

К.А.Слепчук

Морской гидрофизический институт НАН Украины, г.Севастополь

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ГОДОВОЙ ДИНАМИКИ
ФИТОПЛАНКТОНА И БИОГЕННЫХ ЭЛЕМЕНТОВ
В АКВАТОРИИ СЕВАСТОПОЛЬСКОЙ БУХТЫ
С ПРИМЕНЕНИЕМ ОПТИМИЗАЦИОННОГО МЕТОДА КАЛИБРОВКИ
БИОГЕОХИМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ**

Описывается использование одномерного варианта модели качества вод *МЕС-СА* с целью осуществления прогноза динамики фитопланктона и биогенных элементов поверхностных вод акватории Севастопольской бухты. Данные, полученные в процессе вычислительного эксперимента, сопоставляются с натурными данными, осредненными за 2002 – 2005 гг. В целях улучшения прогнозируемого результата применяется оптимизационный метод прямого поиска Хука-Дживса.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: *биогеохимическое моделирование, биогенные элементы, фитопланктон, методы оптимизации, метод Хука-Дживса.*

Влияние океанологических факторов на экологическое состояние прибрежных морских акваторий при решении проблем рационального природопользования остается актуальным на протяжении многих десятков лет.

Чтобы контролировать качество водной среды, необходимо использовать математические модели. Созданию математической модели, как правило, предшествует экологический мониторинг исследуемой экосистемы и целый ряд специализированных экспериментов для оценки интенсивности связей между компонентами экосистемы.

Для оценки состояния морской экосистемы требуются натурные наблюдения из различных областей знаний: гидрофизики, гидрогеологии, гидрохимии, гидробиологии, метеорологии, которые выполняются на основе различных методик с разной точностью и дискретностью. Не всегда эти натурные наблюдения выполнены в достаточном количестве в разных точках пространства. Применение математического моделирования позволяет не только восполнить пробелы в точках отсутствия натурных данных, но и осуществить модельную оценку состояния экосистемы в условиях изменчивости ее компонентов.

Кроме того, математическое моделирование позволяет получить прогноз эволюции экосистемы при взаимном влиянии природно-климатических и антропогенных факторов.

В качестве объекта исследований выбрана Севастопольская бухта. Севастопольская бухта очень активно используется на протяжении более двух столетий в различных сферах народного хозяйства. Бухта является гаванью для военных и торговых судов. По берегам бухты расположена историческая часть города Севастополя, а также промышленные предприятия (судоремонтные и судостроительные, нефтебаза, ТЭЦ и др.). В бухте функционируют более 30 выпусков сточных вод – аварийных, временных и посто-

янно действующих, через которые поступает от 10 до 15 тыс. м³ сточных вод в сутки. Основной объем стоков сбрасывается без очистки [2]. Бухта используется для судоходства и в рекреационных целях.

Материалы и методы. В данной работе было проведено моделирование годовой динамики фитопланктона, органического фосфора, фосфора фосфатов, органического азота, азота аммония в акватории Севастопольской бухты с помощью модели качества вод *MECCA* (*Model for Estuarine and Coastal Circulation Assessment*) [1]. Модель *MECCA* состоит из трех блоков:

– гидродинамическая модель, описывающая динамику вод на исследуемой акватории при различных гидрометеорологических условиях с учетом морфологических особенностей бассейна (батиметрии, конфигурации берегов);

– блок транспорта консервативной, пассивной примеси, представляющий собой численную реализацию уравнения

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial(uC_i)}{\partial x} + \frac{\partial(vC_i)}{\partial y} + \frac{\partial(w + w_{gi})C_i}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{yi} \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{xi} \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{zi} \frac{\partial C_i}{\partial z} \right) = F_i(\vec{C}, x, y, z, t) + Q_i(x, y, z, t), \quad (1)$$

