

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«ДОНСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ДГТУ)

На правах рукописи

БЕЛОВА ЮЛИЯ ВАЛЕРИЕВНА

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
БИОГЕОХИМИЧЕСКИХ ЦИКЛОВ В ПРИБРЕЖНЫХ
СИСТЕМАХ ЮГА РОССИИ**

Специальность: 05.13.18 – математическое моделирование, численные
методы и комплексы программ

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
член-корреспондент РАН,
д-р физико-математических наук,
профессор Сухинов А.И.

Ростов-на-Дону, 2019

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	5
Глава 1. Современные модели биогеохимических превращений в водных экосистемах.....	20
1.1. Обзор основных лимитирующих биогенов и циклов их превращений в водных объектах.....	22
1.1.1. Цикл превращений азота.....	24
1.1.2. Цикл превращений фосфора.....	28
1.1.3. Формы кремния.....	30
1.2. Фитопланктон Азовского моря.....	32
1.2.1. Синезеленые водоросли (цианобактерии).....	32
1.2.2. Зеленые водоросли (хлорофиты).....	34
1.2.3. Диатомовые водоросли (диатомеи).....	35
1.3. Влияние концентраций питательных веществ на развитие фитопланктонных популяций.....	37
1.3.1. Необходимые питательные вещества - стехиометрия.....	37
1.3.2. Поглощение, накопление и скорость роста.....	38
1.4. Влияние концентраций солености и температуры на развитие фитопланктонных популяций.....	39
1.5. Обзор моделей, описывающих химико-биологические процессы в водных системах.....	42
1.6. Построение 3D модели биохимической трансформации форм фосфора, азота и кремния.....	47
1.7. Исследование модели трансформации форм фосфора, азота и кремния в задаче динамики фитопланктона.....	51
1.8. Построение 3D модели гидродинамики мелководных водоемов с учетом транспорта тепла и солей.....	61
1.9. Краткие выводы по главе 1.....	64
Глава 2. Построение и исследование дискретной модели биохимической трансформации форм фосфора, азота и кремния.....	66

2.1. Исследование линейной комбинации центральной разностной схемы и схемы «кабаре».....	66
2.1.1. Построение и исследование устойчивости линейной комбинации центральной разностной схемы и схемы «кабаре».....	66
2.1.2. Исследование погрешности аппроксимации линейной комбинации центральной разностной схемы и схемы «кабаре» на примере решения двумерной задачи конвекции-диффузии	73
2.1.3. Сопоставление результатов расчета двумерной задачи конвекции-диффузии на основе схемы «кабаре» и новой разностной схемы	79
2.2. Построение дискретной модели трансформации форм фосфора, азота и кремния в задаче динамики фитопланктона на основе метода заполненности ячеек с использованием линейной комбинации центральной разностной схемы и схемы «кабаре».....	83
2.2.2. Построение дискретного уравнения конвекции-диффузии-реакции на основе метода заполненности ячеек и предложенной схемы.....	83
2.2.3. Применение новой разностной схемы для построения дискретной модели биогеохимических циклов в водных экосистемах с учетом заполненности ячеек	88
2.3. Построение дискретной модели гидродинамики мелководных водоемов с учетом транспорта тепла и солей	97
2.4. Краткие выводы по главе 2	104
Глава 3. Выбор итерационного метода решения систем сеточных уравнений для задач моделирования биогеохимических циклов в мелководных водоемах. подбор значений параметров системы и начальных условий	105
3.1. Обзор некоторых итерационных методов для решения систем линейных алгебраических уравнений	105
3.2. Сравнение разностных схем и итерационных методов решения сеточных уравнений диффузии-конвекции-реакции	109

3.2.1. Сравнение итерационных методов на примере решения системы сеточных уравнений для задач моделирования биогеохимических циклов в мелководных водоемах	109
3.2.2. Сравнение двухслойной и трехслойной итерационных схем для решения сеточных уравнений диффузии-конвекции-реакции.....	111
3.2.3. О четырехслойной итерационной схеме.....	113
3.3. Исследование стационарных решений задачи динамики фитопланктона с учетом трансформации соединений фосфора, азота и кремния.....	116
3.4. Восстановление полей солености и температуры с использованием схем повышенного порядка точности	121
3.5. Статистическая обработка натуральных данных о стоках рек в акваторию Азовского моря.....	124
3.6. Краткие выводы по главе 3	126
Глава 4. Разработка программного комплекса и проведение вычислительного эксперимента по моделированию биогеохимических циклов в Азовском море	127
4.1. Алгоритм и программная реализация задачи.....	127
4.1.1. Общие сведения о программном комплексе	127
4.1.2. Функциональное назначение программного комплекса.....	127
4.1.3. Описание логической структуры программного комплекса	128
4.1.4. Используемые технические средства.....	136
4.1.5. Вызов и загрузка программного комплекса	136
4.1.6. Входные и выходные данные программного комплекса.....	137
4.2. Результаты численных экспериментов	138
4.3. Краткие выводы по главе 4	149
Заключение	151
Список литературы	153

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы

Прибрежные системы являются уникальными водными объектами, в которых обитают многие виды ценных промысловых рыб и другие, более мелкие представители флоры и фауны (зоопланктон, фитопланктон и др.). Азовское море является наиболее крупной прибрежной системой Юга России и еще несколько десятилетий назад было одним из самых продуктивных промысловых водоемов в мире. Однако, водоем постоянно подвергается воздействию биотических, абиотических, антропогенных факторов, что может негативным образом сказываться на состоянии экосистемы.

Азовское море обладает рядом специфических черт: небольшая глубина и континентальный климат обеспечивают почти равномерный прогрев по всей толще воды и небольшие перепады температуры по всей акватории (в основном не более 4 °С). Азовское море – переходный водоем между пресными речными и солеными водами Черного моря, что обеспечивает большой перепад солености, большой относительно объема моря речной сток обеспечивает значительное поступление биогенных веществ. Эти и другие факторы определяют биологическое разнообразие и высокую первичную продуктивность Азовского моря.

Азовское море обладает высокой скоростью реакции на колебания речного стока и изменение климатических условий, которые влекут за собой большую пространственно-временную изменчивость гидрофизических и биологических параметров процессов. Проведение натурных исследований и создание прогнозов развития прибрежных экосистем на основе полученных данных - дорогостоящий процесс, требующий больших денежных и трудовых затрат. Более оптимальным подходом в данном случае представляется проведение относительно простых натурных экспериментов и математическое моделирование биогеохимических и гидродинамических процессов. Поэтому построение пространственно-трехмерных математических моделей биогеохимических циклов, которые определяют биологическую продуктивность прибрежных систем и состояние водной экосистемы в целом, комплексированных с моделями гидродинамики, создание

дискретных моделей с использованием схем повышенной точности, верификация и валидация построенных моделей и численных алгоритмов, их реализующих, является актуальной проблемой математического моделирования природных систем.

С 2007 года наблюдается современный период осолонения Азовского моря [108, 112], что связано с уменьшением стока реки Дон на 35,6% по сравнению с периодом 1998-2006 гг. Снижение стока напрямую влияет на концентрацию биогенных элементов, от чего, в свою очередь, зависит развитие фитопланктона в Азовском море и особенно в Таганрогском заливе. Также осолонение моря влияет на изменение видового состава биоты, пресноводные виды вытесняются морскими. Построение прогнозов развития экосистемы Азовского моря в условиях повышения солености является актуальной задачей, которая может быть решена средствами математического моделирования.

Объектом исследования являются биогеохимические процессы, протекающие в Азовском море.

Предметом исследования являются динамика развития основных фитопланктонных популяций прибрежных систем Юга России на примере Азовского моря с учетом влияния температуры и солености, поглощения питательных веществ, а также трансформация форм фосфора, азота и кремния.

Степень разработанности темы исследования

Для прогнозирования состояния мелководных водоемов строятся математические модели, учитывающие уникальные особенности исследуемого водного объекта – климатические факторы и гидродинамические режимы. Среди трудов российских ученых, посвященных исследованию и прогнозу водных экосистем можно выделить работы Марчука Г.И., Матишова Г.Г., Сухинова А.И., Домбровского Ю.А., Бердникова С.В., Тютюнова Ю.В., Якушева Е.В., Ильичева В.Г., и др. Разработкой моделей, программных комплексов и информационных систем для мониторинга и прогнозирования состояния экосистем водных объектов занимаются ведущие зарубежные научно-исследовательские центры и

организации: Sweden's Meteorological and Hydrological Institute (Швеция); Center for Water Research (Австралия); National Oceanic and Atmospheric Administration (США); Centre for Ecology and Hydrology (Великобритания); Korea Research Institute of Ships and Ocean Engineering (Корея); Masaryk University, Research Centre for Toxic Compounds in the Environment (Чехия); Chinese Academy of Sciences, Yantai Institute of Coastal Zone Research, Key Laboratory of Coastal Environmental Processes and Ecological Remediation (Китай); Department of Environmental and Natural Resources Engineering (Греция); Virginia Institute of Marine Sciences (США).

Примерами существующих программных комплексов, позволяющих моделировать гидродинамические и биогеохимические процессы, происходящие в исследуемых водоемах, а также прогнозировать состояние экосистем водных объектов, могут быть: ИМЭСАМ (Имитационная система экосистемы Азовского моря, 1976 г., 1987 г.); программный комплекс ЭКОМОД (1994 г.); комплекс программ DEMLO (Dynamic Ecosystem Model of Lake Onego, 1997 г.); комплекс DEMLL (Dynamic ecosystem models of Lake Ladoga, 1987 г.); программный комплекс POM (Princeton Ocean Models, 1996 г.); комплекс программ EFDC (The Environmental Fluid Dynamics Code, 1996 г.); программный комплекс GLOBIO3 (Global Biodiversity Model, 2000 г.); комплекс PROTECH (Phytoplankton Responses To Environment Changes, 2001 г.); комплекс PISCATOR («Рыбак», 2002 г.); DYRESM–CAEDUM (2005 г.); программный комплекс SALMO (2006 г.); комплекс CAEDYM–ELKOM (2008 г.); модельный комплекс IPH–PCLake (2009 г.); комплекс CE–QUAL–W2 (2008 г.); программный комплекс DELFT 3D–ECO (2009 г.); комплекс CHARISMA (2009 г.); пакет программ «Mars3d» (2009 г.); комплекс программ CHTDM (Climatic Hydro Termo Dynamic Model, 2011 г.); CARDINAL (Coastal Area Dynamics Investigation Algorithm, 2012 г.); пакеты моделирования различных процессов аэрогидродинамики (GAS DYNAMICS TOOL, FlowVision, FLUENT, ANSYS Fluent, GMTED, Star-CD и др.); программный комплекс PHOENICS (2015 г.); пакет прикладных программ Экоинтегратор (2016 г.).

Существующие программные комплексы обладают рядом недостатков: они, как правило, используют упрощенные модели гидродинамических процессов,

например, базируются на гидростатическом приближении, не учитывают пространственно-неоднородное движение водной среды, не обладают необходимой точностью для моделирования вихревых структур течений, не являются консервативными, не учитывают сложную форму рельефа дна и берега, испарение, стоки рек, соленость, температуру и др. факторы, проявляют неустойчивость при значительных перепадах глубин и изменении плотности водной среды.

Решение задач переноса веществ, основанных на уравнениях адвекции-диффузии, требует отдельной разработки качественных аппроксимаций адвективных членов. Использование стандартных разностных схем при больших значениях сеточного числа Пекле ведет к потере точности. Одним из способов решения данной проблемы является уменьшение шагов по пространственно-временной сетке, однако это приводит к увеличению трудоемкости. Для решения класса задач, в которых адвекция преобладает над диффузией используют разностные схемы, например, «кабаре». Схемы «кабаре» были разработаны для решения задач аэроакустики [88]. В работе [104] для решения задачи переноса предложено использовать схему, представляющую собой линейную комбинацию разностных схем «кабаре» и «крест» с весовыми коэффициентами. Минимизируя погрешность аппроксимации, можно получить оптимальные значения весовых коэффициентов, как показано в работе [128]. Данный класс схем практически не обладает сеточной вязкостью и на его основе достаточно точно можно моделировать сложные структуры течения, например, вихревые. Развитие многопроцессорных вычислительных систем позволяет проводить моделирование аэро- и гидродинамических процессов на основе вихреразрешающих схем. В настоящее время многие авторы используют подобные схемы для моделирования турбулентных течений (в англоязычной литературе *large eddy simulation*, LES). Сотрудниками ведущих зарубежных научно-исследовательских организаций, таких как Stanford University (США), Imperial College London (Великобритания), Georgia Institute of Technology (США), Delft University of Technology (Нидерланды), Stanford Center for Turbulence Research (США), Technical University of Munich

(Германия), основанных на методологии вихреразрешающего моделирования. Сотрудниками Института вычислительной математики РАН Володиным Е.М., Глазуновым А.В., Грицуном А.С., Яковлевым Н.Г. и др. написан ряд работ, в которых произведено математическое моделирование климатических изменений, атмосферных процессов, гидродинамических процессов на основе вихреразрешающих схем.

Сотрудниками Южного научного центра РАН, АзНИИРХ, Южного федерального университета, Мурманского морского биологического института Кольского НЦ РАН построены математические модели биологических процессов, протекающих в водной среде, учитывающих соленость и температуру воды. Данные исследования отражают влияние факторов солености и температуры на фито- и зоопланктон, промысловые виды рыб, бентос. Результаты данных исследований предполагается использовать при исследовании гидробиологических процессов в Азовском море.

Целью диссертационной работы является разработка и исследование математической модели биогеохимических процессов, происходящих в прибрежных системах Юга России, позволяющей повысить точность прогнозирования динамики фитопланктонных популяций с учетом влияния солености и температуры на их развитие и трансформацию форм фосфора, азота и кремния, а также создание комплекса программ для решения поставленной задачи.

Для достижения данной цели решены следующие важные **задачи**:

– построена математическая модель динамики фитопланктонных популяций и трансформаций форм фосфора, азота и кремния, учитывающая влияние солености и температуры на развитие трех видов фитопланктона, поглощение фитопланктоном фосфатов и форм азота, переход форм фосфора и азота из одной в другую, а также поглощение кремния диатомовыми водорослями;

– проведено аналитическое исследование построенной непрерывной модели, выполнена линеаризация системы уравнений, определены неравенства, гарантирующие существование и единственность решения поставленной задачи;

– для расчета 3D вектора скорости движения водной среды, температуры и солености использована математическая модель гидродинамики мелководных водоемов, учитывающая транспорт тепла и солей;

– разработана новая трехслойная разностная схема, представляющая собой линейную комбинацию центральной разностной схемы и схемы «кабаре», обладающая большей точностью при больших значениях сеточного числа Пекле ($2 < Pe \leq 20$), исследованы устойчивость и точность новой разностной схемы, проведено сравнение с другими разностными схемами при больших значениях сеточного числа Пекле;

– на основе полученной схемы построена система дискретных уравнений для исходной системы уравнений конвекции-диффузии-реакции с учетом функции заполненности ячеек;

– выбран оптимальный итерационный метод;

– получены начальные условия и уточненные параметры системы уравнений;

– по гидрографическим картам восстановлены поля солености и температуры для Азовского моря, обладающие достаточной степенью гладкости;

– разработан программный комплекс для моделирования биогеохимических циклов в Азовском море с удобным пользовательским интерфейсом на C++, результаты визуализированы.

Материалы и методы исследования

Для решения поставленных задач в работе использовались методы математического анализа, теория разностных схем, разработанная Самарским А.А. и его научной школы, методы анализа натуральных данных. Описание биогеохимических процессов, а именно динамики развития фитопланктонных популяций с учетом влияния солености и температуры и трансформации форм фосфора, азота и кремния, производилось на основе уравнений конвекции-диффузии-реакции. Описание гидродинамических процессов, происходящих в водных экосистемах, производилось на основе уравнений движения водной среды

и неразрывности для жидкости с изменяющейся плотностью. Для решения задачи гидродинамики использовалась схема расщепления по физическим процессам. Устойчивость новой разностной схемы исследована с помощью метода гармоник, точность – с помощью рядов Фурье. Для восстановления полей солености и температуры использовались схемы повышенного порядка аппроксимации. Для решения системы сеточных уравнений был использован адаптивный попеременно-треугольный итерационный метод. Данные для определения параметров модели и начальных условий получены из экспедиционных исследований, спутниковых данных, информационной системы ЕСИМО. Программный комплекс реализован на языке C++ в среде MS VisualStudio. Визуализация результатов произведена в среде MathCad.

Научная новизна диссертационной работы заключается в построении математической 3D-модели, которая, в отличие от других известных моделей, учитывает влияние таких абиотических факторов, как соленость и температура на развитие фитопланктонных популяций. Проведено аналитическое исследование построенной непрерывной модели, выполнена линеаризация модели, определены неравенства, гарантирующие существование и единственность поставленной задачи, сформулирована теорема.

В работе предложена новая разностная схема для решения задач конвекции-диффузии реакции при больших значениях сеточного числа Пекле ($2 < Pe \leq 20$), которая представляет собой линейную комбинацию центральной разностной схемы и схемы «кабаре». Это трехслойная разностная схема, обладающая большей точностью, чем традиционная схема «кабаре», при решении задач, в которых конвекция преобладает над диффузией. Проведено исследование устойчивости, точности и порядка аппроксимации новой разностной схемы. Построены дискретные уравнения для решения задачи биогеохимических циклов на основе новой схемы с учетом заполненности ячеек.

Исследованы стационарные режимы задачи динамики фитопланктона с учетом трансформации форм фосфора, азота и кремния, получены начальные

условия и уточненные параметры модели. Проведена статистическая обработка натуральных данных о стоке реки Дон в акваторию Азовского моря.

Восстановлены поля солености и температуры Азовского моря по картографической информации с использованием схем повышенного порядка аппроксимации.

Построен программный комплекс с удобным пользовательским интерфейсом, позволяющий моделировать биогеохимические процессы в Азовском море. Программный комплекс позволяет строить прогнозы динамики развития экосистемы Азовского моря в условиях повышения уровня солености вод.

Достоверность научных положений и выводов

В данной работе применялись математически обоснованные методы. Методами математической физики выполнено исследование единственности решения линеаризованной на временной сетке начально–краевой задачи биогеохимических циклов, включающей систему из 10 уравнений параболического типа с нелинейными функциями источников, и произведена ее дискретизация непрерывной модели. Выполнено исследование точности и устойчивости построенной разностной схемы. Устойчивость новой схемы исследована методом гармоник, получено ограничение на шаги по времени и пространству. Исследована точность новой разностной схемы с использованием разложения в ряд Фурье. Новая разностная схема аппроксимирует модель со вторым порядком по времени и третьим по пространству. Результаты численных расчетов согласуются с натурными данными.

Научная и практическая значимость работы

Результаты проведенного в рамках диссертации исследования позволяют глубже понять биогеохимические процессы, происходящие в мелководных замкнутых морях и прибрежных системах. Использование актуальных натуральных данных, полученных в экспедициях, спутниковых снимков, баз данных морских информационных систем, разработанной математической модели

биогеохимических циклов и программного комплекса позволяют оценивать текущее состояние экосистемы Азовского моря и делать прогнозы развития экологической обстановки под влиянием природных и антропогенных факторов. Усовершенствование математических моделей биогеохимических циклов является важной практической задачей, решение которой позволит повысить эффективность использования морских ресурсов, строить прогнозы, просчитывать экологические риски, связанные с природным и антропогенным влиянием на морские экосистемы.

Апробация работы

Результаты, полученные в рамках диссертационного исследования, представлялись и обсуждались на следующих научных конференциях и семинарах:

1. Параллельные вычислительные технологии, ПаВТ'2019 (02-04 апреля 2019 г., г. Калининград, Россия).
2. 4th International Conference on Stochastic Methods (02-09 июня 2019 г., п. Дивноморское, г. Геленджик, Россия).
3. International Scientific-Technical Conference "Dynamics of Technical Systems" (11-13 сентября 2019 г., г. Ростов-на-Дону, Россия).
4. Young Scientist's Third International Workshop on Trends in Information Processing, YSIP-2019 (17-20 сентября 2019 г., п. Архыз, г. Ставрополь, Россия).
5. International Scientific-Technical Conference "Dynamics of Technical Systems" (12-14 сентября 2018 г., г. Ростов-на-Дону, Россия).
6. Современные проблемы математического моделирования, обработки изображений и параллельных вычислений 2017 (СПММОИИПВ-2017) (04-11 сентября 2017 г., п. Дивноморское, г. Геленджик, Россия).
7. Научный семинар кафедры высшей математики ТТИ ЮФУ (12 марта, 2010, Таганрог, Россия).
8. Научный семинар кафедры высшей математики ТТИ ЮФУ (2 февраля, 2009, Таганрог, Россия).

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект № 17-11-01286).

