

А.В. Никитина, Ю.В. Белова, А.А. Филина

СОЗДАНИЕ КОМПЛЕКСА ПРОГРАММНЫХ СРЕДСТВ ПРОГНОЗНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИНАМИКИ БИОГЕОХИМИЧЕСКИХ ЦИКЛОВ В МЕЛКОВОДНОМ ВОДОЕМЕ С УЧЕТОМ КИСЛОРОДНОГО РЕЖИМА¹

Аннотация. Основным регулятором биологической активности мелководного водоема является кислород, существенно влияющий на структурно-видовую организацию развития различных биологических сообществ под воздействием биотических и абиотических факторов и климатических изменений. Низкое и критически низкое содержание растворенного в воде кислорода способствует угнетению видового разнообразия гидробионтов, возникновению заморных зон, явлений аноксии и гипоксии, вызывающих эвтрофикацию водоема, нарушающих экологическое равновесие водной среды и способствующих ее подавлению. В этой связи создание современного программно-алгоритмического инструментария для прогнозирования динамики гидрохимических процессов сегодня является актуальным. Работа посвящена созданию программных средств прогнозного моделирования биогеохимических процессов в мелководном водоеме, базирующихся на усовершенствованных математических гидробиологических моделях мелководного водоема и эффективных численных методах, их реализующих. Отличительной особенностью моделирования гидрохимических процессов является использование разработанных разностных схем повышенного порядка точности ввиду их эффективности при численной реализации данного класса задач водной экологии с учетом пространственно неоднородной структуры вычислительной области и трудоемкости вычислений, позволяющих значительно сократить погрешность вычислений. Учет ряда биотических и абиотических факторов в разработанных моделях, выявление особенностей круговорота веществ, включая насыщение кислородом, уровень углекислого газа, использование эффективных численных методов и средств их программной реализации на высокопроизводительных вычислительных комплексах – всё это позволяет выполнять точную оценку и анализ и оперативно прогнозировать экологическую обстановку мелководных экосистем при климатических и промышленных вызовах, особенно в условиях чрезвычайных ситуаций.

Ключевые слова: водная экология, биогеохимические циклы, прогнозное моделирование, мелководная экосистема, математические гидробиологические модели мелководного водоема, кислородный режим, комплекс программных средств.

A.V. Nikitina, Yu.V. Belova, A.A. Filina

DEVELOPMENT OF A COMPLEX OF SOFTWARE TOOLS FOR PREDICTIVE MODELING THE DYNAMICS OF BIOGEOCHEMICAL CYCLES IN A SHALLOW WATER TAKING INTO ACCOUNT THE OXYGEN REGIME

Abstract. The main regulator of the biological activity of shallow water is oxygen. It significantly affects the structural and species organization of various biological communities under the influence of biotic and abiotic factors, and climatic changes. The low and critically low levels of oxygen, dissolved in water, contributes to the suppression of hydrobionts species, the emergence of overseas zones, anoxia and hypoxia phenomena that cause the water eutrophication. This violates the ecological balance of the water environment and

Никитина Алла Валерьевна

доктор технических наук, доцент, профессор кафедры программного обеспечения вычислительной техники и автоматизированных систем, Донской государственной технической университет, город Ростов-на-Дону; профессор кафедры интеллектуальных и многопроцессорных систем, Южный федеральный университет, город Таганрог. Сфера научных интересов: математическое моделирование, гидробиология, экология, программная реализация. Автор более 200 опубликованных научных работ. SPIN-код: 4320-8190, AuthorID: 772685. Электронный адрес: nikitina.vm@gmail.com

Белова Юлия Валерьевна

кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математики и информатики, Донской государственной технической университет, город Ростов-на-Дону. Сфера научных интересов: математика, биогеохимические процессы, мелководный водоем, биогидроценоз. Автор более 50 опубликованных научных работ. SPIN-код: 6008-2235, AuthorID: 822411. Электронный адрес: yvbelova@yandex.ru

Филина Алёна Александровна

кандидат технических наук, научный сотрудник, ООО «НИЦ супер-ЭВМ и нейрокомпьютеров», город Таганрог. Сфера научных интересов: математическое моделирование, гидробиологические процессы, мелководные системы, суперЭВМ. Автор более 100 опубликованных научных работ. Электронный адрес: j.a.s.y@mail.ru

contributes to its suppression. In this regard, the development of modern software and algorithmic tools for predicting the dynamics of hydrochemical processes is relevant today.

The paper covers the development of software tools for predictive modeling of biogeochemical processes in a shallow water based on advanced mathematical hydrobiological models of shallow water and effective numerical methods for their implementation. The distinctive feature of hydrochemical processes simulation is the use of the developed difference schemes of high-order of accuracy. They are effective in the numerical implementation of this class of water ecology problems, taking into account the spatially heterogeneous structure of computational domain and the computational labor intensity. Due to it, the errors of calculations are significantly reduced. A number of biotic and abiotic factors were taken into account, the substance circulation features, including the oxygen saturation, carbon dioxide levels, were identified. The application of effective numerical methods and their software implementation on high-performance computer complexes makes it possible to perform an accurate assessment and analysis and quickly predict the environmental conditions in shallow water ecosystems under climatic and industrial challenges, especially in emergencies.

Keywords: water ecology, biogeochemical cycles, predictive modeling, shallow water ecosystem, mathematical hydrobiological models of shallow water, oxygen regime, software complex.

Введение

Одной из основных задач современного научного сообщества является исследование и анализ биологических процессов и систем водной среды. В связи с активными климатическими и, как следствие, гидробиологическими изменениями, активно протекающими в течение последних десятилетий, происходит «перестроение» экологических со-

обществ. Особенно эти процессы влияют на водные экосистемы, структурно-видовую форму развития различных биологических сообществ под воздействием биотических и абиотических факторов.