где u, v, w – составляющие вектора скорости течения, трехмерное поле которых должно быть тем или иным способом задано; $\vec{C}$ – вектор-функция переменных состояния экосистемы ($i = 1, \dots, N$), элементами которой $C_i(x, y, z, t)$ являются концентрации (биомассы) моделируемых компонентов; w_{gi} – скорость гравитационного оседания взвешенных компонентов; D_{xi}, D_{yi}, D_{zi} – коэффициенты горизонтального и вертикального турбулентного обмена i -го компонента; $F_i(\vec{C}, x, y, z, t)$ – функции неконсервативности, представляющие собой составленные на основе балансового подхода алгебраические суммы членов, которые описывают локальные потоки вещества между компонентами модели, обусловленные различными (био)химическими реакциями и биологическими взаимодействиями; $Q_i(x, y, z, t)$ – приток i -ого вещества из внешних, включая антропогенные, источников. Реализация уравнения (1) при $F_i(\vec{C}, x, y, z, t) = 0$, в котором используются мгновенные значения скорости течений и коэффициентов турбулентного обмена, рассчитанные в гидродинамическом блоке;

– химико-биологический блок 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 связи с достаточно большими несоответствиями данных, рассчитанных по модели, и натурных данных был применен оптимизационный метод. Проектирование технических объектов всегда включает в себя элементы оптимизации – стремление получить наилучший вариант среди возможных вариантов. Это стремление реализуется перебором вариантов структуры объекта (структурный синтез) и варьированием значений параметров объекта при заданной структуре (параметрическая оптимизация или просто оптимизация).

Внутренние параметры объекта проектирования обозначим n -мерным вектором $X = (x_1, \dots, x_n)$, выходные параметры – m -мерным вектором $Y = (y_1, \dots, y_m)$, внешние параметры (параметры окружающей среды, значения удельных скоростей и коэффициентов) – l -мерным вектором $P = (p_1, \dots, p_l)$.

Таким образом, в самом общем виде модель блока эвтрофикации можно задать в следующем виде: $Y = F(X, P)$.

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

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

В данной работе будет использоваться метод Хука-Дживса [3]. Это метод прямого поиска минимума функционала, состоящий из последовательности шагов исследующего поиска вокруг базисной точки, за которой в случае успеха следует поиск по образцу.

Процедура поиска:

1. Выбрать начальную базисную точку b_1 и шаг длиной h_j для каждой переменной $x_j, j = 1, 2, \dots, n$.

2. Вычислить $f(x)$ в базисной точке b_1 с целью получения сведений о локальном поведении функции $f(x)$. Эти сведения будут использоваться для нахождения подходящего направления поиска по образцу, с помощью которого можно надеяться достичь большего убывания значения функции. Функция $f(x)$ в базисной точке b_1 находится следующим образом:

а) Вычисляется значение функции $f(b_1)$ в базисной точке b_1 .

б) Каждая переменная по очереди изменяется прибавлением длины шага. Таким образом, мы вычисляем значение функции $f(b_1 + h_1 e_1)$, где e_1 – единичный вектор в направлении оси x_1 . Если это приводит к уменьшению значения функции, то b_1 заменяется на $b_1 + h_1 e_1$. В противном случае вычисляется значение функции $f(b_1 - h_1 e_1)$, и если ее значение уменьшилось, то заменяем на $b_1 - h_1 e_1$. Если ни один из проделанных шагов не приводит к уменьшению значения функции, то точка b_1 остается неизменной и рассматриваются изменения в направлении оси x_2 , т.е. находится значение функции $f(b_1 + h_2 e_2)$ и т.д. Когда будут рассмотрены все n переменные, мы будем иметь новую базисную точку b_2 .

с) Если $b_2 = b_1$, т.е. уменьшение функции не было достигнуто, то исследование повторяется вокруг той же базисной точки b_1 , но с уменьшенной длиной шага. На практике удовлетворительным является уменьшение шага (шагов) в десять раз от начальной длины.

