрывам и формированию в водной толще обособленных линз загрязнения.

Как было отмечено в работе [7], пространственно-временная изменчивость распределения взвешенных переменных состояния у дна в исследуемой области контролируется процессами депонирования и взмучивания. В работе [24] выделяют три типа процессов, происходящих вблизи дна: эрозионные, транспортирующие и аккумулятивные. Анализ потоков ПХБ в верхнем слое донных осадков в нашем эксперименте показал, что мы имеем дело с процессами второго и третьего типов. Очевидное подобие в распределениях детрита и ПХБ на дне указывает, что основным механизмом контаминации верхнего слоя донных осадков является вертикальный перенос ПХБ на взвешенных частицах детрита. В районе м. Калиакра фиксируются транспортирующие процессы, в результате которых седименты не только поглощают ПХБ, но и эффективно выделяют их при взмучивании. Эта зона северо-западного сектора моря является наиболее динамически активной, так как здесь вплотную к берегу подходит Основное Черноморское течение. Необходимо заметить, что для случая мелководья данная версия модели может существенно занижать потоки эрозии для детрита и взмучивания для ПХБ на детрите из-за пренеб-

режения эффектами ветрового волнения. Дальнейшее развитие модели предполагает учет влияния волновых полей.



Р и с. 3. Положение условных границ области загрязнения с концентрацией 10^{-4} пг/л на горизонтах 3 и 30 м на 3, 6 и 10-е сут: *а, б* – концентрации растворенных ПХБ; *в, г* – концентрации ПХБ на детрите

Для оценки вклада различных физических механизмов в формирование трехмерных полей ПХБ, поступивших в водную среду в результате аварийного сброса, были рассчитаны интегральные потоки вещества в замкнутой трехмерной области V : $\iiint_V \frac{\partial C_i}{\partial t} dx dy dz$, где C_i – концентрация ПХБ в растворе

(C) либо концентрация ПХБ на детрите (C_d).

Область V ограничивалась широтой $44,2$ и $45,1^\circ$ с.ш. и долготой $29,2$ и $30,1^\circ$ в.д., что в проекции на горизонтальную плоскость соответствует прямоугольной акватории с размерами 100×75 км. Интегральные потоки вещества фиксировались посуточно для первых 20 сут после аварии. Положительные