Изучение особенностей и прогнозирование состояния водных экосистем является предметом многочисленных исследований многих отечественных и зарубежных ученых, научно-исследовательских групп, институтов и организаций. Весомый вклад в исследование гидробиологических процессов и водных экосистем внесли Г.И. Марчук, А.И. Сухинов, Г.Г. Матишов, В.Г. Ильичев, Ю.А. Домбровский, Ю.В. Тютюнов, Е.В. Якушев и др. Ученными крупных российских исследовательских центров и институтов в области океанологии, таких как Институт прикладной математики имени М.В. Келдыша, Институт вычислительной математики имени Г.И. Марчука РАН, Институт океанологии имени П.П. Шишова РАН, проводятся многочисленные исследования, посвященные анализу и моделированию сложных экологических систем, прогнозированию ряда климатических изменений, протекающих в Мировом океане. Научными сотрудниками и учеными Всероссийского научно-исследовательского института рыбного хозяйства и океанографии (ВНИРО) и его филиалов проводятся многочисленные комплексные научные и исследовательские работы в акватории рыбохозяйственных бассейнов России и Мирового океана, включающие мероприятия по разработке обоснований общих объемов допустимых уловов и объема рекомендованного вылова водных биоресурсов на основе создания инновационных решений в области развития аквакультуры, молекулярной биологии, генетики, по комплексной оценке факторов влияния на водные биоресурсы, а также определение тенденций экономической политики в рыбохозяйственной отрасли нашей страны. Научными сотрудниками Центра системы мониторинга рыболовства и связи решаются задачи обеспечения мониторинга и определения путей поддержания устойчивого развития биологических ресурсов водных объектов на государственном уровне, мониторинга и обеспечения контроля за промышленной деятельностью судов рыбопромыслового флота.

Среди выдающихся ученых, внесших большой вклад в изучение гидрологии и океанологии, также следует отметить В.П. Дымникова, занимающегося исследованием климата и океанологии, моделированием атмосферы и океана; А.С. Мони́на и М.Ю. Белевича, исследующих процессы кинематики водной среды, турбулентности и микроструктуры океана. Известным советским ученым А.С. Судольским проведен ряд важных исследований в области изучения динамики вод и прибрежных процессов в водных объектах различной гидрологической сложности, позволяющих разрабатывать эффективные решения задач в области проектирования, строительства и эксплуатации сложных гидротехнических сооружений, а также в области разработки концепций условий оптимального хозяйственного природопользования водоемов [1].

К передовым зарубежным научно-исследовательским организациям и институтам, специализирующимся на всесторонних фундаментальных, мультидисциплинарных исследованиях в области экологических процессов водных систем и восстановления окружающей водной среды, относятся Yantai Institute of Coastal Zone Research, Chinese Academy of Sciences (VICE, CASE, Китай), Centre for Water Research of National University of Singapore (CWR of NUS, Сингапур), Korea Institute of Ocean Science and Technology (KIOST, Корея), Swedish Meteorological and Hydrological Institute (SMHI, Швеция), National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA, США), UK Centre for Ecology and Hydrology (UKCEH, Великобритания), в область компетенций которых также входит

разработка информационных комплексов и систем, позволяющих осуществлять мониторинг и прогноз экологической обстановки водных систем.

К одним из важных факторов устойчивого развития водных экосистем, в особенности мелководным, относятся газообменные процессы населяющих сообществ флоры и фауны с окружающей средой, жизненно важным из которых является дыхание. На сегодняшний день в мелководных акваториях широко распространено явление кислородного минимума (oxygen minimum zones, OMZ). OMZ-зоны возникают прежде всего в высокопродуктивных районах с ограниченной вертикальной циркуляцией водных масс. В последние годы в мелководных водоемах наблюдается тенденция к активизации заморных явлений и процессов, а также активное образование зон аноксии и гипоксии, которые возникают вследствие антропогенного воздействия (строительство различных гидротехнических сооружений, проведение дноуглубительных работ, эвтрофикация, глобальные климатические изменения). По мере развития кислород-дефицитных зон водоема происходят негативные перестройки гидробиологических сообществ в сторону доминирования организмов с анаэробным метаболизмом [2]. При понижении уровня содержания кислорода полностью исчезают донные животные и появляются группы бактерий, жизнеспособные за счет разложения органических веществ, образованных фитопланктонными популяциями в результате поступления с суши различных удобрений, сбросов сельскохозяйственных стоков и др., а также реакции восстановления сульфата. При этом образуется сероводород, который для большинства организмов является ядовитым и быстро окисляется при наличии кислорода [3].

Существующие методы и средства прогнозного моделирования динамики гидробиологических процессов водной среды с учетом биотических и абиотических факторов, включая процессы распределения кислорода, углекислого газа и солей, основываются на общих научных подходах, упрощенных математических моделях, отличающихся низкой адаптивностью, отсутствием возможности моделирования нелинейных динамических процессов, свойственных большинству водных экосистем, некорректным заданием границ расчетной области, основанных на достаточно грубых аппроксимациях относительно реальной гидрофизики водоема. Универсальные пакеты программ (например, Mars3d; программный комплекс CHARISMA; «Экоинтегратор»; комплекс SALMO; комплекс программ SHTDM; CARDINAL и др.) интегрируют ограниченный набор достаточно общих моделей, алгоритмов и методов моделирования, которые не могут быть реализованы для других мелководных и прибрежных экосистем. В связи с этим возникает необходимость в разработке комплекса алгоритмических и программных средств, позволяющих на основе усовершенствованных математических моделей биогеохимических циклов и эффективных численных методов осуществлять прогнозное моделирование на высокопроизводительных вычислительных комплексах.

Кислород – основной механизм формирования биологической активности в водоеме

Исследование гидробиологических процессов и трофических взаимодействий мелководных водоемов направлено на изучение продукционно-деструкционных процессов гидробионтов, связанных с трансформацией вещества и энергии в экосистемах. Важное значение имеют химические превращения веществ, опосредованные взаимодействия, включая действие продуктов жизнедеятельности планктонных, рыбных популяций.

Известно, что биологические и термодинамические процессы, протекающие в мелководном водоеме, активная реакция среды (рН) и другие факторы оказывают непосред-

ственное влияние на газовый режим водной экосистемы. Газораспределение в толще водоема имеет довольно сложный характер, который зависит от гидродинамических и географических особенностей водоема и интенсивности протекающих в нем биологических процессов [4].

Основным механизмом формирования биологической активности в водоеме является кислород (O_2). Зачастую кислород представляет собой лимитирующий фактор водной среды как для первичной, так и для вторичной его продукции. В результате турбулентной и молекулярной диффузии атмосферный кислород поступает в водоем. Количество кислорода напрямую зависит от температуры, солености, а также ветровых воздействий и течений. Инвазия кислорода происходит через поверхность воды, поэтому наиболее насыщенной кислородом зоной является зона фотосинтеза, расположенная в верхнем слое водной толщи. Подавляющее количество организмов получают энергию для своей жизнедеятельности в ходе окисления органических веществ, обеспечивающего также деструкцию веществ мертвых организмов.