Публикации по теме диссертационной работы

По теме диссертационной работы опубликовано 18 работ, из них 5 статей опубликованы в изданиях, индексируемых в базе данных Scopus, 7 статей в отечественных реферируемых журналах, входящих в список изданий, рекомендованный ВАК. По теме диссертации получено 1 свидетельство о регистрации программ для ЭВМ.

Публикации в изданиях, индексируемых в базе данных Scopus:

1. Sukhinov A.I., **Belova Y.V.**, Filina A.A. Parallel implementation of substance transport problems for restoration the salinity field based on schemes of high order of accuracy // CEUR Workshop Proceedings. – 2019. – Vol. 2500.

2. Sukhinov, A.I., Chistyakov, A.E., **Belova, Y.V.** The difference scheme for the two-dimensional convection-diffusion problem for large Peclet numbers // MATEC Web of Conferences. – 2018. – Vol. 226. – 04030.

3. Nikitina, A.V., Kravchenko, L., Semenov, I., **Belova, Y.**, Semenyakina, A. Modeling of production and destruction processes in coastal systems on a supercomputer // MATEC Web of Conferences. – 2018. – Vol. 226. – 04025.

4. Sukhinov, A.I., Chistyakov, A.E., Nikitina, A.V., **Belova Y.V.**, Sumbaev, V.V., Semenyakina, A.A. Supercomputer modeling of hydrochemical condition of shallow waters in summer taking into account the influence of the environment // Communications in Computer and Information Science. – 2018. – Vol. 910. – pp. 336-351.

5. Sukhinov, A., Nikitina, A., **Belova, Y.**, Bednaya, T. Ecological and hydrophysical research of impact the vertical turbulent exchange coefficient on the concentration of dissolved oxygen in the bottom layer of shallow water // MATEC Web of Conferences, 2017. – Vol. 132. – 04018.

Публикации в издательствах, рекомендованных ВАК при Минобрнауки:

6. Чистяков А.Е., **Белова Ю.В.**, Проценко Е.А., Яковенко И.В. Решение задачи распространения загрязняющих веществ в приземном слое атмосферы на

основе схем "КАБАРЕ" // Успехи современного естествознания. – 2018. – № 2. – С. 177-183.

7. Сухинов А.И., Белова Ю.В., Чистяков А.Е. Решение задачи переноса веществ при больших числах Пекле // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. – 2017. – Т. 18. – № 4. – С. 371-380.

8. Белова Ю.В., Чистяков А.Е., Проценко Е.А. О четырехслойной итерационной схеме // Вестник Донского государственного технического университета. – 2016. – Т. 16. – № 4 (87). – С. 146-149.

9. Белова Ю.В., Исаев А.К., Никитина А.В., Сумбаев В.В. Решение задачи динамики фитопланктона при наличии механизма эктокринного регулирования // Вестник компьютерных и информационных технологий. – 2016. – № 12 (150). – С. 3-9.

10. Сухинов А.И., Белова Ю.В. Математическая модель трансформации форм фосфора, азота и кремния в движущейся турбулентной водной среде в задачах динамики планктонных популяций // Инженерный вестник Дона. – 2015. – № 3 (37). – С. 50.

11. Чистяков А.Е., Першина (Белова) Ю.В. Решение задачи динамики популяций на основе модели хищник-жертва // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2013. – № 1 (138). – С. 142-149.

12. Сухинов А.И., Першина (Белова) Ю.В. Достаточные условия единственности решения задачи динамики фитопланктона при наличии механизма эктокринного регулирования // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2009. – № 8 (97). – С. 134-148.

Статьи и тезисы в трудах, материалах Международных и Всероссийских конференций, в сборниках научных трудов:

13. Sukhinov A.I., Filina A.A., Nikitina A.V., Chistyakov A.E., Lyashchenko T.V., Semenov I.S., Litvinov V.N., Belova Yu.V. Modeling of microbiological destruction of oil pollution in coastal systems on supercomputer // Параллельные

вычислительные технологии (ПаВТ'2019) Короткие статьи и описания плакатов XIII Международной научной конференции. – 2019. – С. 99-110.

14. **Белова Ю.В.**, Атаян А.М., Чистяков А.Е., Стражко А.В. Исследование стационарных решений задачи динамики фитопланктона с учетом трансформации соединений фосфора, азота и кремния // Вестник Донского государственного технического университета. – 2019. – Т. 19. – № 1. – С. 4-12.

15. **Белова Ю.В.**, Проценко Е.А., Атаян А.М., Курская И.А. Моделирование прибрежной аэродинамики с учетом лесных насаждений // Computational mathematics and information technologies. – 2018. – Т. 2. – № 2. – С. 91-105.

16. **Белова Ю.В.**, Чистяков А.Е., Никитина А.В., Семенякина А.А., Сумбаев В.В. Разработка модели транспорта и трансформации соединений азота, фосфора и кремния в мелководном водоеме // Современные проблемы математического моделирования, обработки изображений и параллельных вычислений 2017 (СПММОИиПВ-2017) Труды Международной научной конференции. – 2017. – С. 18-27.

17. **Першина (Белова) Ю.В.** Решение задачи динамики фитопланктона при наличии механизма эктокринного регулирования // Информатика, вычислительная техника и инженерное образование. – 2013. – № 3 (14). – С. 45-54.

18. Чистяков А.Е., **Першина (Белова) Ю.В.** Математическая модель динамики популяций и ее численное решение на основе сеточных методов // Альманах современной науки и образования. – 2013. – №1. – С. 165-170.

Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ:

1. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Никитина А.В., Белова Ю.В. Решение задачи переноса веществ при больших числах Пекле // Свидетельство об официальной регистрации программ для ЭВМ № 2018613121. – № 2018610088; заявл. 09.01.2018; зарег. 02.03.2018.

Личный вклад соискателя

Автором диссертации совместно с научным руководителем проводилась

постановка задачи, обсуждались полученные основные научные результаты и формулировались выводы. Лично автором была проведена линеаризация непрерывной модели биогеохимических циклов, получены условия единственности решения на каждом временном слое, сформулирована теорема; исследованы точность и устойчивость разностной схемы, представляющей собой линейную комбинацию центральной разностной схемы и схемы «кабаре»; разработан программный комплекс, позволяющий производить моделирование и строить прогнозы динамики биогеохимических процессов в Азовском море, а также восстанавливать поля солености и температуры по картографической информации; проанализированы полученные результаты.

Краткое содержание и структура работы

Материал диссертации изложен на 165 страницах, включает 54 иллюстрации, 9 таблиц. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка используемой литературы, который содержит 134 наименования.

Во введении обосновывается актуальность темы, характеризуется степень разработанности темы исследования, формулируются цель и задачи диссертационного исследования, приводятся материалы и методы, использованные в работе, описывается научная новизна работы, раскрывается практическая и научная значимость.

Первая глава посвящена обзору и сравнению существующих моделей биогеохимических циклов, математическому описанию задачи биогеохимических процессов в Азовском море, аналитическому исследованию построенной непрерывной математической модели, а также описанию модели гидродинамики мелководных водоемов с учетом транспорта тепла и солей. В §1.1 приведен обзор основных лимитирующих элементов в мелководных водоемах и рассмотрены циклы их переходов из одной формы в другую. В §1.2 рассмотрены три основные вида фитопланктона Азовского моря - синезеленые (*Aphanizomenon flos-aquae*), зеленые (*Chlorella Vulgaris*) и диатомовые (*Skeletonema costatum*) водоросли. В §1.3 рассматривается влияние концентраций лимитирующих веществ на скорость

развития фитопланктона. В §1.4 рассматривается влияние таких абиотических факторов, как соленость и температура на динамику развития фитопланктонных популяций. В §1.5 приведен обзор моделей, описывающих химико-биологические процессы в водных системах. В §1.6 построена математическая модель динамики фитопланктонных популяций и трансформации форм фосфора, азота и кремния. Модель учитывает влияние температуры и солености на развитие фитопланктонных популяций и основные циклы превращений биогенных элементов. В §1.7 исследована построенная математическая модель трансформации форм фосфора, азота и кремния в задаче динамики фитопланктона, проведена линеаризация модели, получены условия существования и единственности решения поставленной задачи, сформулирована теорема. В §1.8 описана модель гидродинамики мелководных водоемов с учетом транспорта тепла и солей. В §1.9 приведены краткие выводы по первой главе.

Вторая глава посвящена разработке и исследованию дискретной разностной схемы, представляющей собой линейную комбинацию центральной разностной схемы и схемы «кабаре», построению трехмерной дискретной математической модели биохимической трансформации форм фосфора, азота и кремния. В §2.1 построена новая разностная схема, проведено исследование ее устойчивости и точности. В §2.2 построена трехмерная дискретная математическая модель на основе метода заполнения ячеек с использованием линейной комбинации центральной разностной схемы и схемы «кабаре», что позволяет повысить точность решения при больших значениях сеточного числа Пекле. В §2.3 построена дискретная модель гидродинамики мелководных водоемов с учетом транспорта тепла и солей с использованием схемы расщепления по физическим процессам. В §2.4 приведены краткие выводы по второй главе.

Третья глава посвящена выбору итерационного метода для решения системы сеточных уравнений, а также подбору значений параметров системы и начальных условий. В §3.1 проведен обзор некоторых итерационных методов для решения систем линейных алгебраических уравнений. В §3.2 проведено сравнение двух- и трехслойных разностных схем и итерационных методов решения сеточных

уравнений диффузии-конвекции-реакции по количеству итераций. В §3.3 исследованы стационарные решения задачи динамики фитопланктона, для чего рассматривается система ОДУ в предположении, что развитие фитопланктона лимитируется единственным питательным веществом, фосфором, азотом или кремнием соответственно. В §3.4 проведено восстановление полей солёности по картографической информации. В §3.5 проведена обработка натурных данных о стоках реки Дон в акваторию Азовского моря методами статистического анализа. В §3.6 приведены краткие выводы по третьей главе.

Четвертая глава посвящена разработке программного комплекса и проведению вычислительного эксперимента по моделированию биогеохимических циклов в Азовском море и визуализации полученных результатов. В §4.1 приведено подробное описание программного комплекса для моделирования биогеохимических процессов в Азовском море и алгоритм его работы. Также приведен алгоритм работы программного комплекса для расчета модели гидродинамики мелководных водоемов с учетом транспорта тепла и солей. В §4.2 приведены результаты численных экспериментов, в том числе и для повышенной солёности. §4.3 приведены краткие выводы по четвертой главе.

В заключении изложены основные результаты и выводы.

ГЛАВА 1. СОВРЕМЕННЫЕ МОДЕЛИ БИОГЕОХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В ВОДНЫХ ЭКОСИСТЕМАХ

До 60-х годов XX века используемые модели биогеохимических циклов базировались на нуль-мерных моделях, которые сводились к обыкновенным дифференциальным уравнениям с начальными условиями и не учитывали пространственной неоднородности распространения основных видов планктонных популяций и биогенных веществ.

В последующие годы наметилась тенденция перехода от традиционной модели, описывающей растворенный кислород, к эвтрофикационной модели. Простейшая эвтрофикационная модель Vollenweider [94] указывала на более широкие инженерные перспективы в управлении экосистемами, особенно с применением более мощных компьютеров. Исследователи Davidson и Clymer [15] впервые применили свою простую модель развития фитопланктона на аналоговом компьютере в 1964.

В работе Richard Parker [66] описано одно из первых применений гидробиологической модели, которое имеет своей целью управление экосистемой.

В 1970-х годах активно исследуется моделирование для управления экосистемами. Много существенных моделей были разработаны в этот период такими авторами, как O'Connor, DiToro, Thomann и др. [21,22,61,86]. Калибровкой этих моделей на основе натуральных данных занимались ученые Park [65], Bierman [6], Chen [11], Jorgensen [45, 47] и другие. Зависимость скорости роста особей от содержания биогенных веществ в большинстве моделей обозначена в форме Michaelis-Menten.

Так модель автора Chen [11] включала в себя две разновидности фитопланктона, зоопланктон, азот и фосфор. Развитие фитопланктона ограничивалось двумя факторами: освещенностью и наличием питательных веществ, для каждого из которых использовалось выражение Michaelis-Menten. Требовалось 42 секунды для моделирования развития на 10 дней с шагом по времени в один час. Моделирование производилось на UNIVAC 1108 – одним из самых мощных компьютеров того времени.

В 1980-х годах для построения моделей биогеохимических циклов использовался стохастический подход. Показательной является работа Straten и Keesman [93], в которой авторы описывают классическую калибровку выборки, определение доверительных интервалов, а затем проверку того, что предсказание действительно находится в доверительном интервале.

Исследованиями развития планктонных сообществ под влиянием биотических и абиотических факторов, распространения биогенных веществ, занимались такие российские ученые, как Домбровский Ю.А. [106], Матишов Г.Г. [115], Сухинов А.И., Тютюнов Ю.В., Бердников С.В. [115], Якушев Е.В. и др.

Исследования различных форм биогенных и загрязняющих веществ и их влияние на развитие фитопланктонных популяций и экосистем морей в целом представлены в работах Якушева Е.В. и др. [10, 20, 73]

Трофические модели, модели таксиса, модель хищник-жертва и другие модели, описывающие развитие и взаимодействие популяций, занимающих один ареал обитания подробно исследованы в работах Тютюнова Ю.В. и соавторов [110,54,49].

Модели эвтрофикации, распространения и трансформации загрязняющих веществ в прибрежных системах были предложены и численно реализованы на суперкомпьютерных вычислительных системах Сухиновым А.И., Чистяковым А.Е., Никитиной А.В. и др. [42,84]. Было проведено моделирование образования «заморных» зон в Азовском море, предложена технология биоремедиации морских вод [20,59].

С 1980-х модели в основном становились более сложными и рассматривались на сетках, содержащих все большее количество узлов и учитывающих большее количество факторов, включая седиментационную динамику. Построение современных моделей гидробиологии прибрежных водных систем требует включения пространственно-трехмерных моделей биогеохимических циклов с высоким разрешением: десятки-сотни метров по горизонтальным направлениям, десятки сантиметров–метры по вертикальному направлению. Необходима

разработка схем повышенного порядка точности и современных численных методов, позволяющих ускорить решение матриц большой размерности.

В начале первой главы приведен обзор объектов, входящих в модель - фосфора, азота, кремния и циклов их превращений, трех популяций фитопланктона – синезеленых (*Aphanizomenon flos-aquae*), зеленых (*Chlorella Vulgaris*) и диатомовых (*Skeletonema costatum*) водорослей. Также проведен обзор предшествующих работ.

Строится и исследуется непрерывная трехмерная модель динамики фитопланктонных популяций с учетом трансформации форм фосфора, азота и кремния, применяемая к мелководным водоемам, в том числе к Азовскому морю. Учитывается влияние солености и температуры на динамику развития фитопланктонных популяций. Модель формулируется как краевая задача для системы уравнений диффузии-конвекции-реакции. Исследуются вопросы, связанные с корректностью постановки линеаризованной начально-граничной задачи для системы уравнений параболического типа с частными производными.

1.1. Обзор основных лимитирующей биогенов и циклов их превращений в водных объектах

На скорость потребления живыми организмами биогенных элементов оказывают влияние такие факторы, как солнечная радиация, наличие и доступность питательных веществ, соленость и pH. Также на скорость реакций, происходящих в живых организмах, оказывает влияние температура.

Одним из механизмов адаптации организмов к окружающей среде является использование специфических ресурсов, которые помогают выигрывать в конкуренции с другими организмами, защититься от воздействия окружающей среды и хищников.

В ситуации, когда развитие организма зависит от нескольких ресурсов, действует закон Либиха, гласящий, что наиболее важным для организма является тот ресурс, количественное значение которого отклоняется от нормы больше других [102]. Такой ресурс называется лимитирующим фактором.

В таблице 1.1 приведен обзор основных питательных веществ в водных экосистемах и их роль в развитии живых организмов [95].

Таблица 1.1 – Основные питательные вещества в водных экосистемах

Наименование питательного вещества	Влияние на развитие организмов
Углерод и водород	являются основными составляющими атомами большинства органических веществ, участвуют в процессе фотосинтеза. Они доступны для автотрофов в водной окружающей среде в основном через объединенный CO_2 и воду непосредственно. В морских системах концентрация CO_2 около 0,3 мг/л, которой вполне достаточно для фотосинтеза.
Кислород	важный биогенный элемент, необходимый в элементарной форме для дыхания растениям и животным. Зачастую находится в окружающей среде в форме соединений. От наличия или отсутствия кислорода зависит протекание многих реакций в донных отложениях и водной толще.
Азот	входит в состав белков, аминокислот, нуклеиновых кислот, хлорофилла и т.д., является основным лимитирующим веществом в водных экосистемах. В окружающей среде содержится в форме простого вещества – газа, или в форме ионов – нитритов, нитратов, аммония.
Фосфор	играет ведущую роль в процессе фотосинтеза, входит в состав аденозиндифосфата (АДФ) и аденозинтрифосфата (АТФ) – веществ, играющих большую роль в передаче энергии и веществ в организме. Также фосфор необходим для построения нуклеиновых кислот, передающих генетическую информацию. В больших количествах поступает в водоемы в результате антропогенной деятельности.
Сера	является компонентом аминокислот и играет важную роль в реакциях, протекающих в анаэробной бентической окружающей среде.
Кремний	является важным биогенным элементом для фитопланктона, особенно диатомовых водорослей, которые строят на его основе кремниевые структуры, называемые фрустулы.

Помимо таких факторов как солнечная радиация, соленость, температура, pH среды и других, лимитировать развитие организмов могут питательные вещества, находясь в окружающей среде в количестве, недостаточном для нормального роста и развития организмов. Концепция лимитирующего питательного вещества является основополагающей в моделировании динамики развития экосистем с тех пор, как Redfield установил постоянство соотношения питательных веществ в

составе водорослей [68]. Это в последствии привело к мнению, что основным питательным веществом, лимитирующим развитие организмов в наземных экосистемах, является фосфор, а в водных – азот. Много позже экологи подвергли сомнению это предположение, и многие заключили, что в каждом конкретном случае необходимо проверять, какое вещество является лимитирующим. В частности, Kilham и Неск опровергали предположение, что азот является основным лимитирующим элементом в морских системах [43].

Рассмотрим биохимические циклы и трансформации основных лимитирующих веществ в водных средах, в том числе и в Азовском море.

1.1.1. Цикл превращений азота

Приведем краткую схему цикла превращений азота в мелководных водоемах, отражающую наиболее существенные процессы.

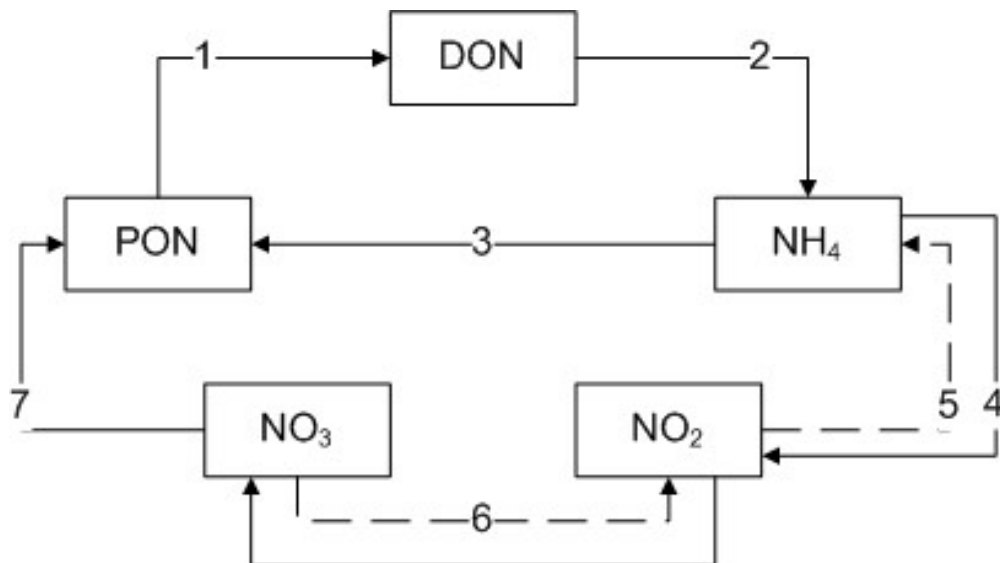
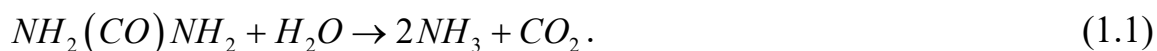


Рисунок 1.1 – Цикл превращений азота. PON – органический азот в фитопланктоне, DON – растворенный органический азот, 1 – отмирание фитопланктона, 2 – аммонификация, 3 – потребление аммония фитопланктоном, 4 – нитрификация (окисление аммония), 5 – анаэробная аммонификация нитритов, 6 – анаэробная редукция нитратов, 7 – потребление нитратов фитопланктоном

Рассмотрим подробнее основные процессы в цикле трансформаций азота. Это аммонификация, ассимиляция аммиака, нитрификация, денитрификация.