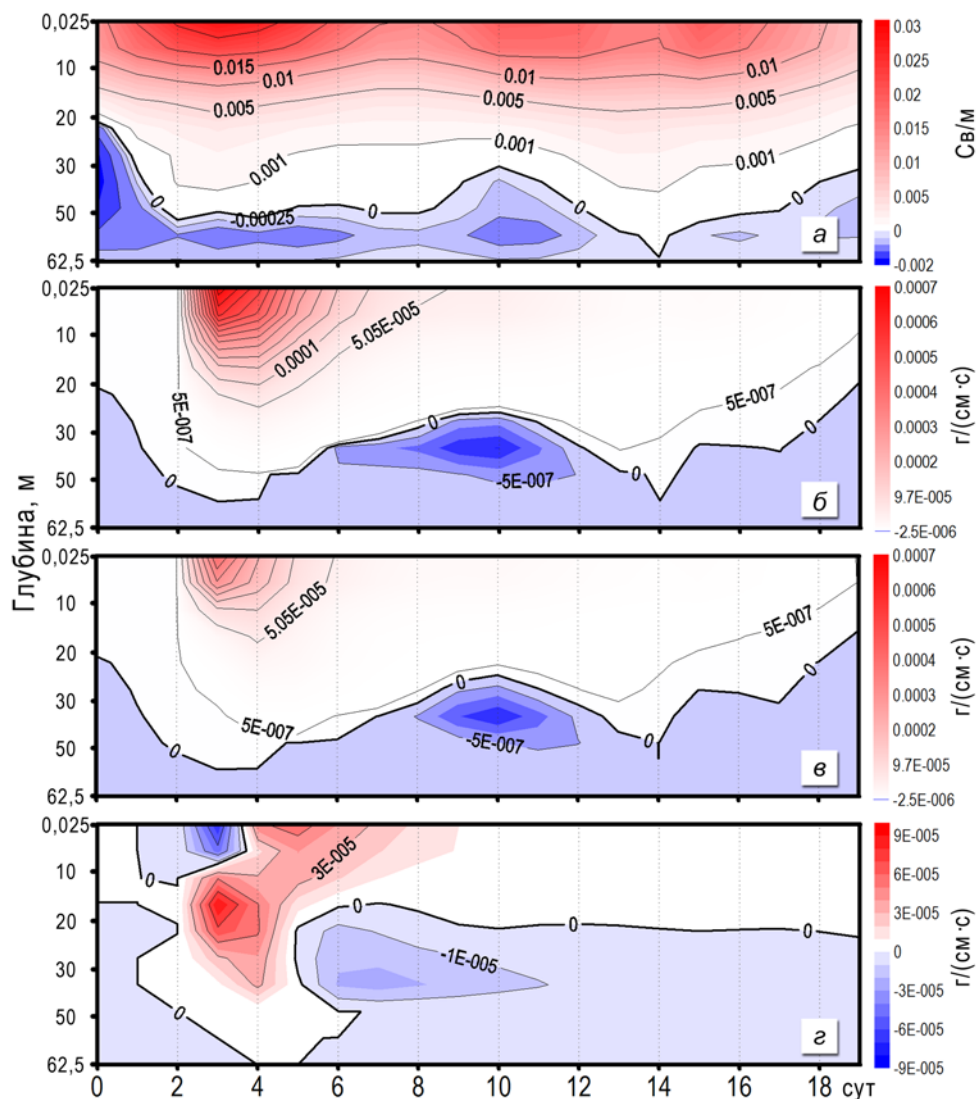
значения для адвекции и диффузии соответствуют экспортным потокам, отрицательные – импортным. Для сорбции положительный поток означает «перекачку» ПХБ из раствора на детрит. Физический смысл рассчитанных величин есть интегральный по области V поток ПХБ, который был обусловлен либо физическим транспортом (адвективным переносом и диффузией через западную, северную, восточную и южную границы), либо физическими процессами адсорбции/десорбции ПХБ на оседающих под действием силы тяжести частицах детрита. В таблице приводятся некоторые характеристики экстремумов потоков в порядке убывания максимальных значений модуля. Расчеты показали, что максимальными в области V являются адвективные транспортные и адсорбционно-десорбционные физико-химические потоки. Среди адвективных доминирует поток через западную границу, максимальное значение, равное 0,12 г/с, отмечается на 6-е сут. Далее следуют потоки адсорбции и десорбции с соответствующими характеристиками локальных экстремумов: $6,0 \cdot 10^{-2}$ г/с на 6-е сут и $-2,0 \cdot 10^{-2}$ г/с на 10-е сут. Заметим, что горизонтальная диффузия является самым слабым транспортным механизмом.

Некоторые характеристики потоков ПХБ в области V

Порядок доминирования потока	Поток	Фаза ПХБ	Граница	Максимальный по модулю поток, г/с	Время, сут
max ↓ min	адвективный	в растворе	западная	$1,2 \cdot 10^{-1}$	6
	адвективный	на детрите	западная	$6,0 \cdot 10^{-2}$	6
	адсорбция	–	–	$6,0 \cdot 10^{-2}$	6
	десорбция	–	–	$2,0 \cdot 10^{-2}$	10
	адвективный	в растворе	южная	$1,8 \cdot 10^{-2}$	13
	адвективный	на детрите	южная	$1,4 \cdot 10^{-2}$	13
	адвективный	в растворе	северная	$5,0 \cdot 10^{-4}$	9
	адвективный	на детрите	северная	$2,0 \cdot 10^{-4}$	9
	адвективный	на детрите	восточная	$8,0 \cdot 10^{-7}$	18
	адвективный	в растворе	восточная	$2,0 \cdot 10^{-7}$	18
	диффузионный	в растворе	западная	$5,0 \cdot 10^{-14}$	11