д) Если $b_2 \neq b_1$, то производится поиск по образцу.

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

а) Разумно двигаться из базисной точки b_2 в направлении $b_2 - b_1$, поскольку поиск в этом направлении уже привел к уменьшению значения функции. Поэтому вычислим функцию в точке образца $P_1 = b_1 + 2(b_2 - b_1)$. В общем случае $P_i = b_i + 2(b_i + 1 - b_i)$.

б) Затем исследование следует продолжать вокруг точки $P_1 (P_i)$.

с) Если наименьшее значение на шаге 3, (b) меньше значения в базисной точке b_2 (в общем случае b_{i+1}), то получают новую базисную точку b_3 (b_{i+2}), после чего следует повторить шаг 3, (а). В противном случае не производить поиск по образцу из точки b_2 (b_{i+1}), а продолжить исследования в точке b_2 (b_{i+1}).

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

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. 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.

Для расчетов применялись метеоданные:

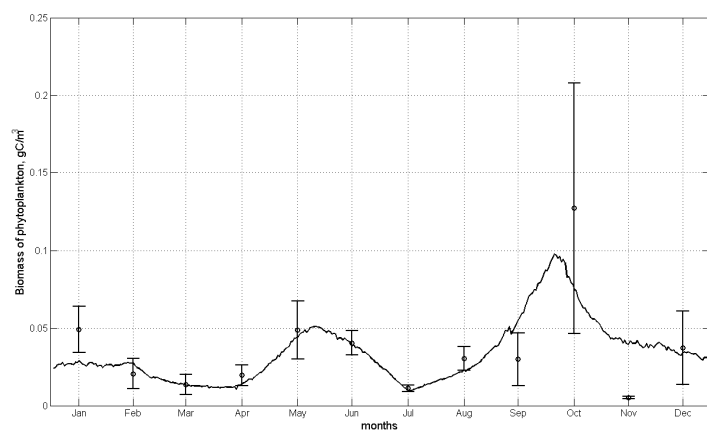
- срочные данные скорости и направления ветра за 2005 г.;
- срочные данные температуры воздуха за 2005 г.;
- срочные данные фотосинтетически активной радиации за 2010 г.;
- среднемесячные данные влажности и балла облачности за 2005 г.

Также использовался годовой ход прозрачности, осредненный за 2001 – 2005 гг., начальные значения температуры морской воды, солености, концентрации фитопланктона, биогенных элементов, кислорода, органического фосфора и органического азота, которые задаются на 1 января расчетного года.

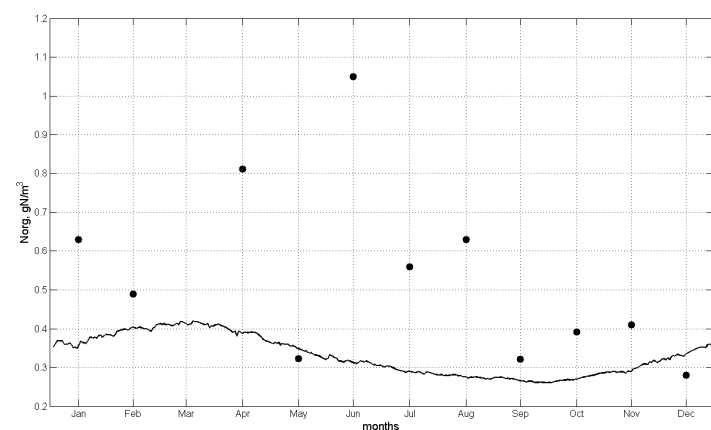
Обсуждение результатов. На рис.1 представлена годовая динамика основных экосистемных элементов поверхностных вод Севастопольской бухты, где кривая линия соответствует данным, рассчитанным по модели, точки – натурные данные, которые осреднялись за 2002 – 2005 гг. и стандартная ошибка.