Когда уровень растворенного в воде кислорода достигает максимума, происходит его выход на границе раздела сред при контакте с воздухом. Этот процесс протекает особенно интенсивно при увеличении температуры. В основном объем кислорода идет на дыхание преимущественно бактерий, которые расходуют порядка 90 % от его общего объема; часть кислорода расходуется на процессы окисления различных минеральных и органических соединений.

Кислородный режим водной среды зависит от ее аэрации и абсорбции. Потребление кислорода на процессы окисления, дыхания осуществляется во всем объеме водной толщи, включая дно. Поэтому дефицит кислорода особенно выражен в водоемах с интенсивными деструкционными процессами.

В то же время без углекислого газа также невозможно существование жизни в водоеме. На Рисунке 1 схематично представлена взаимосвязь углекислого газа (CO_2) и кислорода в водной среде (H_2O).

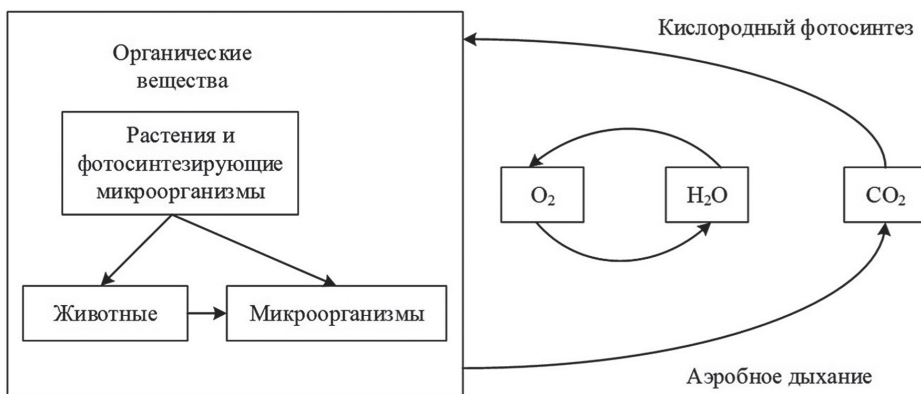


Рисунок 1. Биологический круговорот углерода и кислорода в водной среде

Источник: составлено авторами.

К факторам поступления и накопления углекислого газа в водной толще относятся попадание различных химических соединений (в особенности угольной кислоты) и проте-

кание геохимических процессов (например, разрушение осадочных пород), дыхание гидробионтов, процессы диффузии O_2 из атмосферы. Концентрация диоксида углерода в водоеме снижается благодаря фотосинтезирующим организмам, его потребляющим, а также в результате связывания в соли угольной кислоты.

Известно, что скорость поступления кислорода из воздушной среды зависит от солености, температуры, уровня кислородного насыщения, турбулентности поверхности раздела сред «вода – воздух». Перенос кислорода через поверхность «вода – воздух» осуществляется под действием градиента концентрации. Скорость распространения O_2 определяется как отношение данной концентрации растворенного в воде кислорода к значению концентрации насыщения. Градиент концентрации математически выражается следующим образом:

$$\Delta C_t = C_s - C_t,$$

где C_t – значение концентрации кислорода в момент времени t ; C_s – значение концентрации O_2 при 100-процентном насыщении; ΔC_t – значение градиента концентрации в момент времени t .

Скорость распространения растворенного в воде кислорода увеличивается с ростом градиента концентрации, следовательно, при приближении уровня содержания O_2 к показателю 100%-процентного насыщения скорость распространения уменьшается. По этой причине намного сложнее полностью обогатить водную среду кислородом, чем повысить его концентрацию на 1 ... 2 мг/л.

Перенос кислорода описывается следующим образом:

$$\Delta C / \Delta t = KA(C_s - C_t),$$

где K – константа, которая учитывает влияние процесса турбулентности и зависит от условий; $\Delta C / \Delta t$ – изменение значения концентрации растворенного в воде кислорода за время Δt ; A – площадь поверхности контакта раздела сред «вода – воздух».

Данное выражение показывает, что скорость изменения показателя концентрации кислорода $\Delta C / \Delta t$ определяется произведением константы K с учетом процессов турбулентности, протекающих на границе раздела сред «вода – воздух», на площадь поверхности контакта и, соответственно, значение градиента концентрации $C_s - C_t$.

Проведение исследований

В данной работе моделирование гидробиохимических процессов в мелководных водоемах проводилось для акватории Азовского моря как наиболее крупного представителя мелководной системы юга России, обладающего рядом специфических особенностей (небольшая глубина, значительный перепад солености, большой речной сток, почти равномерный прогрев водной толщи) и претерпевающего выраженные гидрологические изменения ввиду климатической и антропогенной нагрузки.

Моделирование проводилось на основе разработанной модели процессов самоочищения с учетом кислород-дефицитных условий в придонных слоях рассматриваемого моря:

Создание комплекса программных средств прогнозного моделирования динамики ...

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial q_i}{\partial t} + u \frac{\partial q_i}{\partial x} + v \frac{\partial q_i}{\partial y} + (w - w_{gi}) \frac{\partial q_i}{\partial z} = \mu_i \Delta q_i + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_i \frac{\partial q_i}{\partial z} \right) + \psi_i, \\
 & \psi_1 = g_1(q_1, q_3, q_8, q_9) - \lambda_1(q_{11})q_1, \psi_2 = g_2(q_2, q_4, q_{10}) - \lambda_2 q_2, \\
 & \psi_3 = \gamma_3 \alpha_2(q_4)q_2 q_3 - g_3(q_1, q_3) - \lambda_3 q_3 + B(\tilde{q}_3 - q_3) + f, \\
 & \psi_4 = \lambda_1 q_1 + \lambda_2 q_2 + \lambda_5 q_5 - g_4(q_2, q_4, q_5), \psi_5 = g_5(q_4, q_5, q_8) - \lambda_5 q_5, \\
 & \psi_6 = (g_6(q_4, q_8) - \lambda_6)q_6, \psi_7 = g_7(q_6) - \lambda_7 q_7, \psi_8 = (g_8(q_2, q_7) - \lambda_8)q_8 - \gamma_8 \alpha_1(q_8)q_1, \\
 & \psi_9 = g_9(q_1) - \lambda_9 q_9, \psi_{10} = g_{10}(q_1, q_{10}) + \gamma_2 \alpha_2(q_{10})q_2 - (\sigma_1 q_1 + \gamma_7 q_7)q_{10}, \\
 & \psi_{11} = g_{11}(q_1, q_{11}) - \lambda_{11} q_{11},
 \end{aligned} \tag{1}$$