Пространственно-временная изменчивость потоков ПХБ. Для анализа временной изменчивости вертикальной структуры потоков $\iint \frac{\partial C_i}{\partial t} dx dy$ через западную границу области V были построены диаграммы Хофмеллера для соответствующих потоков (рис. 4). На рис. 4, *а* показана пространственно-временная изменчивость потока воды. Видно, что вызванный прибрежным течением поток охватывает верхний 10-метровый слой, пульсируя во времени с характерным периодом 4 – 8 сут. Максимальная на данном промежутке времени величина потока достигается на 4-е сут и составляет около 0,03 Св/м. На глубинах свыше 30 м наблюдается поток противоположного знака, но значительно меньшей интенсивности, порядка $-0,001$ Св/м. При этом характерный период пульсации противотечения сохраняется. Загрязнение растворенными (рис. 4, *б*) и взвешенными (рис. 4, *в*) ПХБ фиксируется на западной

границе области с 3-х по 17-е сут. Ядро потока растворенных ПХБ со значением $7 \cdot 10^{-4}$ г/(см·с) к 5-м сут охватывает верхнюю 15-метровую толщу.



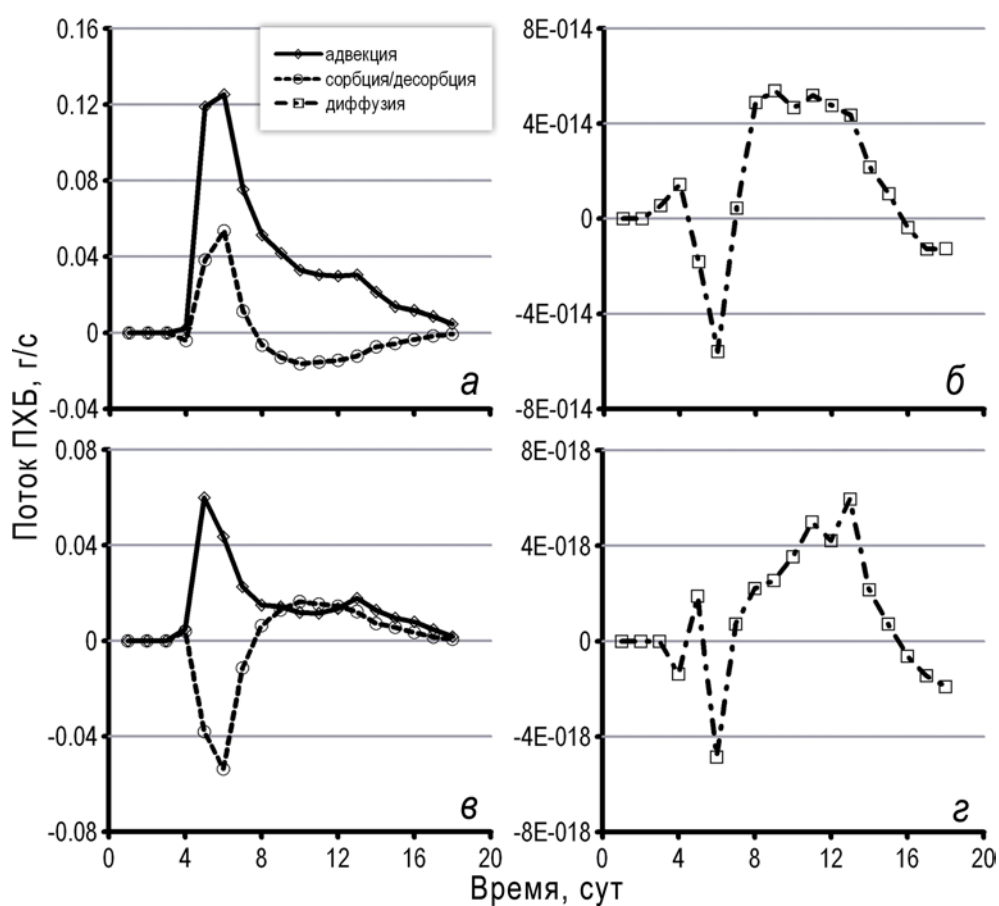
Р и с. 4. Интегральные потоки воды (а), ПХБ в растворе (б), ПХБ на детрите (в) и сорбция/десорбция (г) в виде диаграмм Хофмеллера для 20 сут эксперимента (проекция на западную границу области V)