Аммонификация

Аммонификация – процесс разложения органических соединений, содержащих азот (в особенности белков, мочевины, нуклеиновых кислот и др.) до аммиака. Многие растения, животные, грибы, и особенно гнилостные микроорганизмы и уробактерии участвуют в процессе аммонификации. Процесс образования аммиака из мочевины может быть описан выражением:



На протекание реакций с участием аммиака влияет уровень рН воды.

В бентической среде азот присутствует главным образом в форме аминокислот, пуринов и пиримидинов. В зависимости от аэробных или анаэробных условий протекания реакций, эти вещества расщепляются рядом ферментов на углекислый газ, сероводород или аммиак, сера при этом выделяется из аминокислот. Процесс аммонификации (минерализации или гидролиза) был исследован и описан во многих работах [60,65,87].

Ассимиляция аммиака

Многие организмы потребляют ионы аммония. Ионы являются источником азота для первичных продуцентов – фитопланктона и бентических растений, дополняя азот, поступающий из нитратов.

В большинстве моделей предполагается, что есть некоторый предельный уровень потребления азота, что выражается уравнением Михаэлиса-Ментен, в котором определена константа полунасыщения для неорганического азота и концентрация азота выражается суммой форм нитрата и аммония.

$$K_{act} = K_{max} \frac{NH_4 + NO_3}{NH_4 + NO_3 + KN_{1/2}}, \quad (1.2)$$

где K_{max} - максимальное значения уровня потребления; K_{act} - текущее значение уровня потребления; $KN_{1/2}$ - коэффициент полунасыщения.

Отметим, что когда общая концентрация аммония и нитрата равна коэффициенту полунасыщения, тогда текущее значение уровня потребления равно половине максимального значения уровня потребления. Ранние работы по

определению констант полунасыщения принадлежат Dugdale [29] и Eppley и др. [30]

Нитрификация

Нитрификация – это процесс окисления аммиака до нитритов, а затем до нитратов. Этот процесс протекает под влиянием нитрификационных бактерий, исследование которых было представлено в работе Kowalchuk [50]. В аэробной окружающей среде хемолитотрофные бактерии (в частности из рода *Nitrosomona*) преобразуют аммиак в ионы нитрита, используя энергию, полученную из реакции поглощения CO_2 . Процесс окисления нитритов до нитратов происходит преимущественно под влиянием бактерий рода *Nitrobacter*, поэтому концентрация нитрита относительно низкая. Во многих моделях стадия образования нитрита опускается, что отражено, например, в уравнении (1.2). Часто формы нитрита и нитрата объединяют и записывают как NO_x .

Бактерии *Nitrobacter* и *Nitrosomonas* присутствуют в большом количестве в водах, богатых азотом. На процесс нитрификации сильно влияет состояние окружающей среды. Если вторая, более чувствительная стадия страдает от уменьшения популяции *Nitrobacter*, то нитрит может накапливаться в системе. Избыточное накопление нитрита в воде представляет собой опасность для здоровья из-за возможности образования высокотоксичных нитрозаминов. Однако большая концентрация нитратов в воде тоже может быть опасна, так как, попадая в желудочно-кишечный тракт младенцев, он может быть редуцирован до нитрита, который соединяется в организме с гемоглобином в крови, что приводит к проблемам с дыханием.

В работе Rheinheimer [70] отмечается, что нитрификация, сопровождаемая потреблением кислорода, имеет место в толще воды или в донных отложениях. Из-за слабого вертикального перемешивания и недостаточного поступления кислорода к придонным слоям воды процесс нитрификации может протекать медленно. Если произойдет случайное перемешивание, например, во время шторма, это может вызвать резкое повышение концентрации аммония.

Растительные организмы легче потребляют азот в форме нитратов чем нитритов, а скорость потребления может быть выражена в форме (1.2). Однако из всех форм азота растения в первую очередь потребляют аммиак, что должно учитываться при моделировании.

Денитрификация

Денитрификация – это процесс восстановления нитратов до нитритов, аммония и далее до газообразных форм азота. Количество нитратов в окружающей среде может уменьшаться в процессе ассимиляции его группой факультативных анаэробных организмов. Ферменты, нитриты и нитраты участвуют в процессе образования аммиака до его включения в состав аминокислот. Этот процесс называется ассимиляторной денитрификацией. Реакции не происходит в присутствии аммония. Этот процесс не приводит к накоплению аммония в окружающей среде из-за его быстрого перехода в органические формы. Фактически, если образуется аммоний, то процесс восстановления автоматически прекращается.

Кислород может быть удален из нитрат-иона с образованием нитрита рядом факультативных анаэробных бактерий, в том числе *Escherischia*, *Enterobacter*, *Flavobacteria* [22], в условиях почти полного отсутствия свободного кислорода. Этот процесс называется диссимиляторной денитрификацией. Некоторые организмы в процессе аммонификации азота способны отделять молекулы оставшегося кислорода от нитрита, образуя ионы аммония. Однако ни один вид организмов этой группы не способен производить газообразные формы азота, поэтому эти процессы просто влияют на скорость внутренних циклов, но не влияют на общую массу азота в водной экосистеме. В результате, хотя процессы важны для управления процессами очистки сточных вод, они не так важны, как денитрификация. На процесс диссимиляторной денитрификации не влияет наличие аммиака.

Деятельности некоторых анаэробных гетеротрофов, таких как *Pseudomonas denitrificans* и *Paracoccus denitrificans*, может привести к потерям азота вследствие образования газообразных форм в результате цепочки реакций денитрификации:



Денитрификация является распространенным и очень значительным процессом оттока азота в донных отложениях многих природных систем, однако протекает в толще воды только при очень низком содержании кислорода. Herbert [44] сделал полезный обзор циклов азота в прибрежных морских системах, содержащий более 250 ссылок. Touchette и Burkholder [89] рассмотрели метаболизм азота и фосфора в морских водорослях.

Для Азовского моря источниками неорганических форм азота являются стоки рек, атмосферные осадки, биохимические процессы минерализации органической материи, аммонификации и нитрификации. Таганрогский залив, вследствие влияния стока реки Дон, характеризуется максимальными концентрациями аммония, нитритов и нитратов, особенно в летний период [111]. На основной акватории Азовского моря концентрация минеральных форм азота ниже. Наибольшая концентрация аммония наблюдается в областях с пониженным содержанием кислорода, наибольшие концентрации нитритов и нитратов – в прибрежных областях и в областях стоков рек.

Вследствие повышения скорости роста фитопланктонных популяций в период с весны до осени, в Азовском море снижается уровень минеральных форм азота и, соответственно, повышается содержание органических форм азота. В условиях снижения концентраций доступных форм азота до критических норм, азот может стать лимитирующим биогеном для живых организмов.

1.1.2. Цикл превращений фосфора

Фосфор – важный элемент во всех живых системах. Он играет важную роль в процессе фотосинтеза, входит в состав аденозиндифосфата (АДФ) и аденозинтрифосфата (АТФ) - веществ, играющих большую роль в передаче энергии и обмене веществ в живых организмах. Также фосфор необходим для построения нуклеиновых кислот, передающих генетическую информацию. Согласно соотношению Redfield, соотношение углерода, азота и фосфора (C:N:P) в тканях водорослей равно 106:16:1 – в атомарном или 42:7:1 – в весовом

эквиваленте. Если концентрация азота значительно (более чем в семь раз) превышает концентрацию фосфора в окружающей среде, то фосфор выступает в роли лимитирующего биогена. Day с соавторами [16] вывели соотношения азота и фосфора для речных (230:20) и океанических (250:35) вод в атомарном эквиваленте. Отсюда следует, что фосфор будет основным лимитирующим элементом в пресных водах. В своей работе Vollenweider [92] выделил три формы фосфора: взвешенный органический фосфор (Particulate Organic Phosphorous, POP), растворенный органический фосфор (Dissolved Organic Phosphorous, DOP) и фосфаты (PO_4).

Неорганические фосфаты делятся на первичные, вторичные и третичные, в зависимости от валентности фосфора. Первичные фосфаты очень хорошо растворимы в воде, а растворимость вторичных и третичных форм значительно ниже.

Цикл превращений фосфора, представленный на рисунке 1.2, включает потребление неорганических форм фосфора фитопланктоном и минерализация органических форм фосфора.

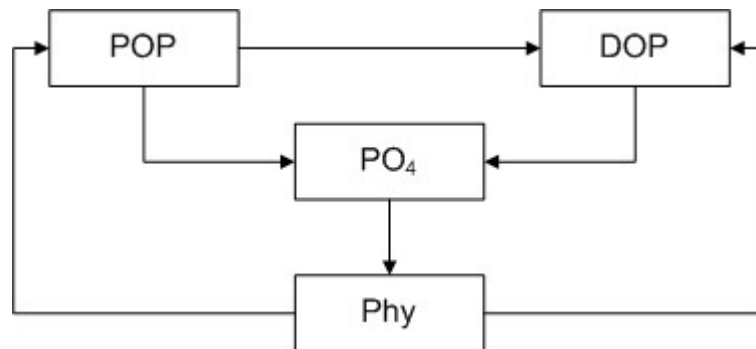


Рисунок 1.2 – Цикл превращений фосфора. POP - взвешенный органический фосфор, DOP – растворенный органический фосфор, PO₄ – фосфаты

Неорганические формы фосфора могут быть следующими: PO_4^{3-} , HPO_4^{2-} , $H_2PO_4^-$. Осаждение нерастворимых форм или связывание их с частичками глины, а затем возвращение органических и нерастворимых форм фосфора обратно к доступным растворимым неорганическим формам происходит непрерывно в равновесии, зависящем от уровня *pH*.

Один из ключевых факторов, позволяющих контролировать этот процесс – наличие ионов металлов – кальция и трехвалентного железа особенно. Магний и алюминий также играют важную роль в этом процессе. Ионы трехвалентного железа имеют большее влияние в этом процессе, чем ионы растворимого двухвалентного железа из-за склонности последних образовываться из нерастворимых форм трехвалентного железа в анаэробных условиях. Не редки ситуации, когда в нижних слоях водной толщи в холодное время года в анаэробных условиях высвобождаются растворимые формы фосфора, в то время как количество железа сокращается [72]. Весной, когда вода становится теплее, и рост водорослей усиливается, этот высвобожденный фосфор обеспечивает достаточное количество питательного вещества.

Влияние фосфора на развитие различных видов планктона описано Siokou-Frangou, Christaki и др. [38]. В своей работе Smil [74] представил обзор циклов фосфора с учетом влияния антропогенных факторов.

Обзор глобального оборота фосфора в окружающей среде был сделан Benitez-Nelson [5]. Цикл фосфора в придонных отложениях исследован Chen и др. [85]. Связывание или адсорбция этого элемента рассмотрены учеными Voroves [7], Lehtoranta [53], Dodds [23].

В Азовское море соединения, содержащие, фосфор попадают в основном в результате антропогенной деятельности и с речным стоком. Фосфор в минеральной форме, доступной для потребления живыми организмами, составляет в среднем около 12% от всего фосфора, содержащегося в водах Азовского моря. Сезонная динамика органических форм фосфора характеризуется равномерным распределением для Азовского моря и Таганрогского залива [107].

1.1.3. Формы кремния

Кремний является одним из самых распространенных веществ, однако в силу того, что большинство его соединений малорастворимы, содержания кремния в водных экосистемах невелико. В природе он используется травянистыми растениями и диатомовыми водорослями для строения особых структур.

Кремний поступает в морские воды с речным стоком, атмосферными осадками, в результате антропогенной деятельности: строительства заводов по производству керамических, стекольных, бетонных изделий и т.д.

Кремний находится в воде в различных соединениях, виды которых зависят от минерализации, состава воды и значений pH (таблица 1.2). Часть кремния находится в растворенном состоянии в виде кремниевой кислоты и ее производных



Таблица 1.2 – Соотношение форм производных кремниевой кислоты в воде в зависимости от значений pH, % [117].

Форма	pH			
	7	8	9	10
$[H_3SiO_4^-]$	99.9	98.6	87.7	41.5
$[H_4SiO_4]$	0.1	1.4	12.3	58.5

Основным потребителем кремния в Азовском море являются диатомовые водоросли. Они быстро исчерпывают запасы растворенного кремния, в результате чего он становится лимитирующим биогенным элементом для диатомей. Кремний поступает в клетки диатомовых в форме $Si(OH)_4$ через белки транспорта кремниевой кислоты [12] и воду



Пространственное распределение кремниевой кислоты в Азовском море и Таганрогском заливе определяет речной сток. Потребление кремниевой кислоты диатомовыми водорослями определяет ее сезонную динамику. Минимальная концентрации кремниевой кислоты наблюдается в осенний и весенний периоды, максимальная – летом [111].

1.2. Фитопланктон Азовского моря

Фитопланктон Азовского моря состоит из 183 форм. Основными видами являются синезеленые, зеленые и диатомовые водоросли. Видовой состав фитопланктона Азовского моря изображен на рисунке 1.3 [126].



Рисунок 1.3 – Диаграмма видовой состава фитопланктона по данным экспедиционных работ (июль 2010 г.)

1.2.1. Синезеленые водоросли

Цианофиты, цианобактерии или проще синезеленые водоросли. Синезеленые водоросли являются причиной «цветения» вод, а при отмирании вызывают токсины, которые, попадая в организм человека через питьевую воду оказывают негативное влияние на нервную систему.

Синезеленые водоросли являются прокариотами – в клетке отсутствует обособленное ядро, хроматофоры, аппарат Гольджи, митохондрии, эндоплазматическая сеть. Однако мембранная система хорошо развита. Эти водоросли не имеют жгутиковой стадии. Широко распространены по всему миру, составляют значительную часть биомассы океанического фитопланктона. В Азовском море синезеленые водоросли представлены видом *Aphanizomenon flos-aquae*.

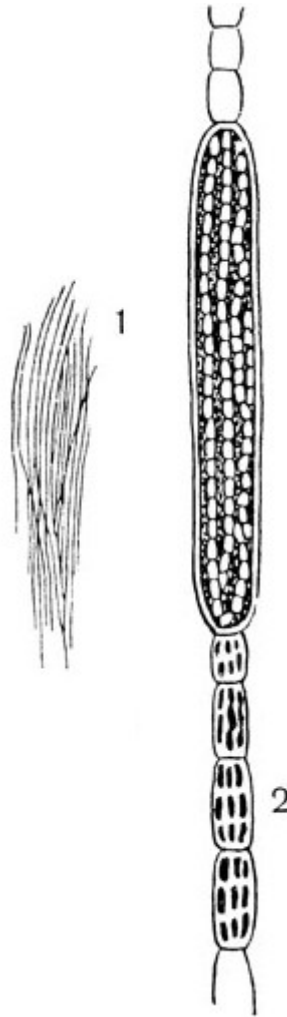


Рисунок 1.4 – Синезеленые водоросли, вызывающие цветение воды: 1 - скопление группы *Aphanizomenon flos-aquae*; 2 - часть нити при увеличении; прослеживаются вегетативные клетки и одна вытянутая в длину спора

Клетки *Aphanizomenon flos-aquae* соединяются в нити, которые в свою очередь образуют колонии. Нити содержат вегетационные клетки цилиндрической формы – гетеросциты, а также удлиненные веретенообразные споры. Нитчатые водоросли размножаются спорами, способными прорасти в новые нити.

Отдельная клетка цианобиты меньше клеток других видов фитопланктона, однако, они зачастую образуют большие колонии или нити. На рисунке 4 схематично изображены нити, которые образованы цианобитами.

Aphanizomenon достигает 80-90% биомассы фитопланктона Азовского моря и обитают преимущественно в Таганрогском заливе. В период «цветения» вод

концентрация синезеленых водорослей может составлять 5-6 млн. особей в 1 м³ воды [116].

1.2.2. Зеленые водоросли

Хлорелла - род одноклеточных зелёных водорослей, относимый к отделу *Chlorophyta*. Водоросли имеют сферическую или эллипсоидальную форму, диаметр не превышает 15 мкм, характерно отсутствие жгутиков. Хлоропласты хлореллы содержат хлорофилл-А и хлорофилл-Б, поэтому для процесса фотосинтеза хлорелле требуются только вода, углекислый газ, солнечная радиация, биогенные элементы для развития и размножения.

В Азовском море распространен планктонный штамм *Chlorella vulgaris* BIN.

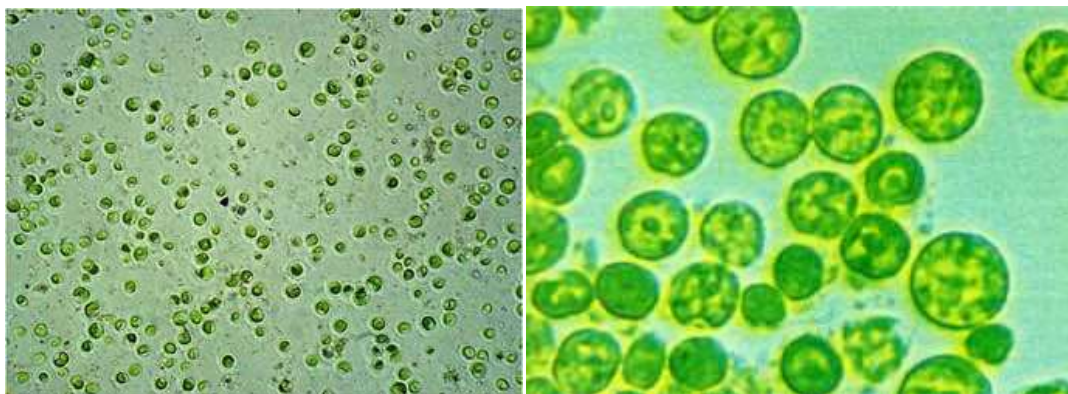


Рисунок 1.5 – Зеленые водоросли вида *Chlorella vulgaris* BIN

Исследования показали, что преобладание зеленых или синезеленых водорослей имеет место при дисбалансе в водоеме пропорции фосфор:азот. Эта пропорция определяется соотношением Redfield. Это соотношение также изучалось с целью определения влияния фосфора и азота на преобладание тех или иных видов водорослей в водоемах [114]. В результате изучения соотношения Redfield было обнаружено, что смещение пропорции в ту или иную сторону характеризуется доминированием определенных видов. Зеленые водоросли преобладают при сравнительно большом количестве нитратов ($\text{NO}_3 > 5\text{мг/л}$) по отношению к фосфатам в воде, и наоборот, малое количество или отсутствие азота

и большое количество фосфатов ($\text{PO}_4 > 0.15\text{мг/л}$) приводит к преобладанию синезеленых водорослей.

Для борьбы с токсичными синезелёными водорослями применяют различные методы, в том числе и альголизацию водоемов штаммом зелёной водоросли *Chlorella Vulgaris BIN* [116].

1.2.3. Диатомовые водоросли (диатомеи)

Диатомовые водоросли – одноклеточные морские водоросли, самая распространенная группа из водных эукариотических организмов [40]. Существует приблизительно 250 родов и более 100000 разновидностей. Наиболее общими видами являются *Skeletonema*, *Thalassiosira*, *Nitzschia*. Клетки окружены твердой кремнеземной оболочкой, называемой *фрустулой*, толщина которой зависит от содержания кремния в воде и колеблется от сотых долей микрометра до 1-3 мкм. Характерный цвет водорослей происходит от каротиноида, золотисто-коричневого фукоксантина [51]. Диатомит – осадочная порода, состоящая преимущественно из останков диатомовых водорослей, используется при создании промышленных фильтров. Так как диатомеи строят свои оболочки из кремния, то находясь в недостатке он может лимитировать развитие водорослей.

Диатомовые водоросли относительно крупные, поэтому их движение в верхних слоях водной толщи ограничено.

Некоторые разновидности ядовиты и являются причиной экономических потерь. Например, *Pseudo-nitzschia*, обитающая в том числе в Азовском море, и некоторые другие виды выделяют домоевую кислоту, которая вызывает отравление ракообразных, *Chaetoceros* являются причиной гибели рыбы [40]. Обзор распространенных видов вредоносных диатомей приведен в работе Fryxell и Hasle [37].

Диатомовые водоросли могут размножаться не только вегетативным делением, но и половым путем с образованием спор [40].

В Азовском море наиболее распространенным видом диатомовых водорослей является *Skeletonema costatum*. Они также образуют колонии, изображение которых приведено на рисунках 1.6, 1.7.