где $U=(u, v, w)$ – вектор скорости водного потока; w_{gi} – скорость гравитационного осаждения i -й компоненты, если она находится во взвешенном состоянии; Δ – двумерный оператор Лапласа; μ_i, ν_i – коэффициенты турбулентного обмена соответственно по горизонтальному и вертикальному направлениям; ψ_i – химико-биологический источник (сток) или член, описывающий процесс агрегирования (слипания-разлипания), если соответствующая компонента является взвесью, индекс i указывает на вид субстанции, $i=\overline{1,12}$; 1 – значение концентрации фитопланктона (P); 2 – аэробных тионовых бактерий *Thiobacillus* (BT); 3 – минерального питания (биогенные вещества: соединения азота, фосфора, кремния) (M), 4 – детрита (D); 5 – анаэробных бактерий рода *Desulfovibrio* (BD); 6 – сероводорода (H_2S); 7 – элементарной серы (S); 8 – сульфатов (SO_4); 9 – метаболита фитопланктона (MP); 10 – растворенного кислорода (O_2); 11 – зоопланктона (веслоногие рачки *Copepoda*) (Z); 12 – углекислого газа (CO_2).

Процессы биогеохимических циклов химических элементов в кислороде-дефицитных условиях были параметризованы при разработке данной математической модели.

Пусть $\alpha_m(q_j) = \alpha_{mj}^{\max} q_j / (K_m^j + q_j)$, $m = \{1, 2, 5, 10\}$, $j = \{3, 4, 8\}$, $\alpha_m(q_j)$ – значение скорости поглощения m -м гидробионтом j -го вещества, α_{mj}^{\max} – максимально возможная скорость поглощения для m -го гидробионта (при высокой концентрации j -го питательного вещества), K_m^j – константа полунасыщения m -го гидробионта j -м веществом;

$$\begin{aligned}
 & g_1(q_1, q_3, q_8, q_9) = (\gamma_1 \alpha_1(q_3) + \gamma_8 \alpha_1(q_8) + \gamma_9 q_9) \phi_1 q_1, \\
 & g_2(q_2, q_4, q_{10}) = (\gamma_2 \alpha_2(q_4) + \gamma_{10} \alpha_2(q_{10})) \phi_2 q_2, \\
 & g_3(q_1, q_3) = \alpha_1(q_3)q_1, \quad g_4(q_2, q_4, q_5) = \alpha_2(q_4)q_2 + \alpha_4(q_5)q_4, \\
 & g_5(q_4, q_5, q_8) = \phi_5 (\alpha_5(q_4) + \sigma_5 q_8)q_5, \quad g_6(q_4, q_8) = (\gamma_4 q_4 + \gamma_8 q_8)q_6, \\
 & g_7(q_6) = \gamma_6 q_6 q_7, \quad g_8(q_2, q_5, q_7) = (\gamma_2 q_2 - \sigma_5 q_5 + \gamma_7 q_7)q_8, \\
 & g_9(q_1) = \gamma_9 q_1, \quad g_{10}(q_1, q_{10}) = \gamma_{10} q_1 q_{10}, \quad g_{11}(q_1, q_{11}) = \gamma_{11} \phi_{11} q_1 q_{11}, \\
 & f(x, y, z)
 \end{aligned}$$

– функция источника загрязняющего вещества (ЗВ); B – удельная скорость поступления ЗВ; \tilde{q}_3 – предельно возможная скорость поступления загрязняющего биогенного веще-

ства; $\lambda_i, i \in \overline{1,12}, (i \neq 4)$ – коэффициенты, которые учитывают убыль бактерий, фито- и зоопланктона и веществ за счет элиминации (смертности), выедания представителями высших трофических уровней и разложения; $\gamma_i, i \in \overline{1,12}, i \notin \{3,6,10,12\}$ – передаточные коэффициенты трофических функций; γ_{10} – коэффициент выделения кислорода фитопланктоном в процессе фотосинтеза; σ_1 – коэффициент потребления кислорода за счет дыхания фитопланктона; σ_5 – коэффициент восстановления сульфата до сероводорода бактериями (BD) вследствие анаэробного дыхания.

Функциональные зависимости скорости роста фитопланктона и бактерий от значений температурного режима (T), уровня солености (S) (по Леману) и освещенности водной среды (I) (по Стилу) определяются следующие образом:

$$\phi_m(T, S, I) = \frac{I}{I_{opt}} \exp \left\{ 1 - \alpha_m \left(\frac{T - T_{opt}}{T_{opt}} \right)^2 - \beta_m \left(\frac{S - S_{opt}}{S_{opt}} \right)^2 - I / I_{opt} \right\}, m = \{1, 2, 5, 11\},$$

где $I(h) = I_0 \exp(-\theta h)$, h – глубина водоема; θ – коэффициент затухания, который пропорционален концентрации взвешенных в воде веществ (детрита и фитопланктона); I_0 – суммарная солнечная радиация на водной поверхности; где S_{opt}, T_{opt} – соленость и температура, наиболее благоприятные для данного вида гидробионтов; $\alpha_m > 0, \beta_m > 0$ – коэффициенты ширины интервала толерантности планктона и бактерий к показателям температуры и солености водоема соответственно.

Расчетная область G – замкнутый бассейн, который ограничен невозмущенной поверхностью водоема Σ_0 , цилиндрической боковой поверхностью σ , донной поверхностью $\Sigma_H = \Sigma_H(x, y)$, Σ – кусочно-гладкая граница области G , $\Sigma = \Sigma_0 \cup \Sigma_H \cup \sigma, 0 < t \leq T_0$.

