

УДК 502.36:556.013+504.45+519.879.5

**ОБЗОР ПРОГРАММЫ WASP6 ПРИМЕНИТЕЛЬНО  
К ЗАДАЧЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВОДНОЙ ЭКОСИСТЕМЫ  
«АРГАЗИ — МИАСС — ШЕРШНИ»**

**Е.О. Юлаева, К.О. Разнополов, Ю.И. Сухарев**  
e-mail: tiukha@yandex.ru

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Статья поступила 27 декабря 2004 г.

С целью пополнения недостатка воды для Челябинска и других населенных пунктов, потребляющих воду из системы «Аргазинское водохранилище — река Миасс — Шершнёвское водохранилище», намечается осуществить переброску части стока р. Уфа из Долгобродского водохранилища в Аргазинское по специально выстроенному каналу (реконструкция проекта конца 70–х гг. XX века). В связи с этим возникла проблема прогнозирования изменения качества воды как в Аргазинском, так и Шершнёвском водохранилищах в результате подобных гидротехнических мероприятий. В особенности в Шершнёвском водохранилище, где весьма выражено проявление эвтрофирования водоема.

Одним из методов исследования процессов, происходящих в естественных водных системах, является проведение натурных экспериментов (мониторинга), что практически весьма затруднено и требует существенных капитальных затрат. Применение хорошо отлаженных имитационных моделей интересующей нас экосистемы, позволит интерпретировать и предсказать реакцию показателей качества воды в ответ, как на природные феномены, так и на воздействия, обусловленные деятельностью человека, и поможет принимать решения в области управления загрязнением водных ресурсов нашего региона. К настоящему времени сотрудниками кафедры «Общая и инженерная экология» при поддержке специалистов кафедры «Автоматика и управление» ЮУрГУ наработан некоторый опыт в создании имитационных моделей, как естественных водных систем, так систем очистки сточных вод. Моделирование осуществлялось в диалогово-визуальной оболочке Visible Simulation (VisSim®). Все вышесказанное явилось предпосылкой к разработке имитационно-управляющей модели (т. е. модели, обладающей свойствами отражать реальную ситуацию, предсказывать изменения в системе и предоставлять рекомендации к осуществлению задач управления) формирования качества воды экосистемы «Аргазы — Миасс — Шершни». Эта работа ведется совместно с Южно-Уральским филиалом НИИ Водного хозяйства.

Проведенный нами интернет-обзор по оценке мирового опыта в решении проблем моделирования качества воды в реках, озерах, водохранилищах и других подобных экосистемах показал, что подобные работы давно и с успехом реализуются. Среди зарубежных разработчиков можно выделить следующих:

- 1) US EPA, Centre for Assessment Modeling (CEAM) / Агентство по защите окружающей среды, США, Центр оценки моделирования (программы: WASP, QUAL2E и др.) [1];
- 2) US Army Corp of Engineers, Waterways Experiment Station, Environmental Laboratory / Корпорация инженеров Армии США, Экспериментальная станция водных путей, Лаборатория проблем окружающей среды (программы: CE-QUAL-RIV1, CE-QUAL-W2, CE-QUAL-R1 и др.) [2];

- 3) BOSS International / Корпорация специалистов по проблемам воды «БОСС Интернейшнл» (программы: SMS, BOSS RiverCAD и др.) [3].

Среди отечественных авторов особенно значимы, на наш взгляд, разработки представителей следующих институтов:

- 1) Институт гидродинамики СО РАН им. М.А. Лаврентьева, Новосибирск;
- 2) Российский государственный гидрометеорологический университет, Санкт-Петербург;
- 3) Ростовский государственный университет, Ростов-на-Дону (лаборатория системного анализа проблем использования водных ресурсов).

В целом модели качества воды можно классифицировать по сложности, по типу исследуемого объекта и по тем параметрам качества воды, которые может предсказывать модель. Необходимость в выборе более сложной (а значит — и более трудной в настройке, и дорогой) модели определяется в каждом конкретном случае индивидуально и ограничивается возможностями пользователя оснастить ее необходимыми исходными данными.

По нашему мнению для реализации имитационной модели качества воды в системе «Аргизи — Миасс — Шершни» целесообразно воспользоваться возможностями специализированной динамической моделирующей среды WASP6 [1] (Water Quality Analysis Simulation Program, Version 6.0 — Имитационная программа анализа качества воды. Версия 6.0), предназначенной для анализа и прогнозирования качества воды в различных поверхностных водных источниках водоснабжения (в том числе реках и водохранилищах). Такой выбор обусловлен тем, что программа WASP6 свободно (бесплатно) распространяется среди пользователей, является универсальной по всем основным критериям сравнения с другими подобными программами, неоднократно апробирована за рубежом и, что наиболее важно, для нее имеется подробная техническая и методическая документация. Попытка применить настоящую модель осуществляется в России впервые.