Загрязнение на детрите характеризуется максимальным значением потока $4 \cdot 10^{-4}$ г/(см·с), переносится в более узком 10-метровом слое и рассеивается быстрее. На рис. 4, г приводится пространственно-временная развертка потока, соответствующего адсорбционно-десорбционному слагаемому

$Sorb(z, t) = \frac{a_{1,2}}{\beta} S_d (K_{ds} C - C_d)$ в уравнениях (1), (2). Наблюдается сложная квадрупольная структура. На 4-е сут в поверхностный слой поступает

насыщенный ПХБ детрит, происходит десорбция загрязнения. К 5-м сут в слое 6 – 20 м образуется ядро адсорбционного потока с максимальным значением 10^{-4} г/(см·с), время жизни которого составляет примерно 2,5 сут. На 6-е сут десорбция на поверхности сменяется относительно слабой адсорбцией. В толще также происходит смена знака потока, формируется пролонгированный шлейф десорбции с максимальным значением потока порядка 10^{-4} г/(см·с) на глубине 15 м.

На рис. 5 показана временная изменчивость суммарного транспортного и физико-химических потоков ПХБ в области V. Отчетливо видно, что основным механизмом переноса загрязнения является адвекция. Скорость выноса загрязнения из области V возрастает на протяжении 6 сут, затем относительно быстро падает к 14-м сут и более медленно – к 19-м сут. Учет физико-химических процессов адсорбции/десорбции является совершенно необходимым, так как скорость этих процессов сравнима со скоростью адвекции. Горизонтальный диффузионный обмен относительно слаб, смена знака диффузионных потоков управляется сорбционными процессами.



Р и с. 5. Суммарные потоки ПХБ в растворе (а, б) и на детрите (в, г) в области V

Заключение

Проведенное исследование подтвердило перспективность применения разработанной авторами комплексной модели расчета динамики полихлорированных бифенилов для прогноза рассеяния загрязнения в прибрежной зоне Черного моря после потенциального аварийного выброса.

Были проанализированы важнейшие характеристики пространственно-временной изменчивости гидрофизических полей и распределения ПХБ в результате аварийного сброса загрязнителя в приустьевой зоне Дуная: траектория пятна; динамика загрязнения водной толщи и донных осадков; потоки вещества.

Численные эксперименты показали, что доминирующим транспортным механизмом является адвективный перенос загрязнения струйным прибрежным направленным на юг течением со средней скоростью вблизи поверхности 20 см/с. Потоки, вызванные физико-химическими процессами адсорбции/десорбции на оседающих частицах детрита, сравнимы с горизонтальными адвективными потоками, что позволяет сделать вывод о существовании природной буферной системы, ускоряющей очищение водной толщи и связывание ПХБ донными осадками. Оказалось, что влияние турбулентной диффузии на перенос ПХБ имеет второй порядок малости.

Полученные в работе результаты и выводы базируются на расчетах, при проведении которых использовался фиксированный набор неуниверсальных констант и данные климатических гидрофизических полей. В дальнейшем, с накоплением новых экспериментальных данных, планируется приложение данного подхода к реальным синоптическим ситуациям, а также исследование чувствительности модели к модификации набора констант с целью улучшения ее имитационных качеств.