Граничные условия:

$$\begin{aligned} q_i &= 0 \text{ на } \sigma, \text{ если } U_n < 0; \quad \frac{\partial q_i}{\partial n} = 0 \text{ на } \sigma, \text{ если } U_n \geq 0; \\ \frac{\partial q_i}{\partial z} &= -\varepsilon_i q_i \text{ на } \Sigma_H, \quad \frac{\partial q_i}{\partial z} = \varphi(q_i) \text{ на } \Sigma_0, \quad \varphi(q_i) = \begin{cases} \xi_i(q_i), & i \in \{3, 4, 6, 7\}; \\ \frac{a_0}{v_i} (K_i - q_i), & i = 10; \\ 0, & i \in \{1, 2, 5, 8, 9, 11\}, \end{cases} \end{aligned} \quad (2)$$

где K_{10} – концентрация растворенного в воде кислорода при насыщении; a_0 – коэффициент аэрации, ε_i – коэффициент поглощения i -й субстанции донными отложениями, ξ_i – заданная функция, $i \in \overline{1,12}$.

Начальные условия:

$$q_i|_{t=0} = q_{i0}(x, y, z), i \in \overline{1,12}. \quad (3)$$

На Рисунке 2 приведена структурная схема биологического цикла мелководного водоема.

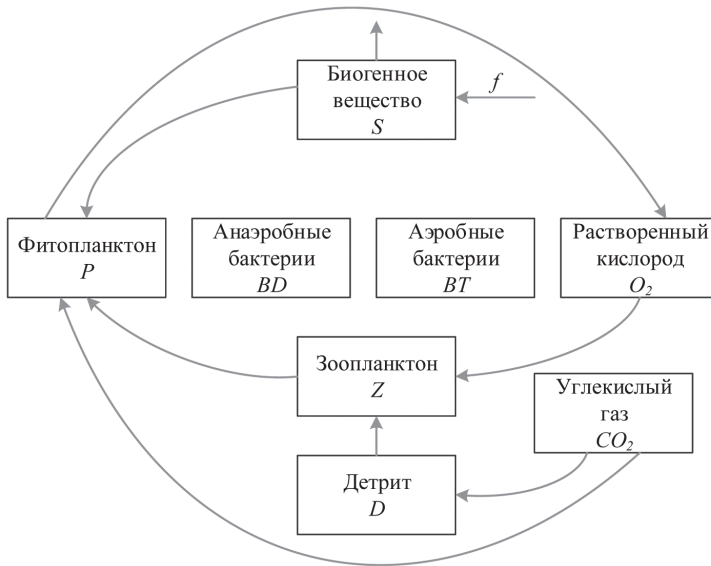


Рисунок 2. Схема модели биогеохимических циклов в мелководном водоеме
 Источник: составлено авторами.

В основе разработанной модели гидробиохимических циклов мелководного водоема (1)–(3), входящей в состав программных средств прогнозного моделирования, лежит система нестационарных уравнений переноса вещества, включающая нелинейные члены для описания движения водной среды, процессов микротурбулентной диффузии, разложения детрита в результате деятельности аэробных и анаэробных бактерий, гравитационного оседания взвешенных веществ и примесей. Нелинейность построенных функциональных зависимостей значений скорости роста фитопланктона и бактерий позволяет детально описывать продукционно-деструкционные процессы, протекающие во всей водной толще, а также осуществлять контроль их динамики при избыточном поступлении биогенных веществ (соединений фосфора, азота, кремния), соединений серы, включая сероводород и сульфаты, при различных показателях растворенного в воде кислорода, распределения детрита, показателей пространственно-временной изменчивости уровня освещенности, солености, температурного режима водной среды, что отвечает современным представлениям о благоприятном функционировании гидробиоценоза.

В совокупности с перечисленными выше факторами для модели (1)–(3) в качестве входных данных использовались результаты расчетов по гидродинамической модели А.И. Сушинова, А.Е. Чистякова и др. [5], учитывающей ряд биотических факторов: сила Кориолиса, сложная форма прибрежной области, рельеф дна водоема, ветровая нагрузка, процессы испарения, трения о донную поверхность, выпадение осадков, стоки рек, водообмен с Черным морем, уровень солености, динамика температурного режима.

Функция трехмерного распределения кислорода для системы (1)–(3) имеет вид

$$C = C_0 - k_0 \frac{D}{h_0}, C(x, y, z, t) = \varphi(x, y, z, t), \forall (x, y, z, t) \in \partial G,$$

где C_0 – значение концентрации кислорода при отсутствии органических примесей; k_0 – объем кислорода, потребляемого при окислении детрита; $h_0 = const$ – область водной

толщи около дна, заполненная максимальным количеством концентрации детрита; H – высота водного столба, максимальный размер расчетной области по вертикали, $h_0 \ll H$.

Дискретизация предложенной в работе математической модели осуществляется на основе универсальной и широко применяемой равномерной прямоугольной сетки [6].

В данном случае возникает проблема погрешности решения подобных модельных задач гидробиологии на границе расчетной области, которая решается посредством применения метода частичной заполненности расчетных ячеек [7]. Поэтому при решении поставленной в данной работе задачи для описания сложной, пространственно неоднородной геометрии исследуемых объектов использовались коэффициенты q_0, q_1, q_2, q_3, q_4 . Данные коэффициенты позволяют описывать степень заполненности прямоугольных ячеек и рассчитываются по следующим формулам:

$$(q_m)_{i,j} = \frac{S_{\Omega_m}}{S_{D_m}}, (q_0)_{i,j} = \frac{o_{i,j} + o_{i+1,j} + o_{i+1,j+1} + o_{i,j+1}}{4}, (q_1)_{i,j} = \frac{o_{i+1,j} + o_{i+1,j+1}}{2},$$

$$(q_2)_{i,j} = \frac{o_{i,j} + o_{i,j+1}}{2}, (q_3)_{i,j} = \frac{o_{i+1,j+1} + o_{i,j+1}}{2}, (q_4)_{i,j} = \frac{o_{i,j} + o_{i+1,j}}{2}.$$

Использование разностных схем повышенного порядка точности для решения задач переноса позволяет сократить количество вычислительных узлов в два раза, что, однако, увеличивает время вычислений на каждом узле. Разработанные схемы повышенного порядка точности позволяют сократить погрешность аппроксимации в 5–30 раз для решения различных модельных задач и типов расчетных сеток. Традиционные разностные схемы не позволяют добиться подобной точности, несмотря на то, что в данном случае количество операций в расчетных узлах меньше [8].

