

УДК 556

МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ОЦЕНКЕ ВНУТРЕННЕЙ НАГРУЗКИ ВОДОЕМОВ ТЯЖЕЛЫМИ МЕТАЛЛАМИ

М. В. ШМАКОВА ^{1*}, А. В. РАХУБА ^{2**}

¹ *Институт озероведения, Санкт-Петербургский Федеральный
исследовательский центр РАН (ИНОЗ РАН – СПб ФИЦ РАН),
Санкт-Петербург, Россия*

² *Институт экологии Волжского бассейна, Самарский федеральный
исследовательский центр РАН (ИЭВБ РАН – СамФИЦ РАН),
Тольятти, Россия*

Повышенная мутность воды в водных объектах негативно влияет на функционирование водных экосистем и может осложнять ряд аспектов водопользования. Адсорбированные на поверхности частицы донного грунта и взвесей тяжелых металлов при взмучивании донных отложений увеличивают валовое содержание поллютантов в водных массах. Негативное влияние тяжелых металлов на организмы гидробионтов усугубляется тем, что тяжелые металлы устойчивы к разрушению в течение многих лет, они быстро накапливаются в гидробионтах и очень медленно выводятся из организмов. В настоящее время для оценки распространения полей повышенной мутности прибегают к гидродинамическим расчетам. Численные эксперименты на гидродинамической модели позволяют дать непрерывную оценку распространения полей мутности и рассчитать последствия возможных гидротехнических мероприятий, связанных с инициацией повышенной мутности в акватории.

<https://doi.org/10.46991/PYSUC.2025.59.2.604>

Keywords: reservoir, heavy metals, mathematical modeling, turbidity, bottom sediments.

Введение. Одной из важнейших социально-экономических проблем в настоящее время является качество воды водных объектов. Тяжелые металлы (ТМ), один из важнейших показателей качества воды, необходимы для биологического метаболизма в следовых количествах (Fe, Zn, Cu, Co, Cr, Mn и Ni), однако в повышенных концентрациях эти вещества становятся токсичными. Такие металлы, как Pb, Hg, Cd и другие, не подходят для биологических функций и положительно токсичны. Токсичность этих элементов вызывает серьезную озабоченность во всем мире из-за их воздействия на окружающую среду, в связи с чем необходимо всестороннее изучение вопросов загрязнения ТМ водных объектов [1, 2]. Основной причиной антропогенного поступления

* E-mail: m-shmakova@yandex.ru

** E-mail: rahavum@yandex.ru

ТМ в водные объекты является нерегламентируемая хозяйственная деятельность на территории водосбора и в пределах водного объекта – промышленные и коммунальные сточные воды, выбросы промышленных предприятий, продукты сгорания топлива, горнодобывающая промышленность, сельское хозяйство; эмиссия из почвы с загрязненных территорий и так далее. Природными источниками ТМ в водных объектах являются грунтовые воды, питающие водный объект, эмиссия с разных типов подстилающей поверхности водосбора, продукты почвенной эрозии, атмосферные осадки. В табл. 1 приведены данные о содержании некоторых ТМ в воде и на взвесьях в среднем по изученным водотокам мира [3].

Таблица 1

Среднее содержание в воде и взвесьях (%) ТМ для рек мира, мкг/л [3]

Металлы	Вода	Взвесь	Донные осадки
Cu	15,7	84,3	57,0
Zn	12,4	87,6	80,0
Mn	2,0	98,0	0,76
Pb	1,4	98,6	20,0

Материалы и методы исследования. Одним из эффективных методов контроля качества воды, рационального использования водных объектов и планирования водохозяйственной деятельности является математическое моделирование. Внутренняя нагрузка или вторичное загрязнение водных объектов происходит в результате поступления в водные массы загрязняющих веществ из донных отложений и поровых вод. При этом валовое содержание загрязняющего вещества в акватории формируется из фоновой концентрации, концентрации в поровых водах и количестве адсорбированных на поверхности частиц донных отложений и взвеси вещества. Можно выделить следующие основные механизмы поступления ТМ в водные массы в результате внутренней нагрузки:

- 1) процессы десорбции;
- 2) диффузионный массообмен между поровыми водами и придонным слоем, вызванный градиентами в таких переменных состояния среды как плотность, температура, минерализация;
- 3) массоперенос за счет интенсивного перемешивания, вызванного неблагоприятными гидрометеорологическими явлениями, а также антропогенными факторами, такими как дноуглубление, дампинг, гидротехническое строительство, прохождение судов и так далее.