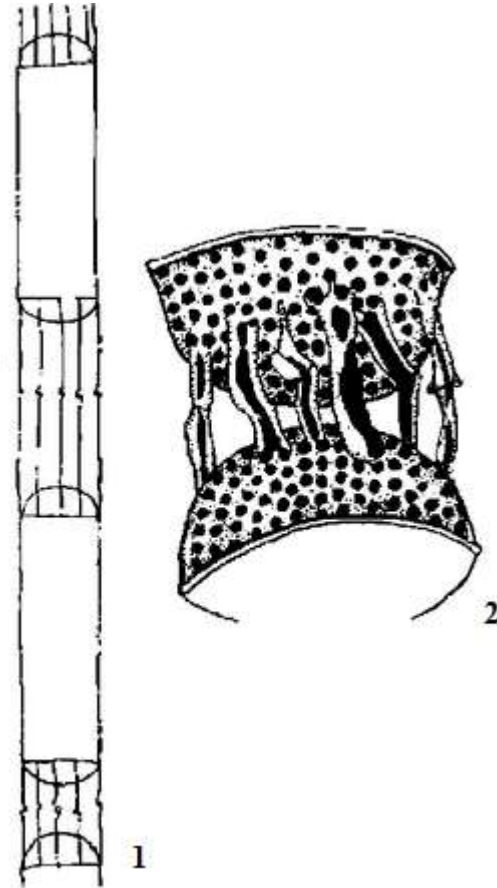


Рисунок 1.6 – Диатомовые водоросли вида *Skeletonema costatum*. 1 – схематичный вид колонии *Skeletonema costatum*, 2 – соединительные отростки между двумя особями *Skeletonema costatum*

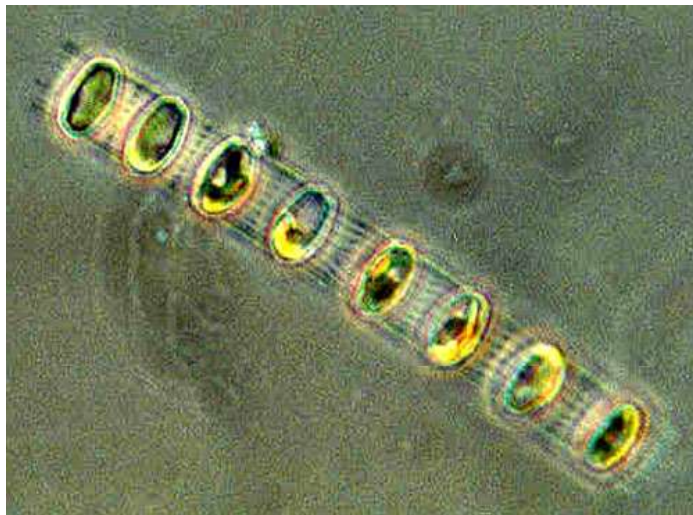
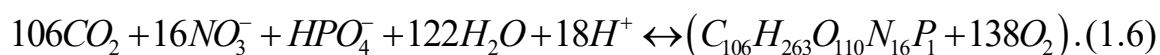


Рисунок 1.7 – Колония *Skeletonema costatum*

1.3. Влияние концентраций питательных веществ на развитие фитопланктонных популяций

1.3.1. Необходимые питательные вещества - стехиометрия

В 1950-х Redfield [68] продемонстрировал, что пропорции основных биогенных элементов, таких как кислород, азот, фосфор, магний, железо, медь, марганец, цинк, молибден, сера, калий и кальций и др., или по-другому стехиометрия, удивительно постоянны во многих сообществах водорослей. Он определил среднее соотношение основных биогенных веществ – углерода, азота и фосфора в морских водорослях как соответственно 42:7:1 в весовом и 106:16:1 в атомарном эквивалентах. Stumm и Morgan [80] определили уравнение усредненного состава водорослей и поглощения ими питательных веществ в форме



Соотношение основных питательных веществ в форме Redfield для диатомовых водорослей находится в следующих пропорциях: 23:16:1 в атомарном эквиваленте для кремния, азота и фосфора соответственно [68].

В книге «Экологическая стехиометрия» авторов Sterner и Elser [78] подробно описано поглощение биогенов растениями и переход этих веществ различных стехиометрических соотношениях по пищевой цепочке к другим организмам. Из этих веществ углерод, кислород и углерод обычно находятся в достаточном количестве в окружающей среде и в роли лимитирующих биогенов выступают азот и фосфор.

При наличии в достаточном количестве азот может составлять до 10% сухого веса водорослей. В водных системах он доступен в органической, неорганической или газообразной форме. Газообразную форму азота могут использовать только организмы, обладающие способностью азотфиксации. Этой особенностью обладают цианобактерии (синезеленые водоросли). Способность к азотфиксации и преимущество цианобактерий в средах с низким содержанием является предметом дискуссий [24,30,34,79].

Почти все водоросли могут использовать неорганические формы азота в качестве источника этого питательного вещества, и на скорость роста не влияет,

является ли форма нитратом, нитритом или аммонием, но считается, что в первых двух случаях преобразование в аммоний (с использованием нитрат- и нитритредуктазы) происходит до включения в клеточную структуру.

Фосфор участвует в фотосинтетической передаче энергии при АТФ- и АДФ-трансформациях, а также входит в состав основных клеточных соединений, таких как нуклеиновые кислоты, фосфолипиды, фосфорилированные сахара и различные сложные эфиры. Фосфор извлекается из неорганических форм посредством образования АТФ одним из трех способов: а) фотофосфорилирование, б) окислительное фосфорилирование, в) фосфорилирование на уровне субстрата (например, при гликолизе). Источником фосфора может быть либо растворенный ортофосфат, либо органические формы фосфора, такие как полифосфаты. Последние используются клетками организмов как запасы фосфора. Поглощение и хранение фосфора таким способом называются интенсивным усвоением.

1.3.2. Поглощение, накопление и скорость роста

Скорость роста фитопланктона в общем случае может быть описана дифференциальным уравнением первого порядка

$$\frac{dP}{dt} = \mu P \quad (1.7)$$

где P – масса или концентрация фитопланктона; μ – удельная скорость роста, которая зависит от концентрации питательных веществ. Выражение для удельной скорости роста приписывается Monod [57] или Michaelis и Menten [56] и имеет вид

$$\mu = \frac{\mu_m s}{K_s + s} \quad (1.8)$$

где s – концентрация лимитирующего вещества; K_s – константа полунасыщения, которая определяется индивидуально для каждого вида организмов.

При математическом моделировании нужно разделять процесс поглощения питательных веществ и процесс увеличения биомассы. Прежде чем использоваться для роста, питательные вещества запасаются в клетках, что необходимо учитывать при моделировании. Droop [26,28] утверждает, что реакции ферментов внутри

клетки зависят от концентрации питательных веществ в ней, а не от внешней концентрации, и что внутриклеточная концентрация влияет на скорость роста. Поскольку внутренняя концентрация зависит от предыдущей истории развития клетки, необходимо смоделировать ее отдельно. Такая альтернативная модель называется моделью клеточной квоты и была предложена Droop [25,27]. Эта модель пытается объяснить тот факт, что организмы могут накапливать питательные вещества до использования их в формировании биомассы. Азот может храниться внутри клеток в виде нитратов, ионов аммония или низкомолекулярных органических молекул для дальнейшего использования. Синезеленые водоросли могут накапливать азот в гранулах цианофитина [77]. Большинство водорослей могут хранить фосфор в гранулах полифосфата.

В модели на основе концепции «клеточной квоты» скорость роста имеет вид

$$\frac{\mu}{\mu'_m} = 1 - \frac{k_Q}{Q} \quad \text{или} \quad \mu = \mu'_m \left(\frac{Q - k_Q}{Q} \right), \quad (1.9)$$

где Q – масса внутреннего питательного вещества на единицу биомассы; параметр k_Q называется «прожиточной квотой», и когда он равен Q , удельная скорость роста равна нулю; μ'_m – максимальная удельная скорость роста.

Модель Droop используется многими авторами [18]. Davidson [14] утверждает, что модель клеточной квоты обычно используется для предсказания развития планктона в ограниченных питательным веществом условиях. Также эта модель была поддержана Nyholm [60] и Sommer [76], но также подвергалась критике [39].

1.4. Влияние концентраций солености и температуры на развитие фитопланктонных популяций

Температура – один из самых важных внешних экологических факторов, влияющих на скорость роста фитопланктона.

Erpley [31] представил формулу зависимости максимального темпа роста от температуры

$$r_p = 0.6(1.066)^T \quad (1.10)$$

где T – температура в °С.

Также использовалась достаточно общая форма функции температуры, которая называется уравнением Van't Hoff [8] и имеет вид

$$k = k_1(\theta)^{(T-20)} \quad (1.11)$$

где T – это температура в °С; k_1 – справочная константа для 20 °С; θ - константа, определяемая экспериментально, обычно порядка 1.01-1.2, с основным значением 1.066, определенным Eppley.

Экологи часто используют символ Q_{10} для обозначения относительного роста параметра k при росте температуры на 10°С

$$Q_{10} = \frac{k(T+10)}{k(T)}. \quad (1.12)$$

Скорость многих биологических процессов изменяется приблизительно вдвое с изменением температуры на 10°С. Для уравнения Eppley (1.10) Q_{10} принимает значение 1.89.

Оптимальная температура, при которой темпы роста максимальны, для флагеллат, например, 25°С, для диатомовых водорослей - 30°С и 37°С - для зеленых. Cerco [9] указывает, что хорошее приближение может быть получено при использовании трехпараметрического уравнения

$$\left(f(T) = e^{-k_1(T-T_{opt})^2} \right) \quad T < T_{opt}, \quad (1.13)$$

$$\left(f(T) = e^{-k_2(T-T_{opt})^2} \right) \quad T > T_{opt}. \quad (1.14)$$

Ahlgren [111] в детальном исследовании зеленой водоросли *Scenedesmus quadricauda* сравнила различные формулы для зависимостей от температуры и от питательных веществ. Ahlgren нашла, что температурная зависимость в форме Belehradек [118]

$$r_p = a(T - \alpha)^b, \quad (1.15)$$

где a , b и α – константы, соответствующие натурным данным, наиболее совпадает с полученными им результатами.

Ahlgren также провела серию тестов в инкубаторе и продемонстрировала достаточно разные зависимости темпов роста от температуры у диатомовых, синезеленых и зеленых водорослей.

Arrhenius в своей работе [2] отмечал, что скорость протекания многих биологических процессов сильно зависит от температуры. Эта зависимость имеет форму

$$q_{t_0} = q_{t_1} \cdot e^{\frac{A(T_1 - T_0)}{T_0 T_1}}, \quad (1.16)$$

где q_{t_0} и q_{t_1} - скорости реакции при температурах T_0 и T_1 ; A – константа; T_0 и T_1 - абсолютные температуры.

Азовское море расположено на юго-западе России и характеризуется значительной сезонной и пространственной изменчивостью температурных режимов [103]. Азовское море обладает рядом специфических черт: оно является переходным водоемом между пресными речными водами и солеными морскими, поэтому для него характерны большие перепады солености, это мелководный водоем, с сильно изрезанными берегами. Однако в летний период колебания температур по всей акватории Азовского моря незначительны (не превышают 4°C).

В основном поверхность Азовского моря нагревается от солнечной радиации. Полученная энергия уходит на испарение, на эффективное излучение и на теплообмен с атмосферой. Тепловое влияние стоков рек Дона и Кубани, а также водообмена с Черным морем, является незначительным.

Соленость также является важнейшим абиотическим фактором, влияющим на состояние экосистемы моря. Азовское море является солоноватоводным, режим солености определяется смешением пресных речных и соленых черноморских вод [103]. В северо-восточной части моря соленость мала (0-3 ‰) и определяется стоком реки Дон, а в южной части соленость (12-15 ‰) определяется влиянием черноморских вод.

1.5. Обзор моделей, описывающих химико-биологические процессы в водных системах

Существует много работ, связанных с моделированием и развитием экосистем. Gentleman в 2002 г. опубликовал обзор научных трудов по моделированию морских систем, написанных Fleming в 1939 г. [33] и Riley [71] в конце 40-х гг. XX века. По сравнению с современными моделями модели, описанные в работе Gentleman, кажутся довольно примитивными.

Для описания математических моделей экосистем зачастую используются системы нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений, где неизвестными функциями являются компоненты экосистемы – концентрации биогенных веществ, фито- и зоопланктона, биомасса водорослей и т.д.

Рост биомассы зеленых водорослей в водных системах ограничен концентрациями питательных веществ, температурой, светом. Потеря биомассы происходит в результате дыхания, лизиса с последующей минерализацией и поглощения водорослей в процессе питания. В случае, когда рост организмов не ограничен количеством питательных веществ (или светом), наблюдается картина неограниченного роста популяции. Тут на первый план выходит понятие лимитирующего питательного вещества, при достаточном количестве которого живые организмы хорошо развиваются, а затем, когда запасы питательного вещества истощаются, наступает спад роста. Многие модели построены на идее, что лимитирующее питательное вещество – это один или несколько элементов, находящийся в недостатке по отношению к другим элементам, входящим в стехиометрическое соотношение Redfield [68].

Далее будут рассмотрены модели скорости роста фитопланктона в зависимости от количества питательных веществ. Проследим динамику простых моделей экосистем, не включающих описание физических процессы транспорта веществ. Первая из таких моделей – NP модель – описывает рост фитопланктона при наличии одного лимитирующего вещества.

Как было сказано выше, вещества, находящиеся в окружающей среде в недостатке для роста и развития живых организмов, называются лимитирующими.

Множество исследований было посвящено выявлению соотношений питательных веществ в живой биомассе. Одним из самых известных является соотношение Redfield, согласно которому углерод, азот и фосфор в океаническом фитопланктоне находятся в соотношении 42:7:1 в весовом эквиваленте. Если питательные вещества в экосистеме находятся не в таком соотношении, то при отсутствии ограничения роста другими веществами биоген, который не соответствует соотношению Redfield, будет лимитирующим. На основании этого в большинстве моделей экосистем лимитирующими элементами предполагаются азот или фосфор, а если в модель входят диатомовые водоросли, то и кремний.

При моделировании динамики питательных веществ инженеры-экологи, как правило, фокусируются на внешних источниках питательных или загрязняющих веществ, которые подлежат контролю и управлению. Однако внутри системы происходит круговорот веществ как в толще воды, так и между донными отложениями, толщей воды и атмосферой. Так, например, азот может поступать не со стоками рек, а быть поглощен цианобактериями из атмосферы.

В некоторых математических моделях учитывается тот факт, что автотрофные организмы способны запасать питательные вещества в клетках и использовать их в случае недостатка необходимых веществ во внешней среде [13,25,41,52]. Однако в большинстве моделей рассматривается только случай поглощения биогенных веществ извне. В своей работе [18] DeAngelis сравнивает два подхода к моделированию и делает вывод, что нет никаких существенных различий в точности прогнозов между моделированием на основе концепции «клеточной квоты» и без учета этого процесса накопления клетками питательных веществ.

Самая простая модель «фитопланктон - питательное вещество» (NP) основана на обыкновенных дифференциальных уравнениях первого порядка и имеет вид

$$\frac{dP}{dt} = r_p k(N)P - (\text{loss_rate})P, \quad (1.17)$$

$$\frac{dN}{dt} = I_n - \gamma r_p k(N)P, \quad (1.18)$$

где P – концентрация фитопланктона; N – концентрация питательного вещества; r_p – максимальная удельная скорость роста, возможная при оптимальной концентрации необходимых веществ и зависящая также от температуры и от количества света; I_n – источник питательных веществ; $k(N)$ – уменьшающий фактор при недостаточном количестве веществ; $loss_rate$ – коэффициент смертности фитопланктона; γ – коэффициент массы питательных веществ на единицу массы фитопланктона – использовано простое соотношение Redfield [68].

Важно обращать внимание на баланс массы. В этой простой модели при условии равновесия левые стороны равны нулю. Так как уравнения имеют разные единицы, то они не могут быть суммированы, однако если уравнение (1.17) умножить на γ , то его единицей измерения становится концентрация питательных веществ, т.е. как и во втором. Тогда эти уравнения могут быть сложены, приводя к условию равновесия

$$I_n = \gamma (loss_rate)P, \quad (1.19)$$

которое интуитивно понятно: количество питательных веществ, потребленных фитопланктоном из системы, равно количеству веществ, возвращенных в нее.

Питательные вещества

В 1949 г. Monod [58] описал ограничивающие рост бактерий процессы, основанные на функции Michaelis-Menten для кинетики ферментов. Он использовал следующую математическую формулу

$$k(N) = \frac{N}{k_{1/2} + N}. \quad (1.20)$$

Здесь $k(N)$ – безразмерный коэффициент, описывающий концентрацию питательных веществ N , $k_{1/2}$ – коэффициент полунасыщения, т.е. это концентрация питательных веществ, при которой удельная скорость роста равна половине максимальной. Отметим, что когда концентрация N значительно больше коэффициента $k_{1/2}$, коэффициент $k(N)$ стремится к единице. Эта форма

отношения, описывающего концентрацию питательных веществ, использовалась в моделях динамики фитопланктона с 60-х гг. XX века, и по сей день это самый широко применяемый метод.

При построении модели трансформации форм фосфора, азота и кремния коэффициенты, описывающие содержание биогенов, имеют вид (1.20).

Простая PN модель, ограниченная отношением Monod (1.20), принимает вид

$$\frac{dP}{dt} = r_{P_{\max}} \frac{N}{k_{1/2} + N} P - (loss_rate)P, \quad (1.21)$$

$$\frac{dN}{dt} = I_n - \gamma r_{P_{\max}} \frac{N}{k_{1/2} + N} P, \quad (1.22)$$

где $r_{P_{\max}}$ - максимальная удельная скорость роста для питательного вещества N .

Если ограничивающим является более чем одно вещество, то существует несколько альтернативных соотношений. Например, используется отношение:

$$k(N_1, N_2) = \frac{N_1}{k_{1/2,1} + N_1} \cdot \frac{N_2}{k_{1/2,2} + N_2}. \quad (1.23)$$

Это отношение используется в работах O'Connor, Thomann и DiToro [62].

Широко используется «закон минимума» Liebig, согласно которому скорость роста фитопланктона определяет то вещество, которого недостает больше, чем других. Тогда выражение принимает форму

$$k(N_1, N_2) = \min \left[\frac{N_1}{k_{1/2,1} + N_1}; \frac{N_2}{k_{1/2,2} + N_2} \right]. \quad (1.24)$$

С учетом закона Либиха и ограничения Monod модель NNP принимает вид

$$\frac{dP}{dt} = r_{P_{\max}} k(N_1, N_2) P - (loss_rate)P, \quad (1.25)$$

$$\frac{dN_1}{dt} = I_{n1} - \gamma_1 r_{P_{\max}} k(N_1, N_2) P, \quad (1.26)$$

$$\frac{dN_2}{dt} = I_{n2} - \gamma_2 r_{P_{\max}} k(N_1, N_2) P, \quad (1.27)$$

где $r_{p_{\max}}$ - максимальная скорость роста, зависящая от света и температуры, без ограничения питательными веществами, индексы 1 и 2 использованы, чтобы различать питательные вещества.

Другой метод для описания ограничения скорости роста при лимитировании несколькими питательными веществами описаны De Groot [17], O'Neill и др. [63], Bowie [67] и Jorgensen [46]. Сравнение этого метода с лабораторными данными Droop [27,28] привели O'Neill и др. к заключению, что соотношение в форме (1.28) обеспечивает лучшее соответствие данным.

$$k(N_1, N_2) = \frac{N_1 N_2}{k_{1/2,1} N_1 + N_1 N_2 + k_{1/2,2} N_2}. \quad (1.28)$$

Уравнение (1.21) не используется широко в моделировании. Выбор делается на основе подробного изучения моделируемой экосистемы. Reynolds [69] и DeAngelis [19] в своих работах рассмотрели значительные различия в применении рассмотренных соотношений к моделированию поведения разных видов.

Ниже приведен пример мультипликативной формы выражения для удельной скорости роста, использованной в моделях, разработанных работами O'Connor, Thomann и DiToro и др. [21,22,87]

$$G_p = K_1(T) \cdot R \cdot \frac{C4 + C5}{KMN + C4 + C5} \cdot \frac{C7}{KMP + C7}. \quad (1.29)$$

Здесь первый множитель – это максимальная скорость роста, зависящая от температуры. $C4$ и $C5$ – концентрации аммиака и нитрата соответственно, $C7$ – концентрация ортофосфата (PO_4), KMN – константа полунасыщения для азота, KMP – константа полунасыщения для фосфора, R – коэффициент уменьшения скорости роста при недостатке света.

Когда в модели рассматриваются несколько форм одного элемента, например, азот в формах аммония, нитритов и нитратов, то должны быть установлены соответствия между видами водорослей и формами элемента. McCarthy и др. [55] писал в исследовании фитопланктона в Чесапикском заливе, что при превышении концентрации NH_4^+ значения 0,5-1 мг/литр потребление NO_3^-

практически полностью прекращается. Flynn, Fasham и Hirkin [34,35] в своих работах моделировали ситуации с различным потреблением аммония и нитратов.