В результате проведенных вычислений была выполнена дискретизация оператора конвективного переноса uc' повышенного (четвертого) порядка точности для численной реализации задачи (1)–(3):

$$(q_0)_i L_c(c) = (q_1)_i \frac{u_{i+1/2}}{12h} \frac{(q_1)_{i+1}}{(q_0)_{i+1}} c_{i+2} + \left(-(q_1)_i \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} \right) + \right.$$

$$\left. + (q_2)_i \frac{u_{i-1/2}}{12h} \frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} + (q_1)_i \left(\frac{u_{i+1/2}}{2h} + k_i^{(1)} + k_i^{(2)} \right) \right) c_{i+1} + \left((q_1)_i \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_2)_{i+1}}{(q_0)_{i+1}} \right) - \right.$$

$$\left. - (q_2)_i \frac{u_{i-1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_1)_{i-1}}{(q_0)_{i-1}} \right) + (q_2)_i \frac{u_{i-1/2}}{2h} - (q_1)_i \frac{u_{i+1/2}}{2h} + ((q_2)_i - (q_1)_i) (k_i^{(1)} - k_i^{(2)}) \right) c_i + \quad (4)$$

$$\left. + \left(-(q_1)_i \frac{u_{i+1/2}}{12h} \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} + (q_2)_i \frac{u_{i-1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} \right) + (q_2)_i \left(-\frac{u_{i-1/2}}{2h} + k_i^{(2)} - k_i^{(1)} \right) \right) c_{i-1} - \right.$$

$$\left. - (q_2)_i \frac{u_{i-1/2}}{12h} \frac{(q_2)_{i-1}}{(q_0)_{i-1}} c_{i-2} \right.$$

$$k_i^{(1)} = \left(\frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} (u_{i+1} - u_i) - \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} (u_i - u_{i-1}) \right) / (8h), k_i^{(2)} = \frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} \left(\frac{u_{i+1} - u_i}{8h} \right) + \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} \left(\frac{u_i - u_{i-1}}{8h} \right)$$

и диффузионного переноса $(\mu c)'$ повышенного (четвертого) порядка погрешности аппроксимации:

$$\begin{aligned}
 (q_0)_i L_d(c) \approx & -(q_1)_i \frac{\mu_{i+1}}{12h^2} \frac{(q_1)_{i+1}}{(q_0)_{i+1}} c_{i+2} + \left((q_1)_i \frac{\mu_{i+1/2}}{h^2} c_{i+1} + (q_1)_i \frac{\mu_{i+1}}{12h^2} \left(\frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} + 2 \right) + \right. \\
 & + (q_2)_i \frac{\mu_{i-1}}{12h^2} \frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} - (q_1)_i \left(\frac{\mu_{i+1}'' - \mu_i''}{12} + k_i \right) \Big) c_{i+1} - \left((q_1)_i \frac{\mu_{i+1/2}}{h^2} + (q_2)_i \frac{\mu_{i-1/2}}{h^2} + \right. \\
 & + (q_1)_i \frac{\mu_{i+1}}{12h^2} \left(\frac{(q_2)_{i+1}}{(q_0)_{i+1}} + 2 \right) + (q_2)_i \frac{\mu_{i-1}}{12h^2} \left(\frac{(q_1)_{i-1}}{(q_0)_{i-1}} + 2 \right) + (q_2)_i \left(\frac{\mu_i'' - \mu_{i-1}''}{12} - k_i \right) - \\
 & \left. - (q_1)_i \left(\frac{\mu_{i+1}'' - \mu_i''}{12} + k_i \right) \right) c_i + \left((q_2)_i \frac{\mu_{i-1/2}}{h^2} c_{i-1} + (q_1)_i \frac{\mu_{i+1}}{12h^2} \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} + \right. \\
 & + (q_1)_i \frac{\mu_{i+1}}{12h^2} \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} + (q_2)_i \frac{\mu_{i-1}}{12h^2} \left(\frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} + 2 \right) + (q_2)_i \left(\frac{\mu_i'' - \mu_{i-1}''}{12} - k_i \right) \Big) c_{i-1} - (q_2)_i \frac{\mu_{i-1}}{12h^2} \frac{(q_2)_{i-1}}{(q_0)_{i-1}} c_{i-2} \\
 \mu_i'' = & \left(\frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} \mu_{i+1} - 2\mu_i + \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} \mu_{i-1} \right) / h^2, \quad k_i = \frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} \left(\frac{\mu_{i+1} - \mu_i}{4h^2} \right) - \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} \left(\frac{\mu_i - \mu_{i-1}}{4h^2} \right)
 \end{aligned} \tag{5}$$

Результаты исследования и их обсуждение

Для разработанных схем повышенной (четвертой) погрешности аппроксимации установлена целесообразность их применимости для выполнения расчетов задачи водной экологии с учетом размеров вычислительной области и трудоемкости вычислений. Благодаря использованию построенных разностных схем удалось добиться снижения количества расчетных узлов сетки, покрывающих исследуемую область, и повышения точности прогностических расчетов по моделированию процессов гидробиологии мелководного водоема.

Таким образом, применение данных разностных схем способствует значительному сокращению времени реализации поставленной задачи.

Для изучения механизма наружно-гормонального регулирования взаимодействующих популяций мелководного водоема в работе использовался сценарный подход [9].

Создание комплекса программных средств прогнозного моделирования биогеохимических процессов в мелководном водоеме предполагает реализацию модельных гидробиологических задач мелководных водоемов с учетом трансформации биогеохимических циклов, включая уровень насыщения кислородом, углекислого газа, на высокопроизводительных вычислительных комплексах, что позволяет получить оперативные прогнозы экологической обстановки водоема, что, в свою очередь, является крайне важным, особенно в случае чрезвычайных ситуаций [10; 11].

Для проведения качественной калибровки и верификации созданного программно-алгоритмического аппарата для выполнения прогностических расчетов гидродинамических и гидробиологических процессов в мелководных водоемах были использованы многочисленные базы экологических данных, доступные данные мониторинга исследуемой акватории, карты динамики климатических изменений, включая оперативные данные о метеоусловиях с различных метеостанций в разные сезонные временные промежутки,

имеющие важное значение с точки зрения оценки влияния на динамику гидробиологических процессов, представленные на Рисунках 3, 4.