WASP — это программа динамического моделирования водных систем, построенная по модульному принципу, включающая в рассмотрение, как толщу воды, так и придонный слой бентоса. В WASP6 встроены два типа специальных кинетических подпрограмм — TOXI (моделирование с учетом влияния токсических веществ) и EUTRO (моделирование по стандартным индикаторам). Программа WASP структурирована таким образом, чтобы формировать из этих подпрограмм законченные пакеты для построения специальных проблемно-ориентированных моделей, имитирующих процесс изменения качества воды в конкретном водоеме или системе водоемов.

Уравнения, на которых базируется модель, основываются на принципе сохранения масс. Этот принцип устанавливает, что каждая составляющая качества воды, начиная от начальной точки пространственного или временного входа, и заканчивая выходом, сохраняет массу в пространстве и времени. Основное уравнение материального баланса для бесконечно малого объема жидкости описывается следующим образом:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(U_x C) - \frac{\partial}{\partial y}(U_y C) - \frac{\partial}{\partial z}(U_z C) + \frac{\partial}{\partial x}\left(E_x \frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(E_y \frac{\partial C}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(E_z \frac{\partial C}{\partial z}\right) + S_L + S_B + S_K,$$

где  $C$  — концентрация индикатора качества воды, мг/л;  $t$  — время, сут;  $U_x, U_y, U_z$  — скорость адвекции в продольном, боковом направлении и по высоте, соответственно, м/сут;  $E_x, E_y, E_z$  — коэффициенты продольной, боковой и вертикальной диффузии, соответственно, м<sup>2</sup>/сут;  $S_L$  — скорость направленной или распределенной загрузки, г/(м<sup>3</sup>·сут);  $S_B$  — массовая скорость заполнения пограничного слоя, г/(м<sup>3</sup>·сут);  $S_K$  — скорость полного кинетического превращения, г/(м<sup>3</sup>·сут).

В WASP это уравнение расширяется до большего контрольного объема (т. е. объема расчетного сегмента). В итоге модель представляет собой набор (сеть) расширенных контрольных объемов (сегментов), которые вместе составляют физическую конфигурацию объекта.

Таким образом, базовая модель, описанная уравнением материального баланса (1), отражает следующие нестационарные процессы:

- 1) адвекция и дисперсия,
- 2) точечный и диффузионный сброс (загрязнителей) водных масс извне,

- 3) превращение вещества, а также
- 4) обменные процессы в пограничных слоях («толща воды — бентос»).

Итак, перед тем, как приступить к моделированию в WASP, исследуемый объект условно разбивается на сегменты по одному, двум или трем направлениям в пространстве (рис. 1). Размеры и число сегментов строго настраиваются, и в каждом конкретном случае будут зависеть: от типа водного объекта, характера течений, наличия и мест расположения пунктов забора воды и сброса загрязнителей, уровня детализации поставленной задачи, шага моделирования и других условий. Разбиение может производиться как «вручную», так и при помощи специальных программ моделирования гидродинамики. Это, например, программы: DYNHYD5, RIVMOD, EFDS или транспортный модуль программы SWMM. Программа DYNHYD5 наиболее совместима с WASP6.

После того, как сеть организована, работа с моделью продолжается в следующих четырех направлениях: гидродинамика, массоперенос, преобразование качества воды и влияние токсических веществ на водный объект.

На первом шаге определяем: где протекает вода? Это выясняется в результате гидрометрических съемок, специальных исследований и гидродинамического моделирования. Существующие в водоемах и водотоках течения могут интерполироваться и экстраполироваться на основе принципа непрерывности. Здесь можно использовать как самые примитивные модели трассировки потока, так и сложные многомерные динамические модели при условии корректного усреднения в пространстве и времени (например, DYNHYD5).

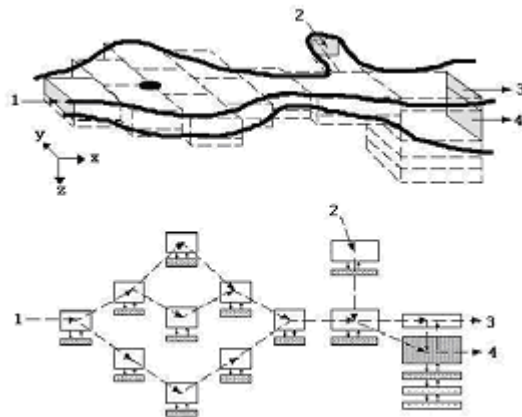


Рис. 1. Организация сети сегментов модельного объекта

На втором шаге нужно ответить на вопрос: где в толще воды переносятся вещества? На этот вопрос можно ответить, исследовав движение химических меток и откалибровав по этим данным модель. В качестве меток обычно используются красители и соли.