Якушевым Е.В. и др. авторами [98,99] составлены модели трансформации фосфора, азота и кислорода в Балтийском и Черном морях.

Рассмотренные модели, как правило, одномерные, некоторые из них не учитывают вертикальную диффузию. Зачастую при моделировании гидробиологических процессов в водоемах получаются простые аналитические решения стационарных задач, мало подходящих для описания реальных биогеохимических процессов.

1.6. Построение 3D модели биохимической трансформации форм фосфора, азота и кремния

Модель биогеохимических циклов основана на системе нестационарных уравнений конвекции-диффузии-реакции параболического типа с нелинейными функциями источников и младшими производными, вид которых для каждого модельного блока F_i имеет вид [124]

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} + u \frac{\partial q_i}{\partial x} + v \frac{\partial q_i}{\partial y} + w \frac{\partial q_i}{\partial z} = \text{div}(k \text{ grad } q_i) + R_{q_i}, \quad (1.30)$$

где q_i - концентрация i -ой компоненты, [мг/л]; $i \in M$, $M = \{F_1, F_2, F_3, PO_4, POP, DOP, NO_3, NO_2, NH_4, Si\}$; $\{u, v, w\}$ - компоненты вектора скорости водного потока, [м/с]; k - коэффициент турбулентного обмена, [м²/с]; R_{q_i} - функция-источник биогенных веществ, [мг/(л·с)].

В уравнении (1) индекс i указывает на вид субстанции (таблица 1.3).

Химико-биологические источники описаны следующими уравнениями ($i \in \{1, 2, 3\}$, где 1 – это ChV , 2 - $AF - A$, 3 - Sc , а ChV , $AF - A$, Sc - символические обозначения видов планктона)

$$R_{F_i} = C_{F_i} (1 - K_{F_i R}) q_{F_i} - K_{F_i D} q_{F_i} - K_{F_i E} q_{F_i}, \quad i = \overline{1, 3},$$

$$R_{POP} = \sum_{i=1}^3 s_P K_{F_i D} q_{F_i} - K_{PD} q_{POP} - K_{PN} q_{POP},$$

Таблица 1.3 – Биогенные вещества в модели динамики фитопланктона

Номер	Обозначение	Название
1.	F_1	зеленая водоросль <i>Chlorella vulgaris</i>
2.	F_2	синезеленая водоросль <i>Aphanizomenon flos-aquae</i>
3.	F_3	диатомовая водоросль <i>Skeletonema costatum</i>
4.	PO_4	фосфаты
5.	POP	взвешенный органический фосфор
6.	DOP	растворенный органический фосфор
7.	NO_3	нитраты
8.	NO_2	нитриты
9.	NH_4	аммоний
10.	Si	растворенный неорганический кремний (кремниевые кислоты)

$$R_{DOP} = \sum_{i=1}^3 s_P K_{F_i E} q_{F_i} + K_{PD} q_{POP} - K_{DN} q_{DOP},$$

$$R_{PO_4} = \sum_{i=1}^3 s_P C_{F_i} (K_{F_i R} - 1) q_{F_i} + K_{PN} q_{POP} + K_{DN} q_{DOP},$$

$$R_{NH_4} = \sum_{i=1}^3 s_N C_{F_i} (K_{F_i R} - 1) \frac{f_N^{(2)}(q_{NH_4})}{f_N(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4})} q_{F_i} + \sum_{i=1}^3 s_N (K_{F_i D} + K_{F_i E}) q_{F_i} - K_{42} q_{NH_4},$$

$$R_{NO_2} = \sum_{i=1}^3 s_N C_{F_i} (K_{F_i R} - 1) \frac{f_N^{(1)}(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4})}{f_N(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4})} \cdot \frac{q_{NO_2}}{q_{NO_2} + q_{NO_3}} q_{F_i} + K_{42} q_{NH_4} - K_{23} q_{NO_2},$$

$$R_{NO_3} = \sum_{i=1}^3 s_N C_{F_i} (K_{F_i R} - 1) \frac{f_N^{(1)}(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4})}{f_N(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4})} \cdot \frac{q_{NO_3}}{q_{NO_2} + q_{NO_3}} q_{F_i} + K_{23} q_{NO_2},$$

$$R_{Si} = s_{Si} C_{F_3} (K_{F_3 R} - 1) q_{F_3} + s_{Si} K_{F_3 D} q_{F_3}.$$

Здесь $K_{F_i R}$ - удельная скорость дыхания фитопланктона; $K_{F_i D}$ - удельная скорость отмирания фитопланктона; $K_{F_i E}$ - удельная скорость экскреции фитопланктона; K_{PD} - удельная скорость автолиза POP; K_{PN} - коэффициент фосфатофикации POP; K_{DN} - коэффициент фосфатофикации DOP; K_{42} - удельная скорость окисления аммония до нитритов в процессе нитрификации; K_{23} - удельная скорость окисления нитритов до нитратов в процессе нитрификации; s_P , s_N , s_{Si} - нормировочные коэффициенты между содержанием N, P, Si в органическом веществе [97].

Скорость роста фитопланктона определяется выражениями

$$C_{F_{1,2}} = K_{NF_{1,2}} f_T(T) f_S(S) \min \left\{ f_P(q_{PO_4}), f_N(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4}) \right\},$$

$$C_{F_3} = K_{NF_3} f_T(T) f_S(S) \min \left\{ f_P(q_{PO_4}), f_N(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4}), f_{Si}(q_{Si}) \right\},$$

где K_{NF} - максимальная удельная скорость роста фитопланктона.

Зависимости температуры и солености

$$f_T(T) = \exp \left(-\alpha \left(\frac{T - T_{opt}}{T_{opt}} \right)^2 \right),$$

где T_{opt} - температура, оптимальная для данного вида фитопланктона; $\alpha > 0$ - коэффициент ширины интервала толерантности фитопланктона к температуре;

$$f_S(S) = \exp \left(-\beta \left(\frac{S - S_{opt}}{S_{opt}} \right)^2 \right),$$

где S_{opt} - соленость, оптимальная для данного вида фитопланктона; $\beta > 0$ - коэффициент ширины интервала толерантности фитопланктона к солености.

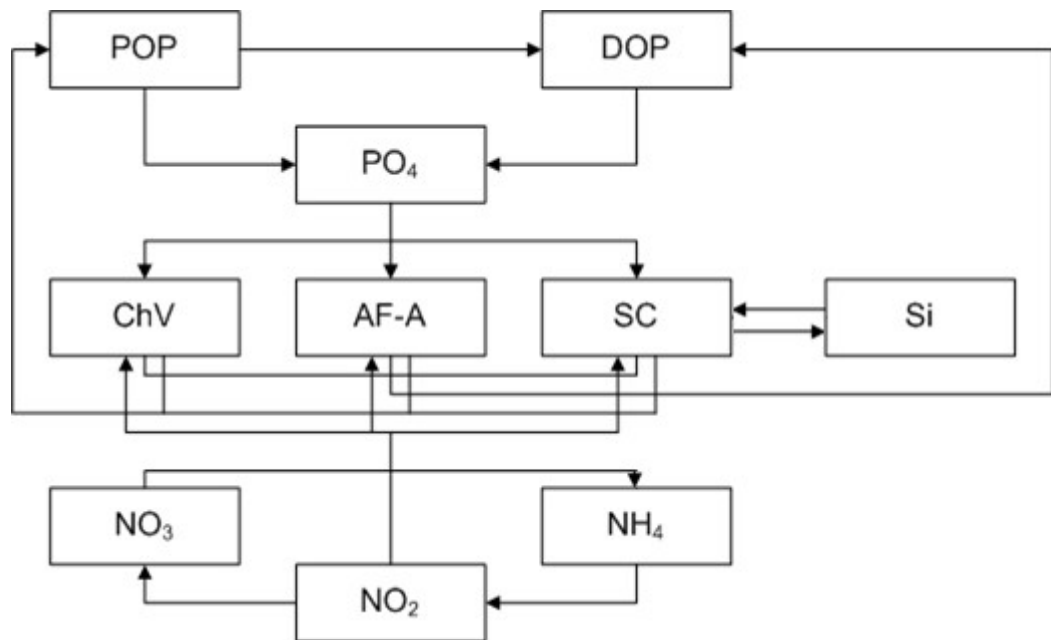


Рисунок 1.8 – Модельная схема биогеохимической трансформации форм фосфора, азота и кремния

Зависимости содержания биогенов

$$- \text{ для фосфора } f_P(q_{PO_4}) = \frac{q_{PO_4}}{q_{PO_4} + K_{PO_4}},$$

где K_{PO_4} - константа полунасыщения фосфатами;

$$- \text{ для кремния } f_{Si}(q_{Si}) = \frac{q_{Si}}{q_{Si} + K_{Si}},$$

где K_{Si} - константа полунасыщения кремнием;

$$- \text{ для азота } f_N(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4}) = f_N^{(1)}(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4}) + f_N^{(2)}(q_{NH_4}),$$

$$f_N^{(1)}(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4}) = \frac{(q_{NO_3} + q_{NO_2}) \exp(-K_{psi} q_{NH_4})}{K_{NO_3} + (q_{NO_3} + q_{NO_2})}, \quad f_N^{(2)}(q_{NH_4}) = \frac{q_{NH_4}}{K_{NH_4} + q_{NH_4}},$$

где K_{NO_3} - константа полунасыщения нитратами; K_{NH_4} - константа полунасыщения аммонием; K_{psi} - коэффициент ингибирования аммония.

Будем предполагать, что коэффициенты, входящие в выражения для функций источников, положительны и не зависят от времени t .

Для системы (1.30) ставится начально-краевая задача в цилиндрической области G . Будем считать, что граница Σ цилиндрической области G является кусочно-гладкой поверхностью и $\Sigma = \Sigma_H \cup \Sigma_o \cup \sigma$, где Σ_H - поверхность дна водоема, Σ_o - невозмущенная поверхность водной среды, σ - боковая (цилиндрическая) поверхность. Пусть u_n - нормальная по отношению к Σ составляющая вектора скорости водного потока, \mathbf{n} - вектор внешней нормали к Σ .

. Для концентраций q_i будем предполагать

на боковой границе

$$- q_i = 0, \text{ на } \sigma, \text{ если } u_n < 0, i \in M; \quad (1.31)$$

$$- \frac{\partial q_i}{\partial n} = 0, \text{ на } \sigma, \text{ если } u_n \geq 0, i \in M; \quad (1.32)$$

$$- \frac{\partial q_i}{\partial z} = 0, \text{ на } \Sigma_o - \text{ поверхность водоема, } i \in M; \quad (1.33)$$

$$-\frac{\partial q_i}{\partial z} = \varepsilon_{1,i} q_i, \quad i \in \{F_1, F_2, F_3\}, \quad \frac{\partial q_i}{\partial z} = \varepsilon_{2,i} q_i,$$

$$i \in \{PO_4, POP, DOP, NO_3, NO_2, NH_4, Si\} \text{ на дне } \Sigma_H, \quad (1.34)$$

где $\varepsilon_{1,i}, \varepsilon_{2,i}$ - неотрицательные постоянные; $\varepsilon_{1,i}, i \in \{F_1, F_2, F_3\}$ учитывают опускание водорослей на дно и их затопление; $\varepsilon_{2,i}, i \in \{PO_4, POP, DOP, NO_3, NO_2, NH_4, Si\}$ учитывают поглощение питательных веществ донными отложениями.

Для системы уравнений необходимо в любой момент времени задавать вектор скоростей водного потока, поле солености и температуры, а также начальные значения функций q_i

$$q_i(x, y, z, 0) = q_{0i}(x, y, z), \quad (x, y, z) \in \bar{G}, \quad t = 0, \quad i \in M, \quad (1.35)$$

$$\mathbf{V}(x, y, z, 0) = \mathbf{V}_0(x, y, z), \quad T(x, y, z, 0) = T_0(x, y, z), \quad S(x, y, z, 0) = S_0(x, y, z).$$

1.7. Исследование модели трансформации форм фосфора, азота и кремния в задаче динамики фитопланктона

Для того чтобы получить достаточные условия существования единственного решения поставленной задачи [124], сделаем дополнительные предположения о периодичности процесса, т.е.

$$q_i(x, y, z, t) = q_i(x, y, z, t + T), \quad (1.36)$$

где $T > 0$ - период. Введем на поверхности Σ области G функции

$$u_n^+ = \begin{cases} u_n, & u_n \geq 0; \\ 0, & u_n < 0; \end{cases} \quad \text{и } u_n^- = u_n - u_n^+. \quad (1.37)$$

Выполним линеаризацию функций правых частей в интервале $0 < t < T$ на равномерной временной сетке $\omega_\tau = \{t_n = n\tau, n = 0, 1, \dots, N; N\tau = T\}$.

Функции $q_i^n(x, y, z, t_{n-1})$ определим на каждом шагу временной сетки ω_τ . Если $n = 1$, то $q_i^1(x, y, z, t_0)$ и достаточно взять функции начальных условий $q_i^1(x, y, z, 0) \equiv q_{0i}(x, y, z)$. При $n = 2, \dots, N$ функции $q_i^n(x, y, z, t_{n-1}) = q_i^{n-1}(x, y, z, t_{n-1})$

предполагаются известными, т.к. задача (1.30)-(1.35) на предыдущем временном интервале $t_{n-2} < t \leq t_{n-1}$ предполагается решенной.

Вместо уравнения (1.30) на временном промежутке $t_{n-1} < t < t_n$ рассмотрим цепочку уравнений вида

$$\frac{\partial q_i^n}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{U}, q_i^n) = \text{div}(k \text{ grad } q_i^n) + R_{q_i}^{n-1}(q_i^n), \quad t_n - \tau < t \leq t_n,$$

где

$$R_{F_i}^{n-1}(q_{F_i}^n) = C_{F_i}^{n-1}(1 - K_{F_iR})q_{F_i}^n - K_{F_iD}q_{F_i}^n - K_{F_iE}q_{F_i}^n, \quad i = 1, 2, 3,$$

$$R_{POP}^{n-1}(q_{POP}^n) = \sum_{i=1}^3 s_P K_{F_iD} q_{F_i}^{n-1} - K_{PD} q_{POP}^n - K_{PN} q_{POP}^n,$$

$$R_{DOP}^{n-1}(q_{DOP}^n) = \sum_{i=1}^3 s_P K_{F_iE} q_{F_i}^{n-1} + K_{PD} q_{POP}^{n-1} - K_{DN} q_{DOP}^n,$$

$$R_{PO_4}^{n-1}(q_{PO_4}^n) = \sum_{i=1}^3 s_P C_{F_i}^{n-1} (K_{F_iR} - 1) q_{F_i}^{n-1} + K_{PN} q_{POP}^{n-1} + K_{DN} q_{DOP}^{n-1},$$

$$R_{NH_4}^{n-1}(q_{NH_4}^n) = \sum_{i=1}^3 \frac{s_N C_{F_i}^{n-1} (K_{F_iR} - 1) q_{F_i}^{n-1}}{\frac{(K_{NH_4} + q_{NH_4}^{n-1})(q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1}) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1})}{K_{NO_3} + (q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1})} + q_{NH_4}^{n-1}} \cdot q_{NH_4}^n - K_{42} q_{NH_4}^n,$$

$$R_{NO_3}^{n-1}(q_{NO_3}^n) = \sum_{i=1}^3 \frac{s_N C_{F_i}^{n-1} (K_{F_iR} - 1) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) q_{F_i}^{n-1}}{(q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1}) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) + \frac{q_{NH_4}^{n-1} (K_{NO_3} + q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1})}{K_{NH_4} + q_{NH_4}^{n-1}}} \cdot q_{NO_3}^n +$$

$$+ K_{23} q_{NO_2}^{n-1},$$

$$R_{NO_2}^{n-1}(q_{NO_2}^n) = \sum_{i=1}^3 \frac{s_N C_{F_i}^{n-1} (K_{F_iR} - 1) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) q_{F_i}^{n-1}}{(q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1}) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) + \frac{q_{NH_4}^{n-1} (K_{NO_3} + q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1})}{K_{NH_4} + q_{NH_4}^{n-1}}} \cdot q_{NO_2}^n +$$

$$+ K_{42} q_{NH_4}^{n-1} - K_{23} q_{NO_2}^n,$$

$$R_{Si}^{n-1}(q_{Si}^n) = s_{Si} C_{F_3}^{n-1} (K_{F_3R} - 1) q_{F_3}^{n-1} + s_{Si} K_{F_3D} q_{F_3}^{n-1}.$$

Присоединим начальные условия

$$q_i^1(x, y, z, t_0) \equiv q_{0i}(x, y, z), \quad (x, y, z) \in \bar{G}, \quad i \in M - \text{в начальный момент времени;}$$

$q_i^n(x, y, z, t_{n-1}) = q_i^{n-1}(x, y, z, t_{n-1})$, $(x, y, z) \in \bar{G}$, $n=2, \dots, N$, $i \in M$ – для каждого временного слоя.

Разделим функции источника на два слагаемых: $R_{q_i} = p_i(q_j) \cdot q_i + \tilde{R}_{q_i}$, $j \neq i$, т.е. слагаемое $p_i(q_j) \cdot q_i$ линейно относительно q_i , а \tilde{R}_{q_i} – нелинейно. Тогда коэффициенты линейных относительно q_i слагаемых в функциях правых частей будут выглядеть следующим образом

$$p_{F_i}^{n-1} = C_{F_i}^{n-1} (1 - K_{F_iR}) - K_{F_iD} - K_{F_iE},$$

$$p_{POP}^{n-1} = -K_{PD} - K_{PN},$$

$$p_{DOP}^{n-1} = -K_{DN},$$

$$p_{PO_4}^{n-1} = 0,$$

$$p_{NH_4}^{n-1} = \sum_{i=1}^3 \frac{s_N C_{F_i}^{n-1} (K_{F_iR} - 1) q_{F_i}^{n-1}}{\frac{(K_{NH_4} + q_{NH_4}^{n-1})(q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1}) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1})}{K_{NO_3} + (q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1})} + q_{NH_4}^{n-1}} - K_{42},$$

$$p_{NO_2}^{n-1} = \sum_{i=1}^3 \frac{s_N C_{F_i}^{n-1} (K_{F_iR} - 1) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) q_{F_i}^{n-1}}{(q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1}) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) + \frac{q_{NH_4}^{n-1} (K_{NO_3} + q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1})}{K_{NH_4} + q_{NH_4}^{n-1}}} - K_{23},$$

$$p_{NO_3}^{n-1} = \sum_{i=1}^3 \frac{s_N C_{F_i}^{n-1} (K_{F_iR} - 1) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) q_{F_i}^{n-1}}{(q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1}) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) + \frac{q_{NH_4}^{n-1} (K_{NO_3} + q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1})}{K_{NH_4} + q_{NH_4}^{n-1}}},$$

$$p_{Si}^{n-1} = 0,$$

а нелинейные слагаемые будут иметь вид

$$\tilde{R}_{F_i}^{n-1} = 0,$$

$$\tilde{R}_{POP}^{n-1} = \sum_{i=1}^3 s_P K_{F_iD} q_{F_i}^{n-1},$$

$$\tilde{R}_{DOP}^{n-1} = \sum_{i=1}^3 s_P K_{F_iE} q_{F_i}^{n-1} + K_{PD} q_{POP}^{n-1},$$

$$\tilde{R}_{PO_4}^{n-1} = \sum_{i=1}^3 s_P C_{F_i} (K_{F_i R} - 1) q_{F_i}^{n-1} + K_{PN} q_{POP}^{n-1} + K_{DN} q_{DOP}^{n-1},$$

$$\tilde{R}_{NH_4}^{n-1} = 0,$$

$$\tilde{R}_{NO_2}^{n-1} = K_{42} q_{NH_4}^{n-1},$$

$$\tilde{R}_{NO_3}^{n-1} = K_{23} q_{NO_2}^{n-1},$$

$$\tilde{R}_{Si}^{n-1} = s_{Si} C_{F_3}^{n-1} (K_{F_3 R} - 1) q_{F_3}^{n-1} + s_{Si} K_{F_3 D} q_{F_3}^{n-1}.$$

Введем операторы C и D , которые действуют следующим образом

$$Cq_i = \frac{\partial q_i}{\partial t} + u \frac{\partial q_i}{\partial x} + v \frac{\partial q_i}{\partial y} + w \frac{\partial q_i}{\partial z} = \frac{\partial q_i}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{U}q_i) \quad (1.38)$$

$$Dq_i = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_h \frac{\partial q_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_h \frac{\partial q_i}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_v \frac{\partial q_i}{\partial z} \right) = \text{div}(k \text{grad } q_i) \quad (1.39)$$

где $\mathbf{U} = \{u, v, w\}$.