На Рисунке 3 приведены прогностические карты метеорологических условий для акватории Азовского моря Единой государственной системы информации об обстановке в Мировом океане (ЕСИМО), полученные на основе спектральной модели Wavewatch III v.3.14 системы среднесрочного метеорологического прогноза Гидрометцентра России и National Centers for Environmental Prediction (NCEP)/NOAA [12].

На Рисунке 4 цветовыми градациями представлены данные ЕСИМО, полученные в результате оперативных спутниковых и наземных наблюдений о температурном режиме поверхностного слоя Азовского моря, по данным National Climatic Data Center (NCDC)/NOAA.

Прогностические карты метеорологических условий, разработанные сотрудниками Гидрометцентра России по имеющимся данным прогноза, выпускаемого метеоцентром NCEP/NOAA, позволяют производить оценку качества водных объектов (в данном случае – Азовского моря), осуществляемую на основе построенной математической модели процессов самоочищения (1)–(3).

На карте, представленной на Рисунке 5, показаны векторы скорости ветра (м/с) на высоте 10 м.

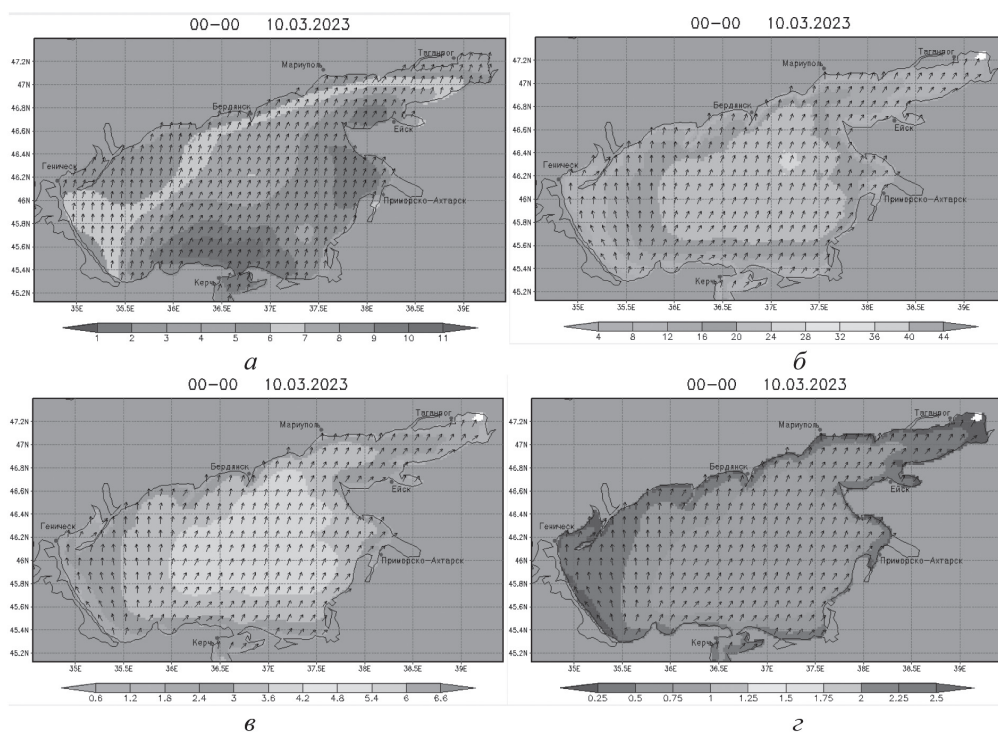


Рисунок 3. Параметры ветрового волнения: *a* – скорость ветра, м; *б* – средняя длина волн, м; *в* – средний период волн, с; *г* – высота преобладающих волн, м

Источник: Оперативный модуль ЕСИМО. URL: <http://esimo.ru/portal/portal/esimo-user/opermodule>

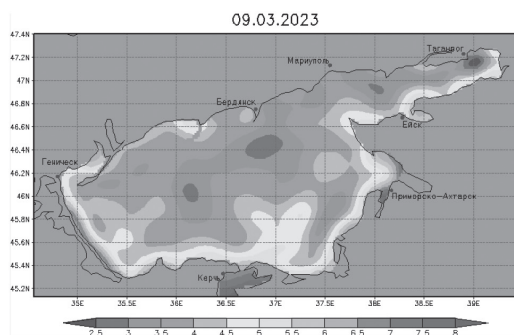


Рисунок 4. Температура поверхности воды в Азовском море, °С

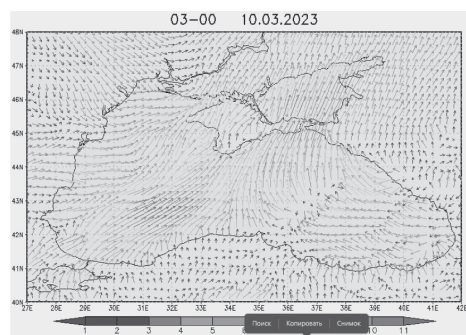


Рисунок 5. Прогноз скорости ветра от 03.00 ч 10.03.2023 г.

Источник: Оперативный модуль ЕСИМО.

URL: <http://esimo.ru/portal/portal/esimo-user/opermodule>

Заключение

Разработанный комплекс программных средств моделирования гидробиологических процессов ориентирован на высокопроизводительные вычислительные комплексы и системы, поддерживает функцию интегрирования вычислительных модулей (блоков) и может быть реализован для других мелководных систем.

Применение предложенных программных средств моделирования экологической обстановки мелководного водоема позволяет осуществлять качественный анализ и оперативное прогнозирование водных экосистем в режиме ускоренного времени, что чрезвычайно важно при природных и антропогенных явлениях, а также при возникновении чрезвычайных ситуаций.