В настоящее время при рассмотрении задачи вторичного загрязнения ТМ, как правило, основное внимание уделяется механизмам поступления разных форм ТМ из донных отложений и поровых вод в водные массы. Однако неотъемлемой частью решения данной задачи является количественная оценка массы взмученных донных отложений. Эта оценка неразрывно сопряжена с решением уравнений двухфазного массопереноса. В табл. 2 приведены основные процессы гетерофазного массообмена в системе донные отложения–

поровые воды–взвесь–водные массы, переменные состояния этой системы, определяющие направленность и скорость процессов, и уравнения, описывающие эти процессы.

Таблица 2

*Основные процессы гетерофазного массообмена в системе
донные отложения–поровые воды–взвесь–водные массы*

Процесс	Переменные состояния	Уравнения и модели
Адсорбция/десорбция на взвесьях	$pH \uparrow \downarrow$ детрит $\uparrow \downarrow$ взвесь $\uparrow \downarrow$ энергия потока $\uparrow \downarrow$	Уравнения процессов сорбции/десорбции в системе водные массы–взвесь [3]
Адсорбция/десорбция в донных отложениях	$pH \uparrow \downarrow$ Eh $\uparrow \downarrow$ детрит $\uparrow \downarrow$	Уравнения процессов сорбции/десорбции в системе поровые воды–водные массы–донные отложения [3]
Диффузия из/в поровые воды	Градиент температуры воды, плотности и минерализации $\uparrow \downarrow$	Уравнения диффузного массообмена в системе поровые воды–водные массы [4]
Растворение	$pH \downarrow$ Eh \downarrow взвесь \downarrow детрит \downarrow растворенная органика \uparrow	Уравнение кинетики растворения [3]
Взмучивание/осаждение донных отложений	Транспортирующий потенциал потока $\uparrow \downarrow$	Гидродинамические модели, дополненные алгоритмами двухфазного массопереноса [5–7]
Распространение загрязняющих веществ в акватории	Стокные, дрейфовые течения	Уравнения турбулентной диффузии для растворенной примеси [4]

При построении модели необходимо определиться с тем, какие процессы будут аппроксимированы математическим аппаратом, какие при этом будут сделаны допущения (например, примесь будет считаться консервативной, а процессы гетерофазного массообмена – динамически равновесными). Также необходимо скоординировать характерное время всех рассматриваемых процессов в соответствии со структурным уровнем моделирования. Характерное время доминирующих потоков ТМ оценивается через интенсивность процессов [3]:

- молекулярной диффузии $T_{\text{пор.}} \sim \frac{D_{\text{м пор.}}}{\Delta H^2}$, где $D_{\text{м пор.}}$ – коэффициент молекулярной диффузии, ΔH – мощность донных отложений;

- десорбции с донных отложений $T_{\text{десорб.}} \sim \frac{D_{\text{м частиц}}}{r^2}$, где $D_{\text{м частиц}}$ – коэффициент диффузии ионов меди в материале частиц, как правило кварца; r – размер частиц;

- размыва дна $T_{\text{раз.}} \sim \frac{\Delta H}{V_h}$, где V_h – скорость размыва донных отложений.

При этом в ряде случаев полезно оценить вклад моделируемого компонента в рассчитываемый общий поток вещества, и при незначительном вкладе имеет смысл упростить модель, чтобы не утяжелять алгоритмы. Следует также иметь в виду, что масштаб моделирования определяет и границы применимости полученных результатов.

