

К. А. Слепчук, Т. В. Хмара

*Морской гидрофизический институт РАН, г. Севастополь***ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОПТИМИЗАЦИОННОГО МЕТОДА  
В КАЛИБРОВКЕ БИОГЕОХИМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ**

Обсуждается возможность применения методов оптимизации математического программирования в калибровке биогеохимических моделей. Описывается использование одномерного варианта модели качества вод для прогноза динамики фитопланктона и биогенных элементов поверхностных вод акватории Севастопольской бухты. Данные, полученные в процессе вычислительного эксперимента, сопоставляются с натурными данными, осредненными за 2001 – 2005 гг. В связи с достаточными большими несоответствиями данных, рассчитанных по модели, и натурных данных применяется оптимизационный метод Хука-Дживса.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** *биогеохимическое моделирование, калибровка биогеохимической модели, методы оптимизации, метод Хука-Дживса*

Описывание геохимических процессов, протекающих при участии веществ естественного и антропогенного происхождения, играет важную роль при моделировании состояния морских экосистем. Геохимические процессы в море обусловлены, прежде всего, скоростью химических реакций и скоростью доставки реагентов. Определение скоростей химических реакций представляет сложную проблему. Можно определять их в лабораторных условиях, либо вычислять косвенным методом, решая обратные задачи для уравнений моделей геохимических процессов. Определение характеристик скоростей реакций в лабораторных условиях наталкивается на принципиальные трудности, зачастую связанные с невозможностью добиться выполнения условий подобия процессов в малых масштабах лабораторной установки по отношению к процессам, протекающим в морской среде. Интерпретация лабораторных опытов, как и определение скоростей реакций по данным, полученным *in situ*, требует создание моделей геохимических процессов, адекватных условиям их протекания в морской среде [1].

Математические модели качества вод являются частным случаем комплексных моделей функционирования и динамики водных экосистем. Они состоят из гидродинамического и химико-биологического блоков. Последний, в свою очередь, делится на блок самоочищения, в котором рассчитывается убыль концентрации загрязняющего вещества в каждой локальной точке пространства в результате совокупного действия различного рода физико-химических, химических, биохимических и биологических процессов, протекающих в морской среде, и блок эвтрофикации, представляющий собой замкнутую систему дифференциальных уравнений, которые описывают биогеохимические циклы биогенных элементов, продукцию и деструкцию органического вещества, трофические связи и динамику кислорода в локальной точке водной среды.

**Материалы и методы.** В данной работе для прогноза динамики эколо-

гических параметров использовалась модель качества вод *MECCA (Model for Estuarine and Coastal Circulation Assessment)* [2].

В соответствии с методами осреднения, модель может иметь различную пространственно-временную разрешающую способность. Калибровка и эксплуатация трехмерной прогностической модели водной экосистемы предъявляет высокие требования к вычислительным возможностям ЭВМ и требует значительных, зачастую нереальных затрат машинного времени и времени исследователя. Поэтому на начальном этапе используется одномерный (с разрешением по вертикали) вариант, где все данные натурных измерений осреднены по пространству и времени и привязаны к точке и к моменту середины каждого месяца. Глубина в этой точке принималась равной средней по бухте. И лишь после его калибровки и верификации можно будет перейти к реализации трехмерного варианта модели, в ходе которой производится коррекция уже установленных ранее параметров и коэффициентов модели.

В уравнения блока эвтрофикации модели включены параметры (удельные скорости химико-биологических процессов) и коэффициенты в эмпирических уравнениях, описывающих изменчивость значений этих параметров в зависимости от характеристик среды и внешних факторов. Осуществляется анализ чувствительности модели к вариациям ее параметров и факторам внешней нагрузки. Такой анализ проводится по каждому параметру  $p_k$  в отдельности. Основан он на том, что диапазон возможных изменений параметра установлен на этапе прекалибровки (анализ данных литературных источников о скоростях химико-биологических процессов) или в ходе специальных экспериментов. Далее, варьируя эти параметры в рамках возможного диапазона их изменчивости, проводится попытка достижения максимального соответствия модельных результатов и данных наблюдений, используя минимизацию суммы квадратов отклонений данных, рассчитанных по модели, и натурных данных [3].

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

Внутренние параметры блока обозначим  $n$ -мерным вектором  $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ , выходные параметры –  $m$ -мерным вектором  $Y = (y_1, y_2, \dots, y_m)$ , а значения удельных скоростей и коэффициентов  $l$ -мерным вектором  $P = (p_1, p_2, \dots, p_l)$ .