Из представленных рисунков видно, что модель после калибровки дает хорошие результаты по фитопланктону (рис.1, а). Максимумы биомассы приходятся на весну и осень, что совпадает с данными *in situ*. Октябрьский максимум в натурных данных объясняется «цветением» крупноразмерной диатомеи *Cerataulina pelagica* (Cl.) Hend и *Nitzschia tenuirostris* Gran [4]. Также видно, что модель дает неплохие результаты по биогенным элементам (рис.1, з – е). Однако модельные данные органического азота и фосфора (рис.1, б – в) занижены, что объясняется недостатком данных *in situ*, а также тем, что натурные данные были взяты всего с одной станции, располагающейся неподалеку от мидийной фермы.

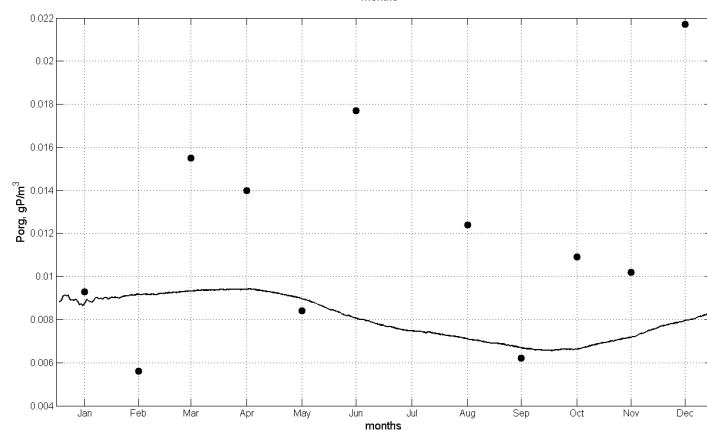
Выводы. Моделирование биогеохимических процессов, протекающих при участии веществ естественного и антропогенного происхождения, играет важную роль при оценке состояния морских экосистем. Из представленных в работе результатов видно, что использование метода оптимизации Хука-Дживса позволяет более точно отобразить реальную картину годовой динамики биомассы фитопланктона, органических азота и фосфора, фосфора фосфатов, азота аммония, азота нитратов и нитритов. Полученные результаты подтверждают целесообразность использования методов оптимизации в