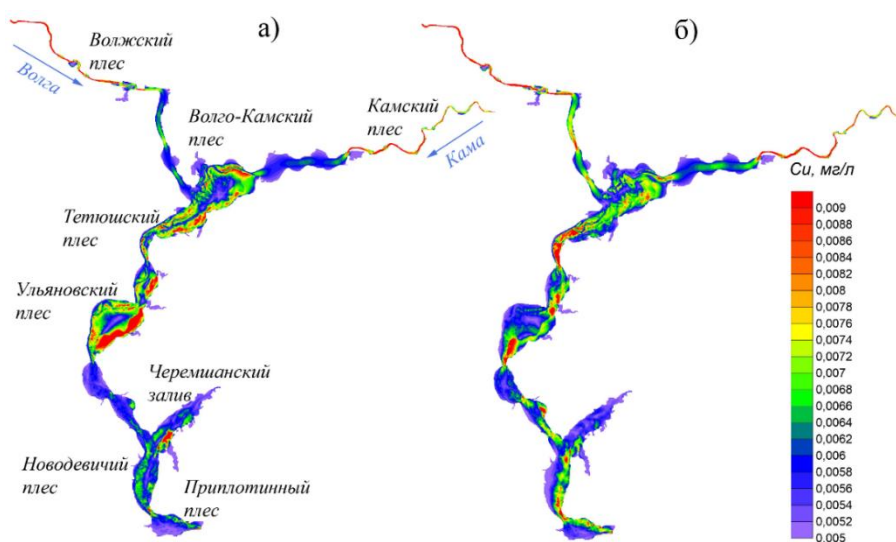
Результаты исследований и их обсуждение.

Пример моделирования. В качестве примера моделирования внутренней нагрузки ТМ на водную акваторию можно привести гидродинамическую систему двухфазного массопереноса [5–7], разработанную в ИЭВБ РАН и ИНОЗ РАН – СПб ФИЦ РАН, и результаты моделирования распространения валового содержания меди в акватории Куйбышевского водохранилища для неблагоприятных гидрометеорологических условий. Разработанная авторами моделирующая система основана на балансе сил, действующих в системе водный поток–донные отложения–наносы [5–7]. Основной особенностью разработанной системы является представление взаимодействия дна и потока через донные отложения, а также учет взаимовлияния гидравлических переменных состояния потока воды и твердого вещества. Данная моделирующая система была неоднократно использована для оценки динамики твердого вещества в акватории водохранилища в разных приложениях (мутность воды, удельный расход наносов, заиление водохранилища речными наносами, максимально возможная мутность) и показала хорошие результаты [5].

В приложении к расчетам внутренней нагрузки акватории водохранилища тяжелыми металлами алгоритмы модели были дополнены схемой учета разнофракционности донных отложений, участвующих в процессах взмучивания и зависимостями содержания адсорбированного вещества на поверхности донных отложений от крупности частиц в исследуемом водоеме. Валовое содержание ТМ в водных массах рассчитывалось как сумма фоновой концентрации, концентрации в поровых водах и массы адсорбированного вещества на частицах взмученного донного грунта. Следует заметить, что гетерофазный массообмен между поровыми водами и донными отложениями, а именно процессы адсорбции и десорбции, в модели не рассматривается, то есть система поровые воды–донные отложения–водная масса полагается равновесной. При этом, в отличие от принятых алгоритмов оценки нагрузки ТМ донных отложений эффективной крупности учитывается кривая гранулометрического состава донных отложений. Последнее позволяет избежать смещения в оценке общего содержания адсорбированных на поверхности частиц ТМ за счет погрешностей в определении эффективной крупности.

Куйбышевское водохранилище, одно из крупнейших в мире, представляет собой огромную емкость, аккумулирующую загрязняющие вещества, поступающие с территории водосборной площади в растворенном и адсорбированном на твердых частицах виде. При этом замедленный водообмен Приплотинного плеса определяет последний как наиболее загрязненную часть водохранилища. Основными источниками поступления ТМ в акваторию Куйбышевского водохранилища помимо ТМ, поступающих из верхних створов, является эмиссия и почвенная эрозия с подстилающей площади водосбора. За длительный период (1958–2024 гг.) эксплуатации Куйбышевского водохранилища в донных отложениях накоплено большое количество ТМ [8]. Это создает опасность локального ухудшения качества воды в литоральной части водохранилища, где предпочтительно располагаются оголовки водозаборов, зоны отдыха и сосредоточена основная биомасса водных организмов.