Для того чтобы найти набор параметров  $P$ , который будет максимально приближать множество моделируемых данных  $\{Y_m\}$  к множеству экспериментальных данных  $\{Y_e\}$ , нужно минимизировать сумму квадратов ошибок:

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

Чтобы найти минимум функционала (1), нужно воспользоваться методами оптимизации. Существует множество методов оптимизации [4]. Их

можно разделить на:

1. Методы без ограничений:

а) методы прямого поиска – методы, в которых используются только значения функций.

– метод Хука-Дживса, где поиск состоит из последовательности шагов исследующего поиска вокруг базисной точки, за которой в случае успеха следует поиск по *образцу*;

– симплексный метод Нелдера-Мида. Идея метода состоит в сравнении значений функции в  $(n + 1)$  вершинах симплекса и перемещении симплекса в направлении оптимальной точки с помощью итерационной процедуры;

б) градиентные методы, в которых наряду со значениями функции используется и ее градиент, где за направление убывания функции берется направление, обратное градиенту функции:

– метод наискорейшего спуска;

– метод Давидона-Флетчера-Пауэлла основан на свойствах квадратичных функций;

– метод Флетчера-Ривса основан на том, что для квадратичной функции  $n$  переменных  $n$  одномерных поисков вдоль взаимно сопряженных направлений позволяют найти минимум.

2. Методы с ограничениями, где в условиях на переменные накладываются ограничения в виде равенств и неравенств:

а) модифицированный метод Хука-Дживса;

б) модифицированный симплексный метод Нелдера-Мида (метод Бокса).

Для нахождения минимума функционала (1) нужно использовать методы прямого поиска. Градиентные методы, несмотря на их преимущество перед методами прямого поиска в скорости нахождения минимума, не подойдут, т.к. функционал задан неявно.

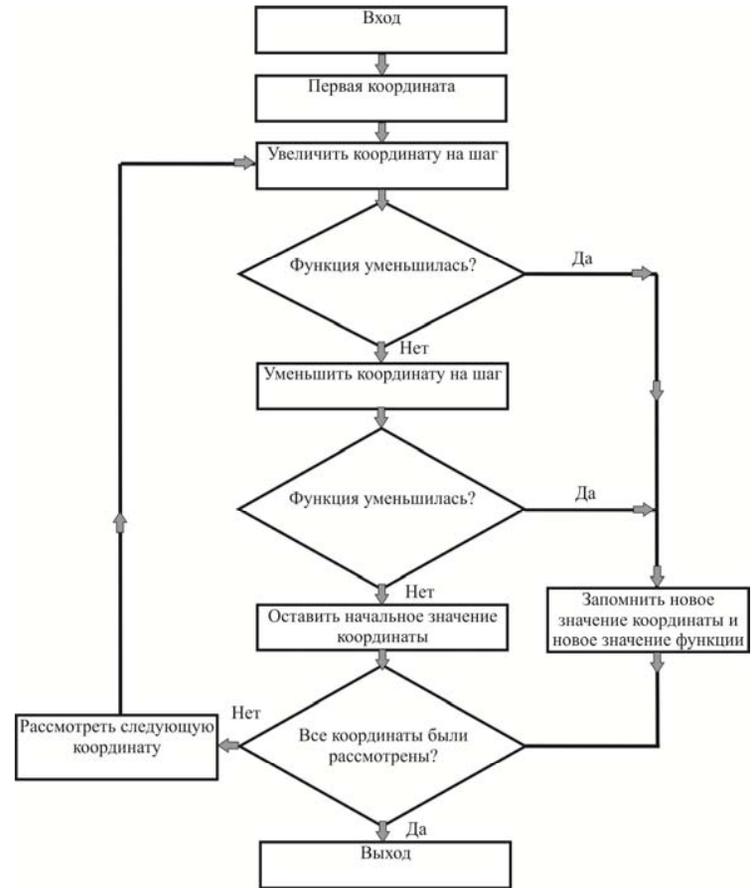
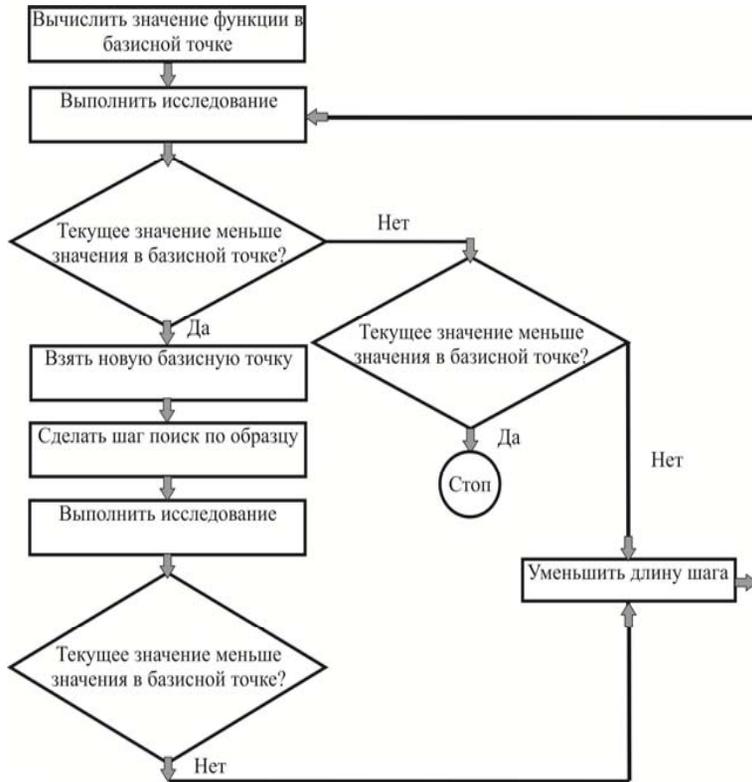
В [5] авторы пишут о проблеме подбора параметров в моделях динамики экологических систем. Ими используется симплексный метод Нелдера-Мида для нахождения параметров в модели кинетики Моно [6], Халдэна [7] и в модели упрощенной микробной кинетики [8]. В своей работе мы используем метод Хука-Дживса (рис. 1). Суть метода заключается в следующем:

1. Выбираем начальную базисную точку  $p_1$  и шаг длиной  $h_j$  для каждой переменной  $x_j, j = 1, 2, \dots, n$ .

2. Вычисляем  $E(P)$  в базисной точке  $p_1$ , с целью получения сведений о локальном поведении функции  $E(P)$ . Эти сведения будут использоваться для нахождения подходящего направления поиска по образцу, с помощью которого можно надеяться достичь большего убывания значения функции. Функция  $E(P)$  в базисной точке  $p_1$  находится следующим образом:

а) вычисляется значение функции  $E(p_1)$  в базисной точке  $p_1$ ;

б) каждая переменная по очереди изменяется прибавлением длины шага. Таким образом, мы вычисляем значение функций  $E(p_1 + h_1 e_1)$ , где  $e_1$  – единичный вектор в направлении оси  $x_1$ . Если это приводит к уменьшению значения функции, то  $p_1$  заменяется на  $p_1 + h_1 e_1$ . В противном случае вычисляется значение функции  $E(p_1 - h_1 e_1)$ , и если ее значение уменьшилось, то  $p_1$  заменяем на  $p_1 - h_1 e_1$ . Если ни один из проделанных шагов не приводит к уменьшению значению функции, то точка  $p_1$  остается неизменной и рассмат-



Р и с . 1 . Алгоритм оптимизационного метода Хука-Дживса.

риваются изменения в направлении оси  $x_2$ , т.е. находится значение функции  $E(p_1 + h_2e_2)$  и т.д. Когда будут рассмотрены все  $n$  переменные, мы будем иметь новую базисную точку  $p_2$ ;

в) если  $p_2 = p_1$ , т.е. уменьшение функции не было достигнуто, то исследование повторяется вокруг базисной точки  $p_1$ , но с уменьшенной длиной шага;

г) если  $p_2 \neq p_1$ , то производится поиск по образцу.

3. При поиске по образцу используется информация, полученная в процессе исследования, и минимизация функции завершается поиском в направлении, заданным образцом. Эта процедура производится следующим образом:

а) разумно двигаться из базисной точки  $p_2$  в направлении  $p_2 - p_1$ , поскольку поиск в этом направлении уже привел к уменьшению значения функции. Поэтому вычислим функцию в точке образца  $B_1 = p_1 + 2(p_2 - p_1)$ . В общем случае  $B_i = p_i + 2(p_{i+1} - p_i)$ ;

б) затем исследование следует продолжать вокруг точки  $B_1$  ( $B_i$ ).

в) если наименьшее значение на шаге 3б меньше значения в базисной точке  $p_2$  (в общем случае  $p_{i+1}$ ), то получают новую базисную точку  $p_3$  ( $p_{i+2}$ ), после чего следует повторить шаг 3а). В противном случае не производить поиск по образцу из точки  $p_2$  ( $p_{i+1}$ ), а продолжать исследования в точке  $p_2$  ( $p_{i+1}$ ).

4. Завершить этот процесс следует, когда длина шага (длины шагов) будет уменьшена до заданного малого значения.