Предложенная методика модельного воспроизведения сценария потенциального аварийного сброса опасного экотоксиканта в прибрежной зоне может быть использована не только в области фундаментальных исследований, но и в практической сфере – для поиска оптимальных управленческих решений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Maldonado C., Bayona M., Bodineau L.* Sources, distribution, and water column processes of aliphatic and polycyclic aromatic hydrocarbons in the northwestern Black Sea water // *Envir. Sci. Technol.* – 1999. – **33**, № 16. – P. 2693 – 2702.
2. *Qingyu M., Shaogang C., Xiaobai X.* Sorption phenomena of PCBs in environment // *Chin. Sci. Bull.* – 2001. – **46**, № 2. – P. 89 – 97.
3. *Lyubartseva S.P., Ivanov V.A., Bagaev A.V. et al.* Three-dimensional numerical model of polychlorobiphenyls dynamics in the Black Sea // *Russian J. Numer. Anal. Math. Model.* – 2012. – **27**, № 1. – P. 53 – 68.
4. *Иванов В.А., Багаев А.В., Демьшев С.Г. и др.* Трехмерная модель переноса полихлорбифенилов на северо-западном шельфе Черного моря // *Доп. НАН України.* – 2012. – № 4. – С. 94 – 99.

5. Демьшев С.Г., Коротаев Г.К. Численная энергосбалансированная модель бароклинных течений океана с неровным дном на сетке C // Численные модели и результаты калибровочных расчетов течений в Атлантическом океане. – М.: ИВМ РАН, 1992. – С. 163 – 231.
6. Pacanowski R.C., Philander S.G.H. Parametrization of vertical mixing in numerical models of the tropical ocean // J. Phys. Oceanogr. – 1981. – 11, № 11. – P. 1443 – 1451.
7. Багаев А.В. Совершенствование параметризации детрита в задачах экологического моделирования приустьевой зоны Дуная // Экологическая безопасность прибрежной и шельфовой зон и комплексное использование ресурсов шельфа. – Севастополь: МГИ НАН Украины, 2010. – Вып. 22. – С. 274 – 280.
8. Алексеев Д.В., Иванов В.А., Иванча Е.В. и др. Исследование полей концентрации взвеси на северо-западном шельфе Черного моря при взмучивании донных осадков движущимся циклоном // Морской гидрофизический журнал. – 2007. – № 1. – С. 3 – 19.
9. Koziy L., Maderich V., Margvelashvili N. et al. Three-dimensional model of radionuclide dispersion in estuaries // Environ. Model. Software. – 1998. – 13, № 5 – 6. – P. 413 – 420.
10. Fillmann G., Readman J., Tolosa I. et al. Persistent organochlorine residues in sediments from Black Sea // Mar. Pollut. Bull. – 2002. – 44, № 2. – P. 122 – 133.
11. Лебедев В.И. Разностные аналоги ортогональных разложений, основных дифференциальных операторов и некоторых краевых задач математической физики // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. – 1964. – 4, № 3. – С. 449 – 465.
12. Matsuno T. Numerical integrations of the primitive equations by a simulated backward difference method // J. Meteor. Soc. Japan. – 1966. – 44. – P. 76 – 84.
13. Pietrzak J. The use of TVD limiters for forward-time upstream-biased advection schemes in ocean modeling // Mon. Wea. Rev. – 1998. – 126, № 3. – P. 812 – 830.
14. Фомин В.В. Применение схем TVD для численного моделирования фронтальных зон солености в мелком море // Метеорология и гидрология. – 2006. – № 2. – С. 59 – 68.
15. Дорофеев В.Н., Коротаев Г.К. Ассимиляция данных спутниковой альтиметрии в вихреразрешающей модели циркуляции Черного моря // Морской гидрофизический журнал. – 2004. – № 1. – С. 52 – 68.
16. Ефимов В.В., Тимофеев Н.А. Теплобалансовые исследования Черного и Азовского морей. – Обнинск: ВНИИГМИ-МЦД, 1990. – 237 с.
17. Staneva J.V., Stanev E.V. Oceanic response to atmospheric forcing derived from different climatic data sets. Intercomparison study for the Black Sea // Oceanol. Acta. – 1998. – 21, № 3. – P. 383 – 417.
18. Кныш В.В., Демьшев С.Г., Коротаев Г.К. Методика реконструкции климатической сезонной циркуляции Черного моря на основе ассимиляции гидрологических данных в модели // Морской гидрофизический журнал. – 2002. – № 2. – С. 36 – 52.
19. Korotaev G.K., Demyshev S.G., Knysh V.V. Three-dimensional climate of the Black Sea // Black Sea Ecosystem Processes and Forecasting. Operational Workshop and Project Evaluation Meeting. – Erdemli: METU, IMS, 2000. – P. 1 – 10.
20. Гидрометеорология и гидрохимия морей СССР. Т. IV. Черное море. Вып. 1. Гидрометеорологические условия / Под ред. А.И. Симонова, Э.Н. Альтмана. – СПб.: Гидрометеоиздат, 1991. – 430 с.
21. Демьшев С.Г., Иванов В.А., Маркова Н.В. и др. Построение поля течений в Черном море на основе вихреразрешающей модели с ассимиляцией климатических полей температуры и солености // Экологическая безопасность прибрежной и шельфовой зон и комплексное использование ресурсов шельфа. – Севастополь: МГИ НАН Украины, 2007. – Вып. 15. – С. 215 – 226.
22. Демьшев С.Г., Багаев А.В. Численное моделирование термохалинной циркуляции Черного моря при различных параметризациях коэффициентов турбулентного переноса // Системы контроля окружающей среды. – Севастополь: МГИ НАН Украины, 2009. – С. 195 – 197.