На рисунке приведены результаты моделирования валового содержания меди в водной толще Куйбышевского водохранилища при неблагоприятных гидрометеорологических условиях (северо-западные и юго-западные ветра скоростью 15 м/с). Распределение концентрации меди в воде имеет явно выраженный неоднородный характер по всей акватории водохранилища, который определяется сложным гидродинамическим режимом Жигулевской ГЭС, а именно сработкой и динамикой водности в течение года и действием разнонаправленных ветров, которые вызывают различные дрейфовые течения. В верхней части водохранилища, в Волжском и Камском районах переменного подпора преобладают сильные стоковые течения (3–34 см/с), тогда как в остальных плесах водохранилища в условиях ветрового воздействия формируется сложная циркуляция разнонаправленных вихревых течений. Наибольшие орбитальные скорости в крупномасштабных вихрях достигают 7–12 см/с, в вихрях меньших размеров – 1–4 см/с.



Пространственное распределение валового содержания меди (мг/л) в Куйбышевском водохранилище при юго-западном (а) и северо-западном (б) ветрах скоростью 15 м/с.

Расчеты показывают, что в гидродинамически активных Камском и Волжском плесах валовая концентрация меди при взмучивании достигает 0,007–0,012 мг/л. Потoki с малыми скоростями ветровых течений образуют зоны с невысоким валовым содержанием меди в воде, близким к фоновым значениям – 0,005–0,0056 мг/л. В Куйбышевском водохранилище такие зоны расположены в устьевых областях рек Свияги, Казанки, Меши и в Черемшанском заливе. В открытой части Волго-Камского, Тетюшского, Ульяновского, Новодевичьего и Приплотинного плесов сосредоточены потоки с высокими скоростями ветровых течений, которые формируют зоны взмучивания с повышенным валовым содержанием меди в воде – 0,007–0,025 мг/л.

Значение коэффициента C_v , характеризующего пространственную неоднородность распределения меди в акватории Куйбышевского водохранилища

при отсутствии ветра, составляет 11%. При задании в модели ЮЗ ветра неоднородность распределения меди увеличивается до 16%, а при задании ветра СЗ направления – до 22%.

В результате, зоны наиболее интенсивного взмучивания формируются в основном вдоль левобережья мелководных районов всех плесов, в гидрографических сужениях между плесами, в Волжском и Камском русловых районах переменного подпора Куйбышевского водохранилища. Модельные расчеты внутренней нагрузки медью в условиях штормовых ветров показывают, что ее валовая концентрация в воде может превышать фоновые значения в 2–5 раз.

Заключение. Загрязняющие вещества, попадающие в водные массы со взмученными донными отложениями, могут значительно ухудшить экологическое состояние водного объекта и негативно повлиять на ряд аспектов водопользования. Для разработки рекомендаций по снижению уровня загрязнения и способов управления состоянием загрязнения водных объектов необходимо создание методов прогнозирования распространения загрязняющих веществ в водном объекте под влиянием природных и антропогенных факторов. При этом модель, описывающая процессы распространения загрязняющих веществ, должна быть обеспечена типовыми данными сетевого мониторинга, а точность результатов должны соответствовать точности измерения исходных данных. Приведенные результаты моделирования валового содержания меди в Куйбышевском водохранилище при неблагоприятных гидрометеорологических условиях продемонстрировали возможности моделирующей системы, разработанной авторами данного исследования и основанной на уравнениях гидродинамики и алгоритмах двухфазного массопереноса.