Тогда исходная система переписывается в виде

$$Cq_i^n - Dq_i^n - p_{q_i}^{n-1} q_i^n = \tilde{R}_{q_i}^{n-1}, \quad i \in M. \quad (1.40)$$

Введем оператор L , действующий следующим образом

$$Lq_i^n = Cq_i^n - Dq_i^n - p_{q_i}^{n-1} q_i^n.$$

Тогда система (1.30) примет вид

$$Lq_i^n = \tilde{R}_{q_i}^{n-1}, \quad i \in M. \quad (1.41)$$

Введем гильбертово пространство H со скалярным произведением векторов

$\mathbf{x} = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n\}$, $\mathbf{y} = \{\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n\}$, действующим по формуле

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \int_0^T dt \int_G \xi_1 \eta_1 dG + \int_0^T dt \int_G \xi_2 \eta_2 dG + \dots + \int_0^T dt \int_G \xi_n \eta_n dG, \quad (1.42)$$

где n равно количеству уравнений системы (1.30), т.е. $n = 10$.

Если $(L\mathbf{x}, \mathbf{x}) > 0$, $\mathbf{x} \in H$, то оператор L положительно определен [131], тогда существует обратный оператор L^{-1} , следовательно, решение системы уравнений (1.30)-(1.35) существует и единственно.

Найдем условия положительной определенности оператора L . Для этого найдем скалярное произведение $(L\mathbf{q}, \mathbf{q}) > 0$, где $\mathbf{q} = \{q_i\}$, $i \in M$, получим соответствующий квадратичный функционал

$$I = \sum_i \int_0^T dt \int_G \frac{1}{2} \frac{\partial (q_i^n)^2}{\partial t} dG + \sum_i \int_0^T dt \int_G q_i^n \operatorname{div}(\mathbf{U}, q_i^n) dG - \sum_i \int_0^T dt \int_G q_i^n \operatorname{div}(k \operatorname{grad} q_i^n) dG - \sum_i \left(\sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \int_G (q_i^n)^2 p_{q_i}^{n-1} dG \right). \quad (1.43)$$

В силу соотношений (1.36) имеем тождества

$$\int_0^T dt \int_G \frac{1}{2} \frac{\partial q_i^2}{\partial t} dG = \frac{1}{2} \int_G \left(\int_0^T \frac{\partial q_i^2}{\partial t} dt \right) dG = \frac{1}{2} \int_G (q_i^2(T) - q_i^2(0)) dG = 0 \quad (1.44)$$

Получим функционал

$$I = \sum_i \int_0^T dt \int_G q_i^n \operatorname{div}(\mathbf{U}, q_i^n) dG - \sum_i \int_0^T dt \int_G q_i^n \operatorname{div}(k \operatorname{grad} q_i^n) dG - \sum_i \left(\sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \int_G (q_i^n)^2 p_{q_i}^{n-1} dG \right). \quad (1.45)$$

Применяя теорему Остроградского-Гаусса, получаем равенства

$$\int_G q_i^n \operatorname{div}(\mathbf{U}, q_i) dG = \int_{\Sigma} \frac{u_n^+}{2} (q_i^n)^2 d\Sigma. \quad (1.46)$$

Преобразуем соотношение (1.45), используя формулу (1.46), придем к равенству

$$I = \sum_i \int_0^T dt \int_{\Sigma} \frac{u_n^+}{2} (q_i^n)^2 d\Sigma - \sum_i \int_0^T dt \int_G q_i^n \Delta q_i^n dG - \sum_i \int_0^T dt \int_G q_i^n \frac{\partial}{\partial z} \left(k_v \frac{\partial q_i^n}{\partial z} \right) dG - \sum_i \left(\sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \int_G (q_i^n)^2 p_{q_i}^{n-1} dG \right). \quad (1.47)$$

В соответствии с формулой Грина и с учетом граничных условий (1.31)-(1.34) получаем цепочку равенств

$$k_h \int_0^T dt \int_G q_i^n \left(\frac{\partial^2 q_i^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 q_i^n}{\partial y^2} \right) dG + \int_0^T dt \int_G q_i^n \frac{\partial}{\partial z} \left(k_v \frac{\partial q_i^n}{\partial z} \right) dG =$$

$$\begin{aligned}
&= -k_h \int_0^T dt \int_G q_i^n \left(\left(\frac{\partial q_i^n}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial q_i^n}{\partial y} \right)^2 \right) dG - \int_0^T dt \int_G k_v \left(\frac{\partial q_i^n}{\partial z} \right)^2 dG + \\
&+ k_h \int_0^T dt \int_{\Sigma} q_i^n \frac{\partial q_i^n}{\partial n} d\Sigma + \int_0^T dt \int_{\Sigma_H} k_v q_i^n \frac{\partial q_i^n}{\partial z} d\Sigma = \\
&= -k_h \int_0^T dt \int_G q_i^n \left(\left(\frac{\partial q_i^n}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial q_i^n}{\partial y} \right)^2 \right) dG - \int_0^T dt \int_G k_v \left(\frac{\partial q_i^n}{\partial z} \right)^2 dG - \int_0^T dt \int_{\Sigma_H} \varepsilon_j k_v (q_i^n)^2 d\Sigma, (1.48)
\end{aligned}$$

где $i \in M, j=1$, если $i \in \{F_1, F_2, F_3\}$, и $j=2$, если $i \in \{PO_4, POP, DOP, NO_3, NO_2, NH_4, Si\}$.

Принимая во внимание равенство (1.48), преобразуем выражение для квадратичного функционала (1.47)

$$\begin{aligned}
I &= \sum_i \int_0^T dt \int_{\Sigma} \frac{u_n^+}{2} (q_i^n)^2 d\Sigma + k_h \sum_i \int_0^T dt \int_G q_i^n \left(\left(\frac{\partial q_i^n}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial q_i^n}{\partial y} \right)^2 \right) dG + \\
&+ \sum_i \int_0^T dt \int_G k_v \left(\frac{\partial q_i^n}{\partial z} \right)^2 dG + \sum_i \int_0^T dt \int_{\Sigma_H} \varepsilon_j k_v (q_i^n)^2 d\Sigma - \sum_i \left(\sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \int_G (q_i^n)^2 p_{q_i}^{n-1} dG \right). (1.49)
\end{aligned}$$

Пусть H_x, H_y, H_z - максимальные размеры области G в направлении координатных осей Ox, Oy, Oz соответственно. Справедливы неравенства Пуанкаре [131]

$$\int_0^T dt \int_G k_v \left(\frac{\partial q_i^n}{\partial z} \right)^2 dG \geq \frac{4}{H_z^2} \int_0^T dt \int_G k_v^0 (q_i^n)^2 dG, \quad k_v^0 = \min_{G, 0 \leq t \leq T} \{k_v(x, y, z, t)\}, (1.50)$$

$$\int_0^T dt \int_G k_h \left(\left(\frac{\partial q_i^n}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial q_i^n}{\partial y} \right)^2 \right) dG \geq 4k_h \left(\frac{1}{H_x^2} + \frac{1}{H_y^2} \right) \int_0^T dt \int_G (q_i^n)^2 dG. \quad (1.51)$$

Заменим выражения в левой части функционала I в соответствии с приведенными выше неравенствами на не превосходящие их члены, построив, таким образом, функционал $\tilde{I}, I \geq \tilde{I}$.

$$\tilde{I} = \sum_i \int_0^T dt \int_{\Sigma} \frac{u_n^+}{2} (q_i^n)^2 d\Sigma + 4k_h \left(\frac{1}{H_x^2} + \frac{1}{H_y^2} \right) \sum_i \int_0^T dt \int_G (q_i^n)^2 dG +$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{4}{H_z^2} \sum_i \int_0^T dt \int_G k_v^0 (q_i^n)^2 dG + \sum_i \int_0^T dt \int_{\Sigma_H} \varepsilon_j k_v (q_i^n)^2 d\Sigma - \\
& - \sum_i \left(\sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \int_G (q_i^n)^2 p_{q_i}^{n-1} dG \right). \tag{1.52}
\end{aligned}$$

Представим преобразованные слагаемые в виде

$$4k_h \left(\frac{1}{H_x^2} + \frac{1}{H_y^2} \right) \int_0^T dt \int_G (q_i^n)^2 dG = 4k_h \left(\frac{1}{H_x^2} + \frac{1}{H_y^2} \right) \sum_{n=1}^N \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \int_G (q_i^n)^2 dG \right) \tag{1.53}$$

$$\frac{4}{H_z^2} \int_0^T dt \int_G k_v^0 (q_i^n)^2 dG = \frac{4}{H_z^2} \sum_{n=1}^N \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \int_G k_v^0 (q_i^n)^2 dG \right). \tag{1.54}$$

Соберем слагаемые, содержащие q_i^2 , $i \in M$

$$\sum_{n=1}^N \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\int_G \left(\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} - p_{q_i}^{n-1} \right) (q_i^n)^2 dG \right) dt \right). \tag{1.55}$$

Потребуем, чтобы слагаемые при $(q_i^n)^2$, $i \in M$ были положительными

$$\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} - p_{q_i}^{n-1} > 0. \tag{1.56}$$

Запишем полученные условия для каждой концентрации q_i , $i \in M$

$$\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} - C_{F_j}^{n-1} (1 - K_{F_j R}) + K_{F_j D} + K_{F_j E} > 0, \quad j \in \{ChV, AF - A, Sc\}, \tag{1.57}$$

$$\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} + K_{PD} + K_{PN} > 0, \tag{1.58}$$

$$\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} + K_{DN} > 0, \tag{1.59}$$

$$\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} -$$

$$-\sum_{i=1}^3 \frac{s_N C_{F_i}^{n-1} (K_{F_i R} - 1) q_{F_i}^{n-1}}{(K_{NH_4} + q_{NH_4}^{n-1})(q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1}) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1})} + K_{42} > 0, \quad (1.60)$$

$$K_{NO_3} + (q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1})$$

$$\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} -$$

$$-\sum_{i=1}^3 \frac{s_N C_{F_i}^{n-1} (K_{F_i R} - 1) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) q_{F_i}^{n-1}}{(q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1}) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) + \frac{q_{NH_4}^{n-1} (K_{NO_3} + q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1})}{K_{NH_4} + q_{NH_4}^{n-1}}} + K_{23} > 0, \quad (1.61)$$

$$\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} -$$

$$-\sum_{i=1}^3 \frac{s_N C_{F_i}^{n-1} (K_{F_i R} - 1) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) q_{F_i}^{n-1}}{(q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1}) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) + \frac{q_{NH_4}^{n-1} (K_{NO_3} + q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1})}{K_{NH_4} + q_{NH_4}^{n-1}}} > 0. \quad (1.62)$$

Коэффициенты K_{PD} , K_{PN} , K_{DN} , K_{42} , K_{23} положительны в силу их биологического смысла, поэтому существенными будут только условия (1.57), (1.60), (1.62). Запишем их подробнее

$$\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} + K_{F_1 D} + K_{F_1 E} > K_{NF_1} \max \left\{ f_P^{n-1}(q_{PO_4}), f_N^{n-1}(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4}) \right\} (1 - K_{F_1 R})$$

$$\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} + K_{F_2 D} + K_{F_2 E} > K_{NF_2} \max \left\{ f_P^n(q_{PO_4}), f_N^n(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4}) \right\} (1 - K_{F_2 R})$$

$$\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} + K_{F_3 D} + K_{F_3 E} >$$

$$> K_{NF_3} \max \left\{ f_P^{n-1}(q_{PO_4}), f_N^{n-1}(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4}), f_{Si}^{n-1}(q_{Si}) \right\} (1 - K_{F_3 R})$$

$$\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} + K_{42} > \sum_{i=1}^3 \frac{s_N C_{F_i}^{n-1} (K_{F_i R} - 1) q_{F_i}^{n-1}}{(K_{NH_4} + q_{NH_4}^{n-1})(q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1}) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1})} + q_{NH_4}^{n-1}$$

$$K_{NO_3} + (q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1})$$

$$\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} > \sum_{i=1}^3 \frac{s_N C_{F_i}^{n-1} (K_{F_i R} - 1) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) q_{F_i}^{n-1}}{(q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1}) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) + \frac{q_{NH_4}^{n-1} (K_{NO_3} + q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1})}{K_{NH_4} + q_{NH_4}^{n-1}}}.$$

Если полученные условия выполняются, то решение системы (1.30)-(1.35) существует и единственно для линейной правой части $R_{q_i}^{n-1}$ на каждом временном слое. Решение будет иметь вид

$$\mathbf{q}^n = (C - D - p_{q_i}^{n-1})^{-1} \cdot \widetilde{\mathbf{R}}_{q_i}^{n-1}.$$

На основании полученных выводов сформулируем теорему.

Теорема. Пусть поставлена начально-краевая задача для линеаризованной по правым частям системы уравнений вида

$$\frac{\partial q_i^n}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{U}, q_i^n) = \text{div}(k \text{grad } q_i^n) + R_{q_i}^{n-1}(q_i),$$

где

$$R_{F_i}^{n-1}(q_{F_i}^n) = C_{F_i}^{n-1} (1 - K_{F_i R}) q_{F_i}^n - K_{F_i D} q_{F_i}^n - K_{F_i E} q_{F_i}^n, \quad i = 1, 2, 3,$$

$$R_{POP}^{n-1}(q_{POP}^n) = \sum_{i=1}^3 s_P K_{F_i D} q_{F_i}^{n-1} - K_{PD} q_{POP}^n - K_{PN} q_{POP}^n,$$

$$R_{DOP}^{n-1}(q_{DOP}^n) = \sum_{i=1}^3 s_P K_{F_i E} q_{F_i}^{n-1} + K_{PD} q_{POP}^{n-1} - K_{DN} q_{DOP}^n,$$

$$R_{PO_4}^{n-1}(q_{PO_4}^n) = \sum_{i=1}^3 s_P C_{F_i}^{n-1} (K_{F_i R} - 1) q_{F_i}^{n-1} + K_{PN} q_{POP}^{n-1} + K_{DN} q_{DOP}^{n-1},$$

$$R_{NH_4}^{n-1}(q_{NH_4}^n) = \sum_{i=1}^3 \frac{s_N C_{F_i}^{n-1} (K_{F_i R} - 1) q_{F_i}^{n-1}}{\left(K_{NH_4} + q_{NH_4}^{n-1} \right) \left(q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1} \right) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) + q_{NH_4}^{n-1}} \cdot q_{NH_4}^n - K_{42} q_{NH_4}^n,$$

$$R_{NO_3}^{n-1}(q_{NO_3}^n) = \sum_{i=1}^3 \frac{s_N C_{F_i}^{n-1} (K_{F_i R} - 1) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) q_{F_i}^{n-1}}{\left(q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1} \right) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) + \frac{q_{NH_4}^{n-1} (K_{NO_3} + q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1})}{K_{NH_4} + q_{NH_4}^{n-1}}} \cdot q_{NO_3}^n +$$

$$+ K_{23} q_{NO_2}^{n-1},$$

$$R_{NO_2}^{n-1}(q_{NO_2}^n) = \sum_{i=1}^3 \frac{s_N C_{F_i}^{n-1} (K_{F_i R} - 1) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) q_{F_i}^{n-1}}{(q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1}) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) + \frac{q_{NH_4}^{n-1} (K_{NO_3} + q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1})}{K_{NH_4} + q_{NH_4}^{n-1}}} \cdot q_{NO_2}^n +$$

$$+ K_{42} q_{NH_4}^{n-1} - K_{23} q_{NO_2}^n,$$

$$R_{Si}^{n-1}(q_{Si}^n) = s_{Si} C_{F_3}^{n-1} (K_{F_3 R} - 1) q_{F_3}^{n-1} + s_{Si} K_{F_3 D} q_{F_3}^{n-1}.$$

с дополнительными условиями

– начальными

$$q_i^1(x, y, z, t_0) \equiv q_{0i}(x, y, z), (x, y, z) \in \bar{G}, i \in M - \text{в начальный момент времени;}$$

$$q_i^n(x, y, z, t_{n-1}) = q_i^{n-1}(x, y, z, t_{n-1}), (x, y, z) \in \bar{G}, n = 2, \dots, N, i \in M - \text{для каждого}$$

временного слоя.

– граничными

$$q_i = 0, \text{ на боковой поверхности, если } u_n \leq 0, i \in M;$$

$$\frac{\partial q_i}{\partial n} = 0, \text{ на боковой поверхности, если } u_n \geq 0, i \in M;$$

$$\frac{\partial q_i}{\partial z} = 0, \text{ на верхней поверхности, } i \in M;$$

$$\frac{\partial q_i}{\partial z} = \varepsilon_{1,i} q_i, i \in \{F_1, F_2, F_3\}, \frac{\partial q_i}{\partial z} = \varepsilon_{2,i} q_i, i \in \{PO_4, POP, DOP, NO_3, NO_2, NH_4, Si\}$$

на дне.

Пусть q_i принадлежат классу $C^2(G) \cap C^1(\bar{G}) \cap C^1(0 < t \leq T)$, $k_h(z), k_v(z) \in C^1(\bar{G})$, $R_{q_i}(x, y, z) \in C^1(\bar{G})$, граничная поверхность области Σ является кусочно-гладкой, и для каждого $n = \overline{1, N}$ выполняются неравенства

$$\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} + K_{F_1 D} + K_{F_1 E} > K_{NF_1} \max \left\{ f_P^{n-1}(q_{PO_4}), f_N^{n-1}(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4}) \right\} (1 - K_{F_1 R})$$

$$\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} + K_{F_2 D} + K_{F_2 E} > K_{NF_2} \max \left\{ f_P^{n-1}(q_{PO_4}), f_N^{n-1}(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4}) \right\} (1 - K_{F_2 R})$$

$$\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} + K_{F_3D} + K_{F_3E} >$$

$$> K_{NF_3} \max \left\{ f_P^{n-1}(q_{PO_4}), f_N^{n-1}(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4}), f_{Si}^{n-1}(q_{Si}) \right\} (1 - K_{F_3R})$$

$$\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} + K_{42} > \sum_{i=1}^3 \frac{s_N C_{F_i}^{n-1} (K_{F_iR} - 1) q_{F_i}^{n-1}}{\left(K_{NH_4} + q_{NH_4}^{n-1} \right) \left(q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1} \right) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1})} + q_{NH_4}^{n-1} \\ K_{NO_3} + \left(q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1} \right)$$

$$\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} > \sum_{i=1}^3 \frac{s_N C_{F_i}^{n-1} (K_{F_iR} - 1) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1}) q_{F_i}^{n-1}}{\left(q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1} \right) \exp(-K_{psi} q_{NH_4}^{n-1})} + \frac{q_{NH_4}^{n-1} \left(K_{NO_3} + q_{NO_3}^{n-1} + q_{NO_2}^{n-1} \right)}{K_{NH_4} + q_{NH_4}^{n-1}},$$

где $k_v^0 = \min_{\bar{G}, 0 \leq t \leq T} \{k_v(x, y, z, t)\}$.

Тогда решение поставленной задачи существует и единственно для $0 < t \leq t_1$ и $t_{n-1} \leq t \leq t_n$, $n = \overline{2, N}$.

1.8. Построение 3D модели гидродинамики мелководных водоемов с учетом транспорта тепла и солей

Исходными уравнениями гидродинамики мелководных водоемов [79] являются

– уравнение движения (Навье – Стокса)

$$u'_t + uu'_x + vv'_y + ww'_z = -\frac{1}{\rho} P'_x + (\mu u'_x)'_x + (\mu v'_y)'_y + (\mu w'_z)'_z + 2\Omega(v \sin \vartheta - w \cos \vartheta), \quad (1.63)$$

$$v'_t + uv'_x + vv'_y + ww'_z = -\frac{1}{\rho} P'_y + (\mu v'_x)'_x + (\mu v'_y)'_y + (\nu v'_z)'_z - 2\Omega u \sin \vartheta, \quad (1.64)$$

$$w'_t + uw'_x + vw'_y + ww'_z = -\frac{1}{\rho} P'_z + (\mu w'_x)'_x + (\mu w'_y)'_y + (\nu w'_z)'_z + 2\Omega u \cos \vartheta + g, \quad (1.65)$$

– уравнение неразрывности в случае переменной плотности

$$\rho'_t + (\rho u)'_x + (\rho v)'_y + (\rho w)'_z = 0, \quad (1.66)$$

– уравнение транспорта тепла

$$T'_t + uT'_x + vT'_y + wT'_z = (\mu T'_x)'_x + (\mu T'_y)'_y + (v T'_z)'_z + f_T, \quad (1.67)$$

– уравнение транспорта солей

$$S'_t + uS'_x + vS'_y + wS'_z = (\mu S'_x)'_x + (\mu S'_y)'_y + (v S'_z)'_z + f_S, \quad (1.68)$$

где $\bar{V} = \{u, v, w\}$ – компоненты вектора скорости; P – полное гидродинамическое давление; ρ – плотность водной среды; μ, ν – горизонтальная и вертикальная составляющие коэффициента турбулентного обмена; $\Omega = \Omega \cdot (\cos \vartheta \cdot \mathbf{j} + \sin \vartheta \cdot \mathbf{k})$ – угловая скорость вращения Земли определяется выражением; ϑ – широта места; g – ускорение свободного падения; f_T, f_S – источники тепла и соли (находится на границе области).