23. *Природные условия взморья реки Дунай и острова Змеиный: современное состояние экосистемы* / Под ред. В.А. Иванова, С.В. Гошовского. – Севастополь: МГИ НАН Украины, 1999. – 268 с.
24. *Jönsson A., Carman R. Distribution of PCBs in sediment from different bottom types and water depths in Stockholm Archipelago, Baltic Sea // Ambio. – 2000. – 29, № 4/5. – P. 277 – 281.*

Морской гидрофизический институт НАН Украины,
Севастополь
E-mail: багаiev.andrii@gmail.com

Материал поступил
в редакцию 01.03.12
После доработки 14.05.12

АНОТАЦІЯ Проаналізовано результати розрахунків, проведених за допомогою комплексної гідрофізичної моделі динаміки поліхлорбіфенілів на північно-західному шельфі Чорного моря. Модель об'єднує блок розрахунку тривимірних полів течій, солоності та температури, модуль переносу і трансформації детриту із системою рівнянь, які описують концентрацію забруднення в розчині, на частинках детриту та у верхньому шарі донних осадів. Показано, що в рамках сценарію аварійного викиду поліхлорбіфенілів з Георгіївського Гирла Дунаю у весняний період домінуючим транспортним механізмом є горизонтальна адвекція. Адсорбція поліхлорбіфенілів на осідаючих частинках детриту призводить до значного (більше 20% за перші 2 доби після аварії) зменшення маси розчинених поліхлорбіфенілів у воді та послаблення горизонтальних адвективних потоків речовини. При цьому посилюється роль вертикальних потоків, які викликають не тільки швидкий транспорт і накопичення поліхлорбіфенілів на дні, але й повторне забруднення водної товщі.

Ключові слова: поліхлорбіфеніли, перенесення, адсорбція, десорбція, тривимірна модель, потоки речовини, північно-західний шельф Чорного моря.

ABSTRACT The results of simulations carried out using the combined hydrophysical model of polychlorinated biphenyl dynamics on the Black Sea northwestern shelf are analyzed. The model combines the block for calculating current, temperature and salinity three-dimensional fields, the module describing detritus transport and transformation, and the equation system describing contamination concentration in solution, on detritus particles and in the sediment upper layer. It is shown that horizontal advection constitutes the predominant transport mechanism in the scenario of an accidental polychlorinated biphenyl spill from the St George Arm of the Danube in spring. Polychlorinated biphenyl adsorption on the settling detritus particles leads to significant (more than 20% during the first two days after an accident) decrease of the dissolved polychlorinated biphenyl in seawater and to attenuation of the horizontal advective fluxes of the substance. At that the role of vertical fluxes providing not only rapid transport and accumulation of polychlorinated biphenyl on the bottom, but also recontamination of water column grows.

Keywords: polychlorinated biphenyls, transport, adsorption, desorption, 3-D model, fluxes of the substance, northwestern shelf of the Black Sea.