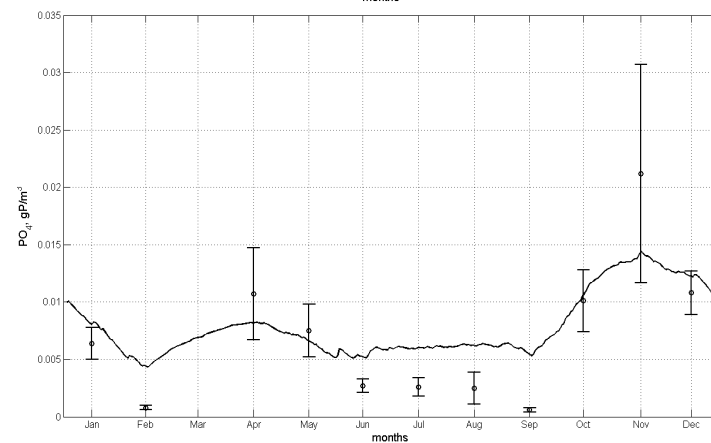
a



б

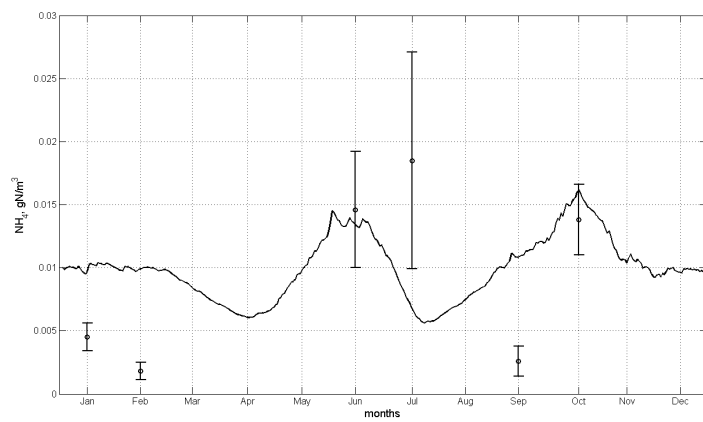


в



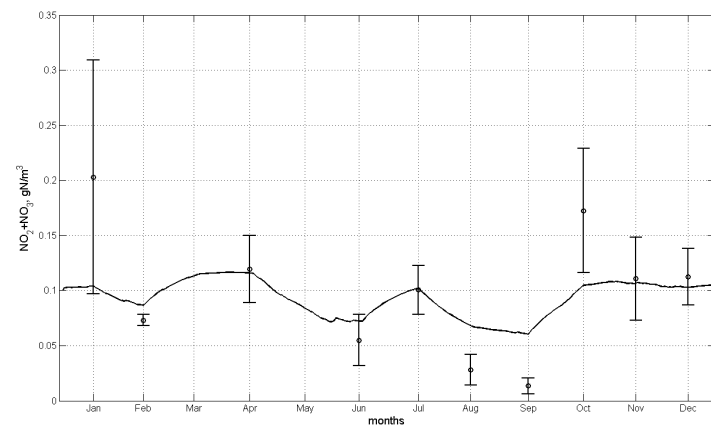
г

Р и с. 1. Распределения основных экосистемных элементов на поверхности Севастопольской бухты в течение года, полученные по модели МЕССА: фитопланктон (*a*), органический азот (*б*), органический фосфор (*в*), фосфор фосфатов (*г*), азот аммония (*д*), азот нитратов и нитритов (*е*). Точками обозначены натурные данные, осредненные за 2002 – 2005 гг., отрезки показывают стандартную ошибку.



d

Продолжение рис.1.



e

биогеохимическом моделировании и дают возможность далее использовать в трехмерном моделировании.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 14-45-01542 p_юг_a).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Иванов В.А., Тучковенко Ю.С.* Прикладное математическое моделирование качества вод шельфовых морских экосистем.— Севастополь: ЭКОСИ-Гидрофизика, 2006.— 368 с.
2. *Иванов В.А., Овсяный Е.И., Репетин Л.Н., Романов А.С., Игнатьева О.Г.* Гидролого-гидрохимический режим Севастопольской бухты и его изменения под воздействием климатических и антропогенных факторов.— Севастополь: ЭКОСИ-Гидрофизика, 2006.— 90 с.
3. *Банди Б.* Методы оптимизации. Вводный курс: Пер. с англ.— М.: Радио и связь, 1988.— 128 с.
4. *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
15.12.2014 г.

АНОТАЦІЯ Описується використання одновимірного варіанту моделі якості вод МЕССА з метою здійснення прогнозу динаміки фітопланктону і біогенних елементів поверхневих вод акваторії Севастопольської бухти. Дані, отримані в процесі обчислювального експерименту, зіставляються з натурними даними, усередненими за 2002 – 2005 рр. З метою поліпшення прогнозованого результату застосовується оптимізаційний метод прямого пошуку Хука-Дживса.

тів поверхневих вод акваторії Севастопольської бухти. Дані, отримані в процесі обчислювального експерименту, зіставляються з натурними даними, усередненими за 2002 – 2005 рр. З метою поліпшення прогнозованого результату застосовується оптимізаційний метод прямого пошуку Хука-Дживса.

ABSTRACT It is describes the use of a one-dimensional version of the water quality model MECCA to predict phytoplankton and biogenic dynamics of surface water of the Sevastopol bay. The data obtained during numerical experiment are compared with in situ data, averaged for 2002 – 2005. To improve the predicted results the optimization method of direct search Hooke-Jeeves are used.