Из полного гидродинамического давления можно условно выделить две составляющие: давления столба жидкости и гидродинамическую часть

$$P(x, y, z, t) = p(x, y, z, t) + \rho_0 g z, \quad (1.69)$$

где p – гидростатическое давление невозмущенной жидкости; ρ_0 – плотность пресной воды при нормальных условиях.

Для покоящейся жидкости поле $p(x, y, z, t)$ не зависит от координаты z .

Уравнение состояния для плотности

$$\rho = \tilde{\rho} + \rho_0, \quad (1.70)$$

где ρ_0 – плотность пресной воды при нормальных условиях, $\tilde{\rho}$ определяется уравнением, рекомендованным UNESCO [3]

$$\begin{aligned} \tilde{\rho} = & \tilde{\rho}_w + (8.24493 \cdot 10^{-1} - 4.0899 \cdot 10^{-3} T + \\ & + 7.6438 \cdot 10^{-5} T^2 - 8.2467 \cdot 10^{-7} T^3 + 5.3875 \cdot 10^{-9} T^4) S + \\ & + (-5.72466 \cdot 10^{-3} + 1.0227 \cdot 10^{-4} T - 1.6546 \cdot 10^{-6} T^2) S^{3/2} + 4.8314 \cdot 10^{-4} S^2, \end{aligned} \quad (1.71)$$

где $\tilde{\rho}_w$ – плотность пресной воды, которая задается полиномом

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_w = & 999.842594 + 6.793952 \cdot 10^{-2} T - 9.095290 \cdot 10^{-3} T^2 + \\ & + 1.001685 \cdot 10^{-4} T^3 - 1.120083 \cdot 10^{-6} T^4 + 6.536332 \cdot 10^{-9} T^5. \end{aligned}$$

Уравнение (1.71) применимо для солености в диапазоне 0-42 ‰ и температуры от -2 до 40 °С.

Система уравнений (1.63) – (1.68) рассматривается при следующих краевых условиях:

– на входе

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}_0, P'_n = 0, T = T_0, S = S_0, \quad (1.72)$$

– донная граница

$$\rho_v \mu (\mathbf{V}_\tau)'_n = -\boldsymbol{\tau}, \mathbf{V}_n = 0, P'_n = 0, T'_n = 0, S'_n = 0, f_T = 0, f_S = 0, \quad (1.73)$$

– боковая граница

$$(\mathbf{V}_\tau)'_n = 0, \mathbf{V}'_n = 0, P'_n = 0, T'_n = 0, S'_n = 0, f_T = 0, f_S = 0, \quad (1.74)$$

– верхняя граница

$$\rho_v \mu (\mathbf{V}_\tau)'_n = -\boldsymbol{\tau}, w(x, y, t) = -\omega - P'_t / \rho g, P'_n = 0, \quad (1.75)$$

$$T'_n = 0, S'_n = 0, f_T = k(T_a - T), f_S = \frac{\omega}{h_z - \omega} S,$$

– на выходе (Керченский пролив)

$$P'_n = 0, \mathbf{V}'_n = 0, T'_n = 0, S'_n = 0, f_T = 0, f_S = 0, \quad (1.76)$$

где ω – интенсивность испарения жидкости; $\mathbf{V}_n, \mathbf{V}_\tau$ – нормальная и тангенциальная составляющая вектора скорости; $\boldsymbol{\tau} = \{\tau_x, \tau_y, \tau_z\}$ – вектор тангенциального напряжения; ρ – плотность водной среды; ρ_v – плотность взвеси; T_a – температура атмосферы; k – коэффициент передачи тепла между атмосферой и водной средой.

Составляющие тангенциального напряжения для свободной поверхности

$$\boldsymbol{\tau} = \rho_a C d_s |\mathbf{w}| \mathbf{w},$$

где \mathbf{w} – вектор скорости ветра относительно воды; ρ_a – плотность атмосферы; $C d_s = 0.0026$ – безразмерный коэффициент поверхностного сопротивления, который зависит от скорости ветра, рассматривается в диапазоне 0.0016-0.0032.

Тангенциальное напряжение для дна

$$\tau = \rho C d_b |\mathbf{V}| \mathbf{V},$$

где $C d_b = g k^2 / h^{1/3}$, где $k = 0.04$ – групповой коэффициент шероховатости в формуле Мэннинга, рассматривается в диапазоне 0.025-0.2; $h = H + \eta$ – глубина акватории, H – глубина до невозмущенной поверхности, η – высота свободной поверхности относительно геоида (уровень моря).

Система уравнений (1.63) – (1.68) рассматривается при следующих начальных условиях

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}_0, T = T_0, S = S_0. \quad (1.77)$$

1.9. Краткие выводы по главе 1

Проведен обзор основных лимитирующих элементов в водной среде. Рассмотрены процессы, составляющие циклы превращений азота, фосфора и кремния, а также формы пребывания этих элементов в водных объектах. В данной главе рассмотрен видовой состав фитопланктона Азовского моря. Особое внимание уделено доминирующим видам - синезеленым (*Aphanizomenon flos-aquae*), зеленым (*Chlorella Vulgaris*) и диатомовым (*Skeletonema costatum*) водорослям. Приведены стехиометрические соотношения питательных веществ, на основании которых можно определить лимитирующее вещество. Рассмотрены зависимости, описывающие потребление, накопление фитопланктоном питательных веществ и скорость роста фитопланктона. Проведен обзор и анализ существующих моделей и методов моделирования биогеохимических процессов в водных объектах, описаны преимущества и недостатки представленных моделей. Разработана трехмерная математическая модель трансформации форм фосфора, азота и кремния в задаче динамики фитопланктона для мелководных водоемов, в частности для Азовского моря. Данная модель учитывает конвективный и диффузионный переносы, поглощение и выделение питательных веществ фитопланктоном, циклы превращений форм фосфора, азота и кремния, влияние солености и температуры на скорость роста фитопланктона. Проведено аналитическое исследование разработанной непрерывной модели, получены

неравенства, гарантирующие существование и единственность решения поставленной задачи, сформулирована теорема. Предложена 3D модель гидродинамики мелководных водоемов с учетом транспорта тепла и солей. Модель позволяет получить трехмерные поля скоростей водного потока, давления, плотности морской воды, солености и температуры.

ГЛАВА 2. ПОСТРОЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ДИСКРЕТНОЙ МОДЕЛИ БИОХИМИЧЕСКОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ ФОРМ ФОСФОРА, АЗОТА И КРЕМНИЯ

В данной главе построен дискретный аналог модели биогеохимических циклов в мелководных водоемах, исследованы устойчивость, точность и порядок аппроксимации полученной разностной схемы. Построена дискретная схема для исследуемой модели, учитывающая заполненность ячеек.

2.1. Исследование линейной комбинации центральной разностной схемы и схемы «кабаре»

Численное решение задач гидродинамики и биогеохимических циклов сводится после дискретизации к решению сеточных уравнений конвекции-диффузии с в общем случае нелинейными функциями правых частей. В рамках выбранного способа линеаризации нелинейных правых частей на временной сетке сеточная задача является линейной.

Качество полученного решения сильно зависит от того, каким образом описан адвективный перенос субстанций. Ниже предложена новая разностная схема, позволяющая получить более точное численное решение по сравнению со схемами, ее составляющими [125]. Построенная схема имеет лучшую точность по сравнению с традиционными при значениях сеточного числа Пекле больших 2. Следует заметить, что для задач гидробиологии и гидрофизики прибрежных систем данное ограничение является необременительным и в подавляющем большинстве случаев выполняется автоматически.

2.1.1. Построение и исследование устойчивости линейной комбинации центральной разностной схемы и схемы «кабаре»

Рассмотрим нестационарное одномерное уравнение конвекции

$$\frac{\partial q}{\partial t} + u \frac{\partial q}{\partial x} = 0, \quad (2.1)$$

где $t \in [0, T]$, $x \in [0, L]$, $q(0, x) = q^0(x)$, $q(t, 0) = q(t, L) = 0$, $u = const$.

Введем равномерную расчетную сетку $\omega = \bar{\omega}_h \times \omega_\tau$, где $\bar{\omega}_h = \{x_i | x_i = ih, i = 0, 1, \dots, N, Nh = L\}$, $\omega_\tau = \{t_j | j = 0, 1, \dots\}$, $\tau = t_{n+1} - t_n = const$.

Аппроксимируем разностную дифференциальную задачу на приведенной сетке с помощью трех различных схем:

1) левой разностной схемой [122]

$$\frac{q_i^{n+1} - q_i^n}{\tau} + u \frac{q_i^n - q_{i-1}^n}{h} = 0; \quad (2.2)$$

2) центральной разностной схемой [122]

$$3) \frac{q_i^{n+1} - q_i^n}{\tau} + u \frac{q_{i+1}^n - q_{i-1}^n}{2h} = 0; \quad (2.3)$$

4) схемой «кабаре» [105]:

$$\frac{q_i^{n+1} - q_i^n}{2\tau} + \frac{q_{i-1}^n - q_{i-1}^{n-1}}{2\tau} + u \frac{q_i^n - q_{i-1}^n}{h} = 0. \quad (2.4)$$

Здесь $\tau = t_{n+1} - t_n = const$.

Получим четвертую схему, которая представляет собой линейную комбинацию центральной разностной схемы и схемы «кабаре»

$$\frac{1}{2} \left(\frac{q_i^{n+1} - q_i^n}{\tau} + u \frac{q_{i+1}^n - q_{i-1}^n}{2h} \right) + \frac{q_i^{n+1} - q_i^n}{2\tau} + \frac{q_{i-1}^n - q_{i-1}^{n-1}}{2\tau} + u \frac{q_i^n - q_{i-1}^n}{h} = 0;$$

$$\frac{q_i^{n+1} - q_i^n}{\tau} + \frac{q_{i-1}^n - q_{i-1}^{n-1}}{2\tau} + u \frac{q_{i+1}^n + 4q_i^n - 5q_{i-1}^n}{4h} = 0. \quad (2.5)$$

На рисунке 2.1 изображен сеточный шаблон схемы (2.5).

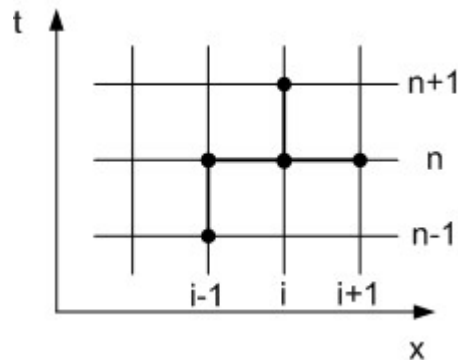


Рисунок 2.1 – Сеточный шаблон для предложенной разностной схемы

Для численного решения тестовой задачи о распространении возмущения типа «прямоугольная ступенька» на основе уравнения переноса (2.1) использовались употребительные разностные схемы: левый уголок, центральная разностная схема, схема «кабаре». Графики функции, описывающей «прямоугольную ступеньку», и приближенных решений, полученных на основе схем (2.2) - (2.4) изображены на рисунке 2.2. Здесь 1 – численное решение, 2 – точное решение.

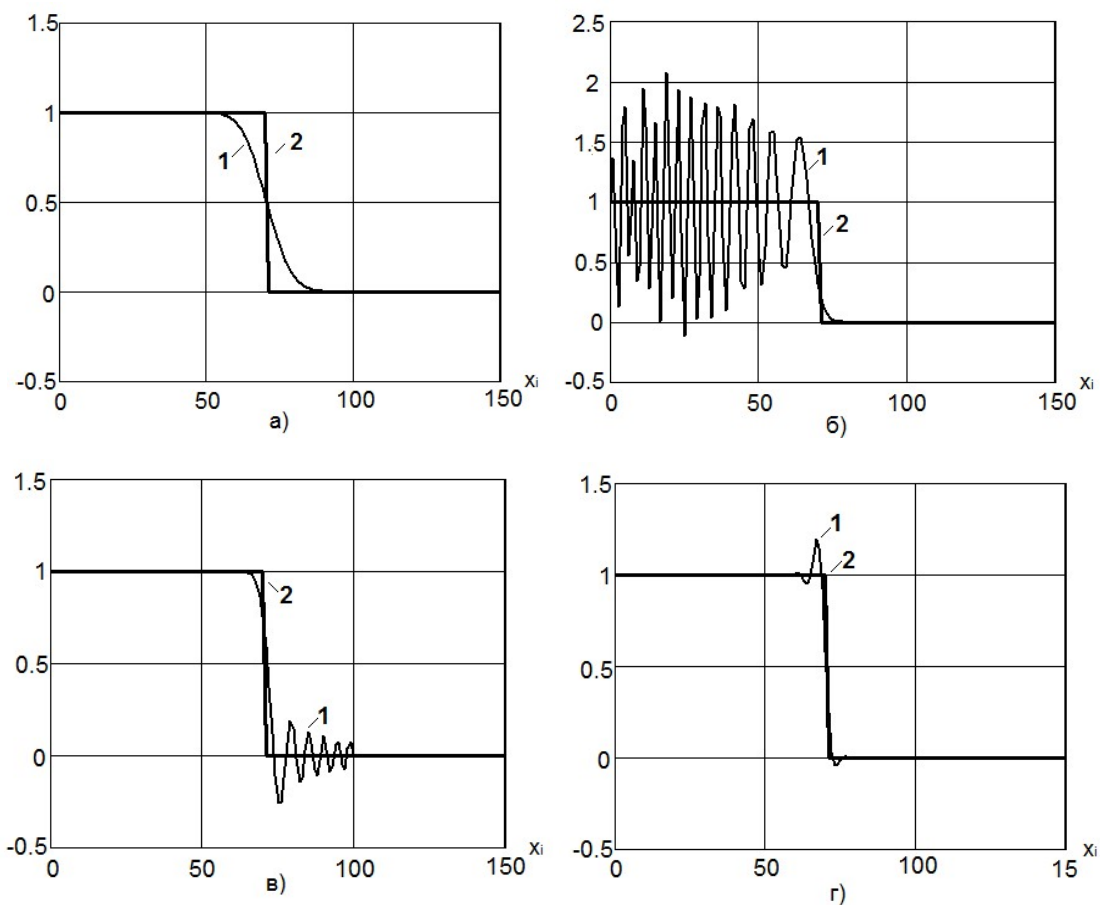


Рисунок 2.2 – Численное решение задачи распространения возмущения типа «прямоугольная ступенька»: а) левой разностной схемой; б) центральной разностной схемой; в) схемой «кабаре»; г) новой схемой – линейной комбинацией центральной разностной схемы и схемы «кабаре»

Рисунок 2.2 показывает, что при аппроксимации левой разностной схемой происходит «размытие» фронта на несколько шагов по пространству, при аппроксимации центральной разностной схемой и схемой «кабаре» решение неустойчиво, возникают осцилляции (энтропийные возмущения) [113]. Четвертая

схема дает наиболее точное приближение функции, описывающей движение фронта возмущения.

Левая разностная схема имеет порядок аппроксимации $O(\tau + h)$, центральная разностная схема аппроксимирует непрерывную модель с порядком $O(\tau + h^2)$, схема «кабаре» - с порядком $O(\tau^2 + h^2)$.

Исследуем **устойчивость** четвертой схемы методом гармоник. Пусть $q_i^n = \varphi^n \cdot e^{jki}$, где $j = \sqrt{-1}$, подставим в (2.5)

$$\frac{\varphi - 1}{\tau} + \frac{e^{-jk} - e^{-jk}}{2\tau} / \varphi + u \frac{e^{jk} + 4 - 5e^{-jk}}{4h} = 0$$

$$\varphi^2 + \left(\frac{e^{-jk}}{2} - 1 + \frac{u\tau}{4h} (e^{jk} + 4 - 5e^{-jk}) \right) \varphi - \frac{e^{-jk}}{2} = 0$$

$$\varphi^2 + \left(\frac{\cos k - j \sin k}{2} - 1 + \frac{u\tau}{4h} (4 - 4 \cos k + 6j \sin k) \right) \varphi - \frac{e^{-jk}}{2} = 0$$

$$\varphi^2 + \left(\frac{\cos k}{2} - 1 + \frac{u\tau}{4h} (4 - 4 \cos k) + j \left(-\frac{\sin k}{2} + 6 \cdot \frac{u\tau}{4h} \sin k \right) \right) \varphi - \frac{e^{-jk}}{2} = 0$$

$$\varphi^2 + \left(\left(-\frac{1}{2} + \frac{u\tau}{h} \right) (1 - \cos k) - \frac{1}{2} + j \frac{\sin k}{2} \left(-1 + \frac{3u\tau}{h} \sin k \right) \right) \varphi - \frac{e^{-jk}}{2} = 0.$$

Решим квадратное уравнение относительно φ

$$\varphi_{1,2} = \left(\frac{1}{4} - \frac{u\tau}{h} \right) (1 - \cos k) + \frac{1}{4} - j \frac{\sin k}{4} \left(-1 + \frac{3u\tau}{h} \right) \pm \sqrt{\left(\left(\frac{1}{4} - \frac{u\tau}{h} \right) (1 - \cos k) + \frac{1}{4} - j \frac{\sin k}{4} \left(-1 + \frac{3u\tau}{h} \right) \right)^2 + \frac{e^{-jk}}{2}}$$

Пусть $\frac{u\tau}{h} = x$, тогда

$$\varphi_{1,2} = \left(\frac{1}{4} - x \right) (1 - \cos k) + \frac{1}{4} - j \frac{\sin k}{4} (3x - 1) + \sqrt{\left(\left(\frac{1}{4} - x \right) (1 - \cos k) + \frac{1}{4} - j \frac{\sin k}{4} (3x - 1) \right)^2 + \frac{e^{-jk}}{2}}.$$

Обозначим абсолютные значения функций $\varphi_1(x, k)$ и $\varphi_2(x, k)$ как

$$\psi_{1,2} = \left| \left(\frac{1}{4} - x \right) (1 - \cos k) + \frac{1}{4} - j \frac{\sin k}{4} (3x - 1) - \sqrt{\left(\left(\frac{1}{4} - x \right) (1 - \cos k) + \frac{1}{4} - j \frac{\sin k}{4} (3x - 1) \right)^2 + \frac{e^{-jk}}{2}} \right|.$$

Исследуем поведение значений функций $\psi_1(x, k)$ и $\psi_2(x, k)$. Возьмем значения $k \in [0, 2\pi]$ с шагом $\frac{\pi}{6}$ и значения $x \in [0, 1]$ с шагом 0.1. Запишем полученные значения функций $\psi_1(x, k)$ в таблицу 2.1 и $\psi_2(x, k)$ в таблицу 2.2.