Этот метод был включен в программный код модели *MECCA*. Модель считала с заданными параметрами  $P$ . В середине каждого месяца расчетного года, данные, рассчитанные моделью, сравнивались с осредненными натурными данными, вычислялась ошибка. Когда модельный счет заканчивался, накопленная ошибка сравнивалась с предыдущей ошибкой (с предыдущим расчетом, где использовались другие значения параметров  $P$ ). Далее, в соответствии с оптимизационным методом, изменялись значения параметров.

В данной работе было проведено моделирование годовой динамики экологических параметров в акватории Севастопольской бухты. Используя метод Хука-Дживса, были получены значения параметров и коэффициентов химико-биологического блока модели (таблица), динамика фитопланктона (рис.2) и других экологических параметров.

Блок эвтрофикации модели состоит из системы 18 дифференциальных уравнений. Уравнение биомассы фитопланктона для локальной точки прост-

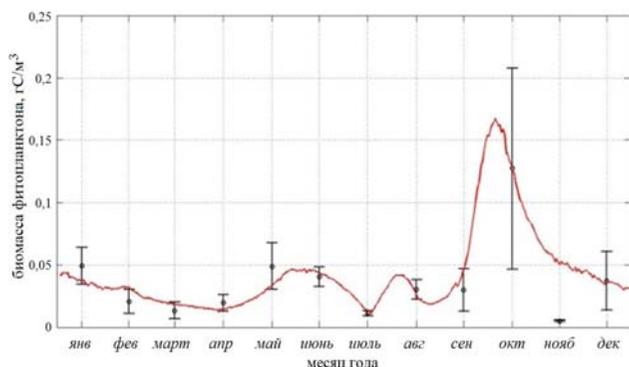


Рис. 2. Годовая динамика биомассы фитопланктона поверхностных вод Севастопольской бухты по данным моделирования, где кривая линия соответствует рассчитанным по модели данным, точки — осредненным данным за 2001 – 2005 гг.

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

параметр		значение	размерность
$V_f^{max}$	Максимальная удельная скорость роста фитопланктона	0,78 (0,92) <sup>1</sup> (1,0) <sup>2</sup>	1/сут
$\zeta_1$	Коэффициенты, определяющие характер влияния температуры на рост водорослей в диапазонах выше и ниже $T_m$	0,006 (0,004) <sup>2</sup>	1/°C <sup>2</sup>
$\zeta_2$		0,004 (0,008) <sup>1</sup> (0,006) <sup>2</sup>	
$T_m$	Оптимальная для роста водорослей температура воды	7 (17) <sup>1</sup> (23) <sup>2</sup>	°C
$\Pi_N$	Константы полунасыщения интенсивности процесса утилизации фитопланктоном минеральных соединений азота и фосфора	0,023	гN/м <sup>3</sup>
$\Pi_{PO_4}$		0,0023	гP/м <sup>3</sup>
$\varphi_r$	Удельная скорость метаболизма водорослей при температуре $T_r$	0,05	1/сут
$w_{gf}$	Скорость гравитационного осаждения клеток фитопланктона	0,7	м/сут

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

ранства выглядит следующим образом:

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

где  $\sigma_f = V_f^{max} f_1(I) f_2(C_N, C_{PO_4}) f_3(T),$

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

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

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

$$f_2(C_N, C_{PO_4}) = \min\left\{ \frac{C_N}{\Pi_N + C_N}, \frac{C_{PO_4}}{\Pi_{PO_4} + C_{PO_4}} \right\}, \quad \text{где } C_N = C_{NH_4} + C_{NO_3}.$$

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

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

где  $B_f$  – биомасса фитопланктона,  $\text{мгС/м}^3$ ;  $t$  – время, ч;  $\gamma_f$  – доля продукции фитопланктона, идущая на обеспечение его жизнедеятельности (дыхание);  $\mu_f$  – удельная скорость естественной смертности и выедания фитопланктона,  $1/\text{ч}$ ;  $H$  – глубина, м;  $\sigma_f$  – удельная скорость роста фитопланктона,  $1/\text{ч}$ , определяемая условиями освещенности  $I$  и наличием в воде биогенных веществ – минеральных форм азота  $C_N$  и фосфора  $C_{\text{PO}_4}$ ;  $I_a$  – средний за световой день поток ФАР, проникающий через поверхность моря,  $\text{Вт/м}^2$ ;  $f_d$  – доля светового дня в сутках ( $0 \leq f_d \leq 1$ );  $\varphi_f$  – удельная скорость метаболизма (дыхания),  $1/\text{сут}$ ;  $T$  – температура морской воды,  $^{\circ}\text{C}$ ;  $T_m$  – оптимальная для роста водорослей температура воды,  $^{\circ}\text{C}$ ;  $\zeta_1$ ,  $\zeta_2$  – коэффициенты, определяющие характер влияния температуры на рост водорослей в диапазонах выше и ниже  $T_m$ ;  $\varphi_r$  – удельная скорость метаболизма водорослей при температуре  $T_r$ ,  $1/\text{сут}$ ;  $\zeta_\varphi$  – коэффициент влияния температуры на скорость метаболизма;  $\mu_r$  – удельная скорость выедания и гибели фитопланктона при температуре  $T_r$ ,  $1/\text{сут}$ ;  $\zeta_\mu$  – коэффициент влияния температуры на скорость выедания и смертности водорослей.