Литература

1. Судольский А.С. Динамические явления в водоемах. Л. : Гидрометеиздат, 1991. 260 с.
2. Симонов В.В. О некоторых интегральных характеристиках турбулентной энергии в мелком водоеме // Труды главной геофизической обсерватории им. А.И. Воейкова. 1970. Вып. 257. С. 26–34.
3. Романенко В.И. Микробиологические процессы продукции и деструкции органического вещества во внутренних водоемах. Л. : Наука, 1985. 295 с. EDN SFYEMВ.
4. Давыдов Л.К., Дмитриева А.А., Конкина Н.Г. Общая гидрология. 2-е изд., перераб. и доп. Л. : Гидрометеиздат, 1973. 462 с.
5. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Литвинов В.Н., Никитина А.В., Белова Ю.В., Филина А.А. Вычислительные аспекты математического моделирования гидробиологических процессов в мелководном водоеме // Вычислительные методы и программирование. 2020. Т. 21. № 4. С. 452–469. EDN NHGJFN. DOI: 10.26089/NumMet.v21r436
6. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Разностные схемы для уравнения переноса. II // Дифференциальные уравнения. 2000. Т. 36. № 7. С. 963–970.
7. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Semenov I.S., Nikitina A.V., Semenyakina A.A., Levin I.I. Solution of the problem of biological rehabilitation of shallow waters on multiprocessor computer system // 2016 5th International Conference on Informatics, Electronics and Vision, ICIEV 2016 : Dhaka, 13–14 May 2016. Dhaka, 2016. P. 1128–1133. EDN XWHNJP. DOI: 10.1109/ICIEV.2016.7760175

8. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Leontiev A.L., Nikitina A.V., Filina A.A. Mathematical modelling of hydrophysical processes for water with complex bottom geometry // Voronezh, 11–13 November 2019. Vol. 1479. Art. no. 012083. Voronezh : IOP Publishing Ltd.
9. Матишов Г.Г., Ильичев В.Г., Семин В.Л., Кулыгин В.В. Об адаптации популяций к температурному режиму среды. Результаты компьютерных экспериментов // Доклады Академии наук. 2008. Т. 420, № 2. С. 282–285. EDN IKIKBR.
10. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Nikitina A.V., Lyashchenko T.V., Filina A.A., Litvinov V.N. The use of supercomputer technologies for predictive modeling of pollutant transport in boundary layers of the atmosphere and waterbodies // Sokolinsky L., Zymbler M. (Eds) Parallel Computational Technologies. PCT 2019. Communications in Computer and Information Science. Vol. 1063. Springer, Cham. P. 225–241. DOI: 10.1007/978-3-030-28163-2_16
11. Sukhinov A.I., Belova Y.V., Chistyakov A.E., Litvinov V.N., Filina A.A., Nikitina A.V., Leontyev A.L. Using supercomputer technologies to research the influence of abiotic factors on the biogeochemical cycle variability in the Azov Sea // Communications in Computer and Information Science. 2020. Т. 1263. P. 209–223. EDN JJGGYJ. DOI: 10.1007/978-3-030-55326-5_15
12. Оперативный модуль ЕСИМО // ЕСИМО. Единая государственная система информации об обстановке в Мировом океане. URL: <http://esimo.ru/portal/portal/esimo-user/opermodule> (Дата обращения: 15.03.2023).

References

1. Sudolskii A.S. (1991) *Dinamicheskie yavleniya v vodoemakh* [Dynamic phenomena in reservoirs]. Leningrad : Hydrometeoizdat. 260 p. (In Russian).
2. Simonov V.V. (1970) On some integral characteristics of turbulent energy in a shallow water body. *Trudy glavnoi geofizicheskoi observatorii im. A.I. Voeikova* [Proceedings of Voeikov Main Geophysical Observatory]. Issue 257. Pp. 26–34. (In Russian).
3. Romanenko V.I. (1985) *Mikrobiologicheskie protsessy produkcii i destruktсии organicheskogo veshchestva vo vnutrennikh vodoemakh* [Microbiological processes of production and destruction of organic matter in inland waters]. Leningrad : Nauka Publ. 295 p. (In Russian).
4. Davydov L.K., Dmitrieva A.A., Konkina N.G. (1973) *Obshchaya gidrologiya* [General hydrology]. 2nd edition. Leningrad : Hydrometeoizdat. 462 p. (In Russian).
5. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Litvinov V.N., Nikitina A.V., Belova Yu.V., Filina A.A. (2020) Computational aspects of mathematical modeling of the shallow water hydrobiological processes. *Numerical Methods and Programming*. Vol. 21. No. 4. Pp. 452–469. DOI: 10.26089/NumMet.v21r436 (In Russian).
6. Samarskii A.A., Vabishchevich P.N. (2000) Finite-difference approximations to the transport equation. II. *Differential Equations*. Vol. 36. Issue 7. Pp. 1069–1077. DOI: 10.1007/BF02754509
7. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Semenov I.S., Nikitina A.V., Semenyakina A.A., Levin I.I. (2016) Solution of the problem of biological rehabilitation of shallow waters on multiprocessor computer system. In: *5th International Conference on Informatics, Electronics and Vision, ICIEV 2016* : Dhaka, 13–14 May 2016. Dhaka, 2016. P. 1128–1133. DOI: 10.1109/ICIEV.2016.7760175
8. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Leontiev A.L., Nikitina A.V., Filina A.A. (2020) Mathematical modeling of hydrophysical processes for water with complex bottom geometry. *Journal of Physics: Conference Series*, Voronezh, 11–13 November 2019. Vol. 1479. Art. no. 012083. Voronezh : IOP Publishing Ltd.
9. Matishov G.G., Ilichev V.G., Semin V.L., Kulygin V.V. (2008) Adaptation of populations to temperature conditions: Results of computer simulation. *Doklady Biological Sciences*. Vol. 420. No. 1. Pp. 183–186.

10. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Nikitina A.V., Lyashchenko T.V., Filina A.A., Litvinov V.N. (2019) The Use of Supercomputer Technologies for Predictive Modeling of Pollutant Transport in Boundary Layers of the Atmosphere and Water Bodies. In: Sokolinsky L., Zymbler M. (Eds) *Parallel Computational Technologies. PCT 2019. Communications in Computer and Information Science*. Vol. 1063. Springer, Cham. P. 225–241. DOI: 10.1007/978-3-030-28163-2_16
11. Sukhinov A.I., Belova Y.V., Chistyakov A.E., Litvinov V.N., Filina A.A., Nikitina A.V., Leontyev A.L. (2020) Using supercomputer technologies to research the influence of abiotic factors on the biogeochemical cycle variability in the Azov Sea. *Communications in Computer and Information Science*. Vol. 1263. Pp. 209–223. DOI: 10.1007/978-3-030-55326-5_15
12. The ESIMO operational module. *ESIMO. Unified State system of information about the situation in the World Ocean*. URL: <http://esimo.ru/portal/portal/esimo-user/opermodule> (accessed 15.03.2023). (In Russian).