Третий шаг отвечает на вопрос: как преобразуются вещества в воде и осадочном слое, и каков этот жизненный цикл? Это основной вопрос многих исследований. Ответ строится на комбинации лабораторных исследований, полевого мониторинга, оценки параметров модели, калибровки и тестирования результатов. Совокупный результат этого шага иногда называют валидацией или верификацией модели.

На последнем шаге ищется ответ на вопрос о возможном влиянии вещества на интересные объекты, такие как люди, животные, водный мир или экологический баланс в целом. Очень часто предсказанные концентрации просто сравниваются с критериями качества воды (ПДВВ), принятыми региональными контролирующими организациями для защиты окружающей среды.

О качестве воды в модельном объекте судят по концентрациям в воде веществ-индикаторов, которые высчитываются программой WASP для каждого сегмента. Поскольку реализованная в WASP модель является динамической, должны быть приняты начальные условия для каждой переменной в каждом из сегментов, характеризующих в зависимости от настройки пользователя (разработчика модели конкретного объекта) поверхностный слой, подповерхностный слой, верхний слой бентоса, нижний слой бентоса. Начальные условия включают

в себя химические концентрации компонент (индикаторов качества воды) на начало моделирования.

Уравнения, составляющие математическую модель качества воды в WASP, описывают процессы и явления представленные ниже.

1. Перенос химических меток (осуществляется для настройки гидродинамики объекта). В 14-ти алгебро-дифференциальных уравнениях описываются: гидродинамическая взаимосвязь между сегментами, гидравлическая геометрия сегментов, внутренняя водная адвекция, внутренняя водная диффузия, пограничные процессы (между сегментами, между сегментами и окружающими внешними факторами), процессы загрузки водного объекта новыми точечными или распределенными потоками.

2. Перемещение отложений. В 10-ти алгебро-дифференциальных уравнениях описываются: процесс перемещения отложений, придонные процессы в твердом стоке.

3. Процессы с вовлечением растворенного кислорода. В 16-ти алгебро-дифференциальных уравнениях, включая стехиометрические, описываются: реаэрация, углеродное окисление, нитрификация, денитрификация, осаждение, развитие и гибель фитопланктона, потребность в кислороде в придонном слое.

4. Эвтрофикация. В 44-х алгебро-дифференциальных уравнениях, включая стехиометрические, описываются: фосфорный цикл (развитие и гибель фитопланктона, минерализация, сорбция, осаждение), азотный цикл (развитие и гибель фитопланктона, минерализация, сорбция, осаждение, нитрификация, денитрификация), взаимодействие между бентосом и толщей воды над ним, кинетика простой и промежуточной эвтрофикации. С точки зрения моделирования качества воды в системе «Аргазь — Миасс — Шершни» наиболее интересны процессы, связанные с эвтрофикацией, поскольку весьма выражены в Шершнёвском водохранилище. В WASP6 обогащение питательными веществами, эвтрофикация и процесс уменьшения концентрации РК (растворенного кислорода) моделируются с использованием встроенной программы EUTRO. На рис. 2 представлена принципиальная схема кинетического взаимодействия для питательного цикла и растворенного кислорода (здесь же представлены переменные состояния модели, реализованной в подпрограмме EUTRO). EUTRO моделирует реакции транспорта и химического превращения вплоть до восьми переменных состояния, изображенных на рис. 2. Основное уравнение массового баланса WASP6 решается для каждой переменной состояния. В этом основном уравнении подпрограмма EUTRO добавляет к общему массовому балансу процессы специфических биохимических превращений всех восьми переменных состояния эвтрофикации как в толще воды, так и в слое бентоса.

5. Действие простых токсических веществ. В 11-ти алгебро-дифференциальных уравнениях описываются: кинетика полного распада первого порядка, частные химические превращения первого порядка, сорбция.

6. Действие органических химикатов. В 76-ти уравнениях и выражениях химической кинетики описываются: ионизация, сорбция, летучие органические вещества, гидролиз, фотолиз, окисление, биологический распад, другие внешние реакции.