Поступила 04.04.2025

Получена с рецензии 20.06.2025

Утверждена 15.08.2025

ЛИТЕРАТУРА

1. Gadd G.M., Griffiths A.J. Microorganisms and Heavy Metal Toxicity. *Microbial Ecology* **4** (1977), 303–317.
<https://doi.org/10.1007/BF02013274>
2. Gadd G.M. Heavy Metal Accumulation by BACTERIA and Other Microorganisms. *Experientia* **46** (1990), 834–840.
<https://doi.org/10.1007/BF01935534>
3. Веницианов Е.В., Лепихин А.П. *Физико-химические основы моделирования миграции и трансформации тяжелых металлов в природных водах*. Екатеринбург, РосНИИВХ (2002), 236.
4. *Методические основы оценки и регламентирования антропогенного влияния на качество поверхностных вод* (под ред. А.В. Караушева, 2-ое изд.). Ленинград, Гидрометеиздат (1987), 285.
5. Рахуба А.В., Шмакова М.В. Нестационарный режим водохранилища: опыт моделирования русловых процессов с подвижным дном. *Фундаментальная и прикладная гидрофизика* **15** (2022), 138–149.
6. Шмакова М.В. *Речные наносы и почвенная эрозия: методы и модели*. Москва, ИНФРА-М (2024), 292.
7. Shmakova M. Sediment Transport in River Flows: New Approaches and Formulas. In Book: *Modeling of Sediment Transport*. IntechOpen (2022).
<http://dx.doi.org/10.5772/intechopen.103942>

8. Степанова Н.Ю., Латыпова В.З. Механизмы детоксикации тяжелых металлов в компонентах водной экосистемы Куйбышевского водохранилища. *Ученые записки Казанского государственного университета* **147** (2005), 18–26.

Մ. Վ. ՇՄԱԿՈՎԱ, Ա. Վ. ՌԱԽՈՒԲԱ

ՋՐԱՎԱԶԱՆՆԵՐԻ ԾԱՆՐ ՄԵՏԱՂՆԵՐՈՎ ԾԱՆՐԱԲԵՌՆՎԱԾՈՒԹՅԱՆ ԳՆԱՀԱՏՄԱՆ ՄԱԹԵՄԱՏԻԿԱԿԱՆ ՄՈԴԵԼԱՎՈՐՄԱՆ ՄԵԹՈԴՆԵՐ

Ա մ փ ո փ ու մ

Ջրային մարմիններում ջրի պղտորության բարձրացումը բացասաբար է անդրադառնում ջրային էկոհամակարգերի գործունեության վրա և կարող է բարդացնել ջրօգտագործման մի շարք ասպեկտներ: Մակերեսին աղստորված հողի հատակի մասնիկները և ծանր մետաղների կախությունները մեծացնում են աղտոտիչների համախառն պարունակությունը ջրային զանգվածներում, երբ հատակի նստվածքները խառնվում են: Ծանր մետաղների ջրային օրգանիզմների վրա բացասական ազդեցությունը սրվում է այն փաստով, որ ծանր մետաղները տարիներ շարունակ դիմացկուն են քայքայմանը, դրանք արագ կուտակվում են ջրային օրգանիզմներում և շատ դանդաղ են արտազատվում օրգանիզմներից: Ներկայումս հիդրոդինամիկական հաշվարկներն օգտագործվում են անող պղտորության դաշտերի տարածումը գնահատելու համար: Հիդրոդինամիկ մոդելի թվային փորձերը թույլ են տալիս անընդհատ գնահատել պղտորության դաշտերի տարածումը և հաշվարկել ջրային տարածքում պղտորության անի հետ կապված հնարավոր հիդրավիկ ինժեներական միջոցառումների հետևանքները:

MATHEMATICAL MODELING METHODS FOR ESTIMATING THE INTERNAL LOAD OF RESERVOIRS WITH HEAVY METALS

Summary

Increased turbidity of water in water bodies negatively affects the functioning of aquatic ecosystems and can complicate a number of water use aspects. Heavy metals adsorbed on the surface of bottom soil particles and suspensions increase the total content of pollutants in the water masses during agitation of bottom sediments. The negative effect of heavy metals on aquatic organisms is compounded by the fact that heavy metals are resistant to degradation for many years, they accumulate rapidly in aquatic organisms and are very slowly eliminated from organisms. Currently, hydrodynamic calculations are used to estimate the spread of turbidity fields. Numerical experiments based on a hydrodynamic model make it possible to continuously assess the spread of turbidity fields and calculate the consequences of possible hydraulic engineering measures related to the initiation of increased turbidity in the water area.