Натурные данные по фитопланктону изменялись от  $0,015 \text{ гС/м}^3$  в марте до  $0,236 \text{ гС/м}^3$  в октябре. Модельные данные – от  $0,011 \text{ гС/м}^3$  в апреле до  $0,235 \text{ гС/м}^3$  в октябре. Максимум биомассы фитопланктона в октябре в натурных данных объясняется «цветением» крупноразмерной диатомеи *Cerataulina pelagica* (Cl.) Hend и *Nitzschia tenuirostris* Gran [9].

**Выводы.** Моделирование биогеохимических процессов, протекающих при участии веществ естественного и антропогенного происхождения, играет важную роль при оценке состояния морских экосистем. Примененный в работе метод оптимизации Хука-Дживса позволил откалибровать биогеохимический блок модели качества вод МЕССА. Были получены значения параметров этого блока и коэффициентов в эмпирических уравнениях, описывающих изменчивость значений этих параметров в зависимости от характеристик среды и внешних факторов. Установленные при калибровке значения параметров могут быть откорректированы в ходе численных экспериментов с трехмерным вариантом модели.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме 0827-2014-0010 «Комплексные междисциплинарные исследования океанологических процессов, определяющих функционирование и эволюцию экосистем Черного и Азовского морей, на основе современных методов контроля состояния морской среды и гридтехнологий».

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Моделирование* геохимических процессов в морском прибрежном экотоне / Отв. ред. Беляев В.И., Совга Е.Е. – Киев: Наукова думка, 1993. – 240 с.
2. *Hess K.W.* МЕССА Programs documentation: Technical Report. – Washington, D.C., NOAA. NESDIS 46, 1989. – 97 p.
3. *Иванов В.А., Тучковенко Ю.С.* Прикладное математическое моделирование качества вод шельфовых морских экосистем. – Севастополь: ЭКОСИ-Гидрофизика, 2006. – 368 с.
4. *Банди Б.* Методы оптимизации. Вводный курс: Пер. с англ. – М.: Радио и связь, 1988. – 128 с.

5. *Marsili-Libelli S.* Parameter estimation of ecological models // *Ecological Modelling.* – 1992.– 62.– С.233-258.
6. *Monod J.* The growth of bacterial cultures // *Annu. Rev. Microbiol.*– 1949.– 3.– P.371-394.
7. *Bailey J.E., Ollis D.F.* *Biochemical Engineering Fundamentals.* 2<sup>nd</sup> edition.– New York: McGraw-Hili, 1986.– 354 p.
8. *Marsili-Libelli S.* Modelling, estimation and control of the activated sludge process // *Adv. Biochem. Eng. Biotechnol.*– 1989.– 38.– P.89-148.
9. *Лопухина О.А., Манжос Л.А.* Фитопланктон Севастопольской бухты (Черное море) в теплый и холодный периоды 2001 – 2002 гг. // *Экология моря.*– 2005.– вып.69.– С.25-31

Материал поступил в редакцию 01.12.2016 г.  
После доработки 20.05.2017 г.

К.А.Слепчук, Т.В.Кхмара

#### USAGE OF THE OPTIMIZATION METHOD DURING A CALIBRATION OF THE BIOGEOCHEMICAL MODEL

The possibility of using optimization methods of mathematical programming during a calibration of biogeochemical models is discussed. It describes how to use the one-dimensional water quality model for the prediction of the dynamic of phytoplankton and nutrients in the Sevastopol Bay surface water. The simulated data are compared with in situ data, averaged over 2001 – 2005. Due to the sufficiently large misfit of simulated and in situ data the Hooke-Jeeves optimization method is used.

**KEYWORDS:** biogeochemical modeling, calibration of biogeochemical model, optimization method, Hooke-Jeeves method