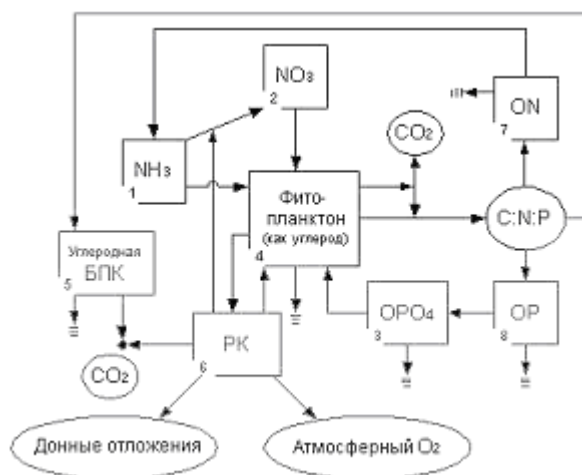


Рис. 2. Принципиальная схема кинетического взаимодействия веществ при эвтрофикации

В целом математическое описание WASP-модели составляет систему 171 уравнений (алгебраических, дифференциальных обычных и в частных производных, стехиометрических, и уравнений химической кинетики). Программа предполагает подключение, как всех уравнений, так и части из них в зависимости от решаемой задачи, назначаемых допущений и предположений, и оснащенности исходными данными. Входные данные вместе с основными WASP-уравнениями массового баланса и уравнениями специальной химической кинетики единственным образом определяют набор уравнений качества воды конкретного объекта. Эти уравнения подвергаются численному интегрированию программой WASP6, показывая, как проходит имитация во времени [4].

## Заключение

Первым шагом в применении модели является анализ решаемой задачи. Какие вопросы подлежат разрешению? Как имитационная модель может помочь при ответе на эти вопросы? Принципиально модель качества воды подразумевает решение трех основных типов задач:

- 1) описывать существующее состояние качества воды;
- 2) осуществлять общее предсказание;
- 3) осуществлять локальные предсказания для конкретных условий в конкретном водоеме.

Первая, описательная задача позволяет в некотором смысле расширить ограниченные локальные знания, основанные на местных измерениях. Поскольку мониторинг обходится очень дорого, необходимы данные такого пространственного и временного разрешения, которые, по крайней мере, минимально позволяют описать водный объект. Описательные модели можно использовать для планирования процедур мониторинга и измерений. Эти модели могут также быть использованы для выявления наиболее важных процессов, обуславливающих текущее качество воды.

Обеспечение общих предсказаний — это вторая задача моделирования. Нет необходимости иметь подробные локальные данные для того, чтобы предсказать последствия воздействия какого-либо химиката (загрязнителя) для конкретного типа водоема (водохранилища, реки и т. д.). Достаточно иметь грубый набор данных для оценки потенциального риска нежелательного воздействия. Общие предсказания могут использоваться также для решения организационных задач или в качестве предварительного этапа для более детальных исследований.

Обеспечение локальных предсказаний — это наиболее строгая задача моделирования. Для получения правдоподобных предсказаний необходима калибровка модели на основе «хорошего» набора данных мониторинга. Поскольку предсказания часто приводят к экстраполяции за пределы существующего набора данных, модель должна обладать достаточной внутренней целостностью. В качестве примеров задач локальных предсказаний можно рассматривать:

- 1) задачу распределения точечных загрязнителей при условии соблюдения стандартов качества воды;
- 2) задачу анализа возможных восстановительных мероприятий, таких, как доочистка сточных вод, запрещение выпуска фосфатов в окружающую среду или наиболее эффективные агрокультурные мероприятия по минимизации воздействия на окружающую среду.

Программа WASP способна визуализировать любую из поставленных задач в зависимости от степени детализации имеющихся исходных данных. WASP6 фактически включает в себе две программы — моделирование гидродинамики водного объекта (DYNHYD5) и моделирование качества воды по основным индикаторам (собственно WASP6: EUTRO и TOXI). Сочетание использования разных видов подпрограмм, включение в рассмотрение различных констант и переменных состояния, возможность учета поверхностного рассредоточенного стока или локального сброса сточных вод, грамотное построение сети сегментов и назначение шага моделирования, и другие специфические возможности модели — все это при должном анализе поставленной задачи позволит наиболее адекватно отразить моделью реальные процессы в рассматриваемом объекте и давать весьма точные прогнозы изменения состояния объекта при различных видах внешних воздействий. Безусловно, наиболее существенный этап в формировании конкретной модели — это верификация, которая складывается из комбинации лабораторных исследований, полевого мониторинга, оценки констант, калибровки и тестирования мо-

дели. Успех этого шага зависит от квалификации пользователя (разработчика конкретной модели), вынужденного комбинировать специальные знания со здравым смыслом и скептически относиться к методологическому процессу.

**Список литературы**

1. <http://www.epa.gov/athens/wwqtsc/html/wasp.html>
2. <http://www.wes.army.mil/el/elmodels/>
3. [http://www.bossintl.com/html/surface\\_water\\_modeling\\_product.html](http://www.bossintl.com/html/surface_water_modeling_product.html)
4. Ambrose, R.B. et al. Water Quality Analysis Simulation Program (WASP), Version 6.0 — DRAFT: User's Manual. U.S. Environmental Protection Agency, 1996.