Таблица 2.1

$k \backslash x$	0	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{2\pi}{3}$	$\frac{5\pi}{6}$	π	$\frac{7\pi}{6}$	$\frac{4\pi}{3}$	$\frac{3\pi}{2}$	$\frac{5\pi}{3}$	$\frac{4\pi}{3}$	2π
0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
0.1	1	0.991	0.966	0.924	0.866	0.791	0.707	0.791	0.866	0.924	0.966	0.991	1
0.2	1	0.984	0.939	0.877	0.812	0.755	0.707	0.755	0.812	0.877	0.939	0.984	1
0.3	1	0.977	0.918	0.845	0.781	0.737	0.707	0.737	0.781	0.845	0.918	0.977	1
0.4	1	0.973	0.902	0.821	0.759	0.724	0.707	0.724	0.759	0.821	0.902	0.972	1
0.5	1	0.967	0.888	0.802	0.740	0.712	0.707	0.712	0.740	0.802	0.888	0.967	1
0.6	1	0.964	0.877	0.785	0.721	0.698	0.707	0.698	0.721	0.785	0.877	0.964	1
0.7	1	0.961	0.868	0.770	0.699	0.670	0.707	0.670	0.699	0.770	0.868	0.961	1
0.8	1	0.959	0.861	0.755	0.648	0.428	0.378	0.428	0.648	0.755	0.861	0.959	1
0.9	1	0.958	0.857	0.739	0.408	0.298	0.274	0.298	0.408	0.739	0.857	0.958	1
1	1	0.957	0.856	0.707	0.302	0.236	0.219	0.236	0.302	0.707	0.856	0.957	1

Таблица 2.2

$k \backslash x$	0	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{2\pi}{3}$	$\frac{5\pi}{6}$	π	$\frac{7\pi}{6}$	$\frac{4\pi}{3}$	$\frac{3\pi}{2}$	$\frac{5\pi}{3}$	$\frac{4\pi}{3}$	2π
0	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
0.1	0.5	0.504	0.518	0.541	0.578	0.632	0.707	0.632	0.578	0.541	0.518	0.504	0.5
0.2	0.5	0.508	0.532	0.57	0.616	0.662	0.707	0.662	0.616	0.57	0.532	0.508	0.5

0.3	0.5	0.512	0.544	0.592	0.64	0.679	0.707	0.679	0.64	0.592	0.544	0.512	0.5
0.4	0.5	0.514	0.554	0.609	0.659	0.691	0.707	0.691	0.659	0.609	0.554	0.514	0.5
0.5	0.5	0.517	0.563	0.624	0.676	0.703	0.707	0.703	0.676	0.624	0.563	0.517	0.5
0.6	0.5	0.519	0.570	0.637	0.693	0.717	0.707	0.717	0.693	0.637	0.570	0.519	0.5
0.7	0.5	0.520	0.576	0.649	0.716	0.746	0.707	0.746	0.716	0.649	0.576	0.520	0.5
0.75	0.5	0.521	0.578	0.656	0.734	0.837	1	0.837	0.734	0.656	0.578	0.521	0.5
0.8	0.5	0.521	0.580	0.662	0.772	1.168	1.322	1.168	0.772	0.662	0.580	0.521	0.5
0.9	0.5	0.522	0.583	0.677	1.225	1.676	1.826	1.676	1.225	0.677	0.583	0.522	0.5
1	0.5	0.522	0.584	0.707	1.655	2.118	2.281	2.118	1.655	0.707	0.584	0.522	0.5

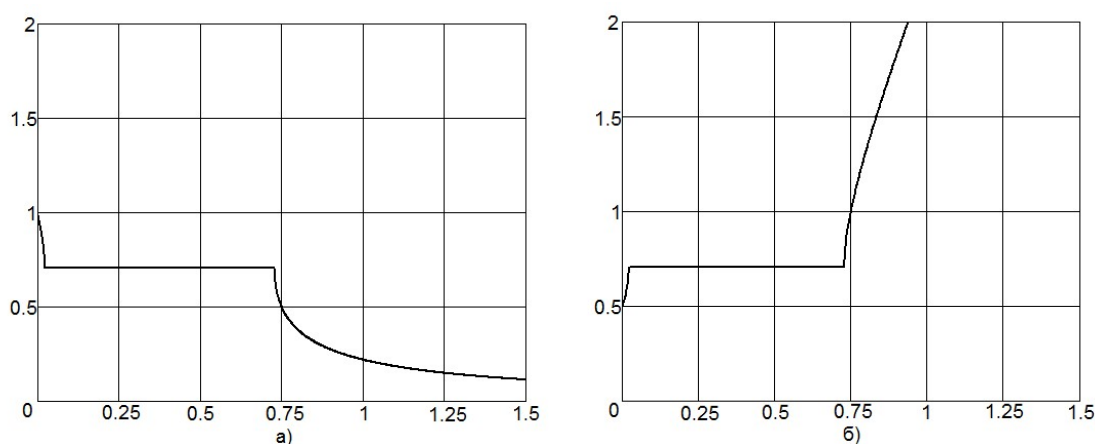


Рисунок 2.3 – Графики функций а) $\psi_1(x, \pi)$ и б) $\psi_2(x, \pi)$

Из таблиц 2.1, 2.2 и рисунка 2.3 видно, что значения $\psi(x, k) \in [0, 1]$ при $k \in [0, 2\pi]$ и $x \in [0, 0.75]$. При этих условиях новая схема является устойчивой.

Новая разностная схема показывает меньшую погрешность аппроксимации при больших значениях сеточного числа Пекле, что показано ниже.

Рассмотрим нестационарное одномерное уравнение конвекции-диффузии

$$\frac{\partial q}{\partial t} + u \frac{\partial q}{\partial x} = \mu \frac{\partial^2 q}{\partial x^2}. \quad (2.6)$$

где $t \in [0, T]$, $x \in [0, L]$, $q(0, x) = q^0(x)$, $q(t, 0) = q(t, L) = 0$, $u = const$, $\mu = const$.

Введем равномерную расчетную сетку $\bar{\omega} = \bar{\omega}_h \times \omega_\tau$, где $\bar{\omega}_h = \{x_i | x_i = ih, i = 0, 1, \dots, N, Nh = L\}$, $\omega_\tau = \{t_j | j = 0, 1, \dots\}$, $\tau = t_{n+1} - t_n = const$.

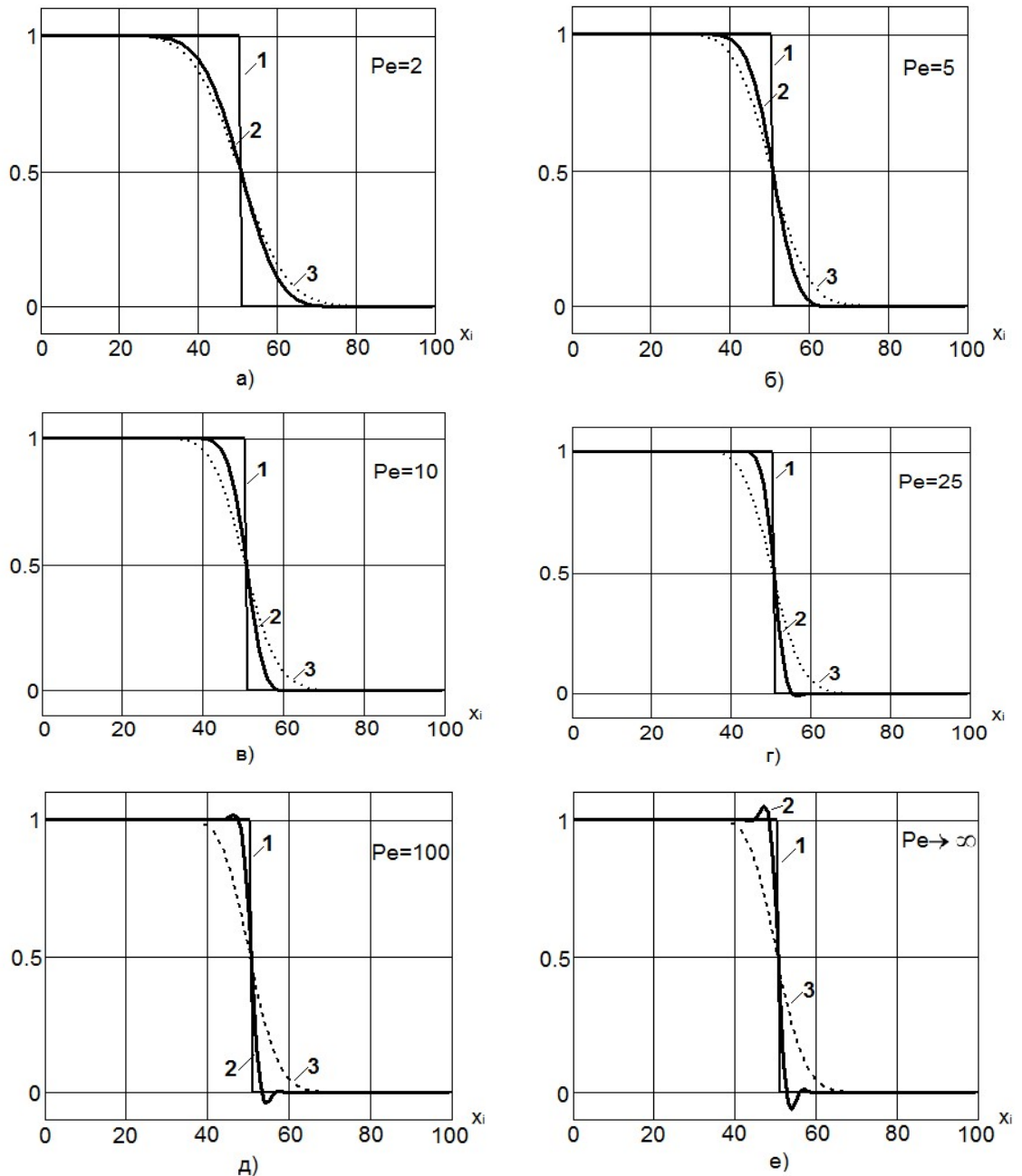


Рисунок 2.4 - Графики 1- функция, описывающая движение фронта возмущения, 2 – приближенное решение с использованием предложенной разностной схемы, 3 – приближенное решение с использованием левой разностной схемы при значениях сеточных чисел Пекле

а) $Pe=2$, б) $Pe=5$, в) $Pe=10$, г) $Pe=25$, д) $Pe=100$, е) $Pe \rightarrow \infty$

Получим схему как линейную комбинацию центральной разностной схемы и схемы «кабаре»

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \left(\frac{q_i^{n+1} - q_i^n}{\tau} + u \frac{q_{i+1}^n - q_{i-1}^n}{2h} - \mu \frac{q_{i+1}^n - 2q_i^n + q_{i-1}^n}{h^2} \right) + \\
& + \frac{q_i^{n+1} - q_i^n}{2\tau} + \frac{q_{i-1}^n - q_{i-1}^{n-1}}{2\tau} + u \frac{q_i^n - q_{i-1}^n}{h} - \mu \frac{q_{i+1}^n - 2q_i^n + q_{i-1}^n}{h^2} = 0; \\
& \frac{q_i^{n+1} - q_i^n}{\tau} + \frac{q_{i-1}^n - q_{i-1}^{n-1}}{2\tau} + u \frac{q_{i+1}^n + 4q_i^n - 5q_{i-1}^n}{4h} - 3\mu \frac{q_{i+1}^n - 2q_i^n + q_{i-1}^n}{2h^2} = 0. \quad (2.7)
\end{aligned}$$

На рисунке 2.4 изображены результаты численного решения тестовой задачи о распространении возмущения типа «прямоугольная ступенька» на основе уравнения переноса (2.6), полученных с применением левой разностной схемы, новой разностной схемы при различных значениях сеточных чисел Пекле. Из рисунка 2.4 видно, что предложенная схема дает более точное решение, чем левая разностная схема, при больших значениях сеточного числа Пекле ($Pe > 2$).

2.1.2. Исследование погрешности аппроксимации линейной комбинации центральной разностной схемы и схемы «кабаре» на примере решения двумерной задачи конвекции-диффузии

Получим аналитическое решение задачи конвекции-диффузии с использованием метода разложения в ряд Фурье [130]. Рассмотрим начально-краевую задачу для уравнения параболического типа с младшей производной

$$q'_t + uq'_x = \mu q''_{xx}. \quad (2.8)$$

где $t \in [0, T]$, $x \in [0, L]$, $u = const$, $\mu = const$,

$$\text{с начальными условиями } q(0, x) = q^0(x) \quad (2.9)$$

$$\text{и граничными условиями } q(t, 0) = q(t, L) = 0. \quad (2.10)$$

Требуется найти решение

$$q(x, t) \in C^2(0 < x < L) \cap C(0 \leq x \leq L) \cap C^1(0 < t < +\infty) \cap C(0 \leq t < +\infty).$$

Запишем конечную сумму тригонометрического ряда Фурье для функции $q(x, t)$ в комплексной форме

$$q(x, t) = \sum_{m=-N}^N C_m(t) \exp(j\omega_m x), \quad (2.11)$$

где $\omega = \frac{\pi}{L}$, m – номер гармоники; $C_m(t) = \frac{2}{L} \int_0^L q(x,t) \exp(j\omega t x) dx$ – комплексная

амплитуда m -й гармоники, $j = \sqrt{-1}$.

Подставим (2.11) в (2.8), получим

$$\begin{aligned} \left(\sum_{m=-N}^N C_m(t) \exp(j\omega t x) \right)'_t + u \left(\sum_{m=-N}^N C_m(t) \exp(j\omega t x) \right)'_x = \\ = \mu \left(\sum_{m=-N}^N C_m(t) \exp(j\omega t x) \right)''_{xx}. \end{aligned}$$

Изменим последовательность операций дифференцирования и суммирования ряда, вычислим производную по пространству

$$\begin{aligned} \sum_{m=-N}^N (C_m(t))'_t \exp(j\omega t x) + ju\omega t \sum_{m=-N}^N C_m(t) \exp(j\omega t x) = \\ = -\mu\omega^2 m^2 \sum_{m=-N}^N C_m(t) \exp(j\omega t x). \end{aligned}$$

Учитывая, что функции $\exp(j\omega t x)$ линейно независимы, получим

$$(C_m(t))'_t = -(ju\omega t + \mu\omega^2 m^2) C_m(t). \quad (2.12)$$

Решение уравнения (2.12) имеет вид

$$C_m(t) = C_m(0) \exp\left(-(\mu\omega^2 m^2 + ju\omega t)t\right).$$

Подставляя в (2.11) и учитывая начальные и граничные условия, получим решение уравнения (2.8)

$$q(x,t) = \sum_{m=-N}^N C_m(0) \exp\left(-(\mu\omega^2 m^2 + ju\omega t)t\right) \exp(j\omega t x). \quad (2.13)$$

Исследуем **точность** разностной схемы.

Рассмотрим равномерную пространственно-временной сеткой $\omega = \omega_\tau \times \bar{\omega}_x$, где $\bar{\omega}_x = \{x_i | x_i = ih; i = 0, 1, \dots, N_x; N_x h = L\}$, $\omega_\tau = \{t^n | t^n = n\tau; n = 0, 1, \dots, N_t; N_t \tau = T\}$, τ – шаг по времени, h – шаг по пространству, N_t – число шагов по времени, N_x – число шагов по пространству.

Аппроксимация уравнения (2.8) имеет вид

$$\frac{q_i^{n+1} - q_i^n}{\tau} + \frac{q_{i-1}^n - q_{i-1}^{n-1}}{2\tau} + u \frac{q_{i+1}^n + 4q_i^n - 5q_{i-1}^n}{4h} - 3\mu \frac{q_{i+1}^n - 2q_i^n + q_{i-1}^n}{2h^2} = 0, \quad (2.14)$$

$$\text{где } q_i = \sum_{m=-N}^N C_m \exp(jm\omega x_i). \quad (2.15)$$

Подставим (2.15) в (2.14) и получим

$$\begin{aligned} & \sum_{m=-N}^N \frac{C_m^{n+1} \exp(j\omega m h i) - C_m^n \exp(j\omega m h i)}{\tau} + \\ & + \sum_{m=-N}^N \frac{C_m^n \exp(j\omega m h (i-1)) - C_m^{n-1} \exp(j\omega m h (i-1))}{2\tau} + \\ & + u \sum_{m=-N}^N \frac{C_m^n \exp(j\omega m h (i+1)) + 4C_m^n \exp(j\omega m h i) - 5C_m^n \exp(j\omega m h (i-1))}{4h} - \\ & - 3\mu \sum_{m=-N}^N \frac{C_m^n \exp(j\omega m h (i+1)) - 2C_m^n \exp(j\omega m h i) + C_m^n \exp(j\omega m h (i-1))}{2h^2} = 0. \end{aligned}$$

Производя несложные арифметические действия, получим

$$\begin{aligned} & \sum_{m=-N}^N \frac{C_m^{n+1} - C_m^n}{\tau} \exp(j\omega m h i) + \sum_{m=-N}^N \frac{C_m^n - C_m^{n-1}}{2\tau} \exp(-j\omega m h) \exp(j\omega m h i) + \\ & + u \sum_{m=-N}^N \frac{C_m^n \exp(j\omega m h) + 4C_m^n - 5C_m^n \exp(-j\omega m h)}{4h} \exp(j\omega m h i) - \\ & - 3\mu \sum_{m=-N}^N \frac{C_m^n \exp(j\omega m h) - 2C_m^n + C_m^n \exp(-j\omega m h)}{2h^2} \exp(j\omega m h i) = 0. \end{aligned}$$

В силу линейной независимости $\exp(jm\omega i)$ запишем

$$\begin{aligned} & \frac{C_m^{n+1} - C_m^n}{\tau} + \frac{C_m^n - C_m^{n-1}}{2\tau} \exp(-j\omega m h) + \\ & + u C_m^n \frac{\exp(j\omega m h) + 4 - 5 \exp(-j\omega m h)}{4h} - \\ & - 3\mu C_m^n \frac{\exp(j\omega m h) - 2 + \exp(-j\omega m h)}{2h^2} = 0. \end{aligned} \quad (2.16)$$

При $\tau \rightarrow 0$ из (2.16) следует

$$(C_m(t))'_t \left(1 + \frac{\exp(-j\omega mh)}{2} \right) + u C_m^n \frac{\exp(j\omega mh) + 4 - 5\exp(-j\omega mh)}{4h} - \\ - 3\mu C_m^n \frac{\exp(j\omega mh) - 2 + \exp(-j\omega mh)}{2h^2} = 0$$

или

$$(C_m(t))'_t = \left(-u \frac{\exp(j\omega mh) + 4 - 5\exp(-j\omega mh)}{2h(2 + \exp(-j\omega mh))} + \right. \\ \left. + \mu \frac{3(\exp(j\omega mh) - 2 + \exp(-j\omega mh))}{h^2(2 + \exp(-j\omega mh))} \right) C_m^n. \quad (2.17)$$

Лемма. При аппроксимации задачи (2.8) разностной схемой (2.14) для каждой гармоники функции решения q скорости конвективного обмена u и диффузионного обмена μ меньше реальных значений и отличаются на величины

$$\alpha_1 = 1 - \frac{\exp(j\omega mh) + 4 - 5\exp(-j\omega mh)}{2j\omega mh(2 + \exp(-j\omega mh))} \quad \text{и} \quad \alpha_2 = 1 - \frac{3(-\exp(j\omega mh) + 2 - \exp(-j\omega mh))}{\omega^2 m^2 h^2 (2 + \exp(-j\omega mh))}$$

соответственно.

Доказательство. Из (2.16) при $\tau \rightarrow 0$ следует

$$(C_m(t))'_t = \left(-ju\omega m \frac{\exp(j\omega mh) + 4 - 5\exp(-j\omega mh)}{2j\omega mh(2 + \exp(-j\omega mh))} + \right. \\ \left. + \mu\omega^2 m^2 \frac{3(\exp(j\omega mh) - 2 + \exp(-j\omega mh))}{\omega^2 m^2 h^2 (2 + \exp(-j\omega mh))} \right) C_m^n.$$

С учетом (2.12) решение, полученное с использованием схемы (2.14), соответствует решению уравнения $q'_t = -u^* q'_x + \mu^* q''_{xx}$, где $u^* = u(1 - \alpha_1)$, $\mu^* = \mu(1 - \alpha_2)$,

$$\alpha_1 = 1 - \frac{\exp(j\omega mh) + 4 - 5\exp(-j\omega mh)}{2j\omega mh(2 + \exp(-j\omega mh))}, \\ \alpha_2 = 1 - \frac{3(-\exp(j\omega mh) + 2 - \exp(-j\omega mh))}{\omega^2 m^2 h^2 (2 + \exp(-j\omega mh))}.$$

Лемма доказана.

Исследуем порядок погрешности аппроксимации конвективного члена по пространству. Произведем замену $j\omega mh = s$

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= 1 - \frac{e^s + 4 - 5e^{-s}}{2s(2 + e^{-s})} = 0 \\ &= 1 - \frac{1 + s + \frac{s^2}{2} + \frac{s^3}{6} + \frac{s^4}{24} + O(s^5) + 4 - 5 + 5s - \frac{5s^2}{2} + \frac{5s^3}{6} - \frac{5s^4}{24} + O(s^5)}{2s \left(2 + 1 - s + \frac{s^2}{2} - \frac{s^3}{6} + \frac{s^4}{24} + O(s^5) \right)} = \\ &= \frac{-\frac{s^4}{12} + \frac{s^5}{12} + O(s^6)}{6s - 2s^2 + s^3 - \frac{s^4}{3} + \frac{s^5}{12} + O(s^6)} = -\frac{s^3}{72} + O(s^4)\end{aligned}$$

$$\text{Или } \alpha_1 = j \frac{(\omega mh)^3}{73} + O((\omega mh)^4). \quad (2.18)$$

Из полученного выражения видно, что схема (2.14) аппроксимирует конвективный член с третьим порядком точности по пространству.

Исследуем порядок погрешности аппроксимации диффузионного члена по пространству

$$\begin{aligned}\alpha_2 &= 1 + \frac{-3e^s + 6 - 3e^{-s}}{s^2(2 + e^{-s})} = \\ &= 1 - \frac{3 + 3s + \frac{3s^2}{2} + \frac{3s^3}{6} + \frac{3s^4}{24} + O(s^5) - 6 + 3 - 3s + \frac{3s^2}{2} - \frac{3s^3}{6} + \frac{3s^4}{24} + O(s^5)}{s^2 \left(2 + 1 - s + \frac{s^2}{2} - \frac{s^3}{6} + \frac{s^4}{24} + O(s^5) \right)} = \\ &= \frac{-s^3 + \frac{s^4}{4} + O(s^5)}{6s^2 - 2s^3 + s^4 + O(s^5)} = -\frac{s}{6} + O(s^2)\end{aligned}$$

$$\text{или } \alpha_2 = -\frac{j\omega mh}{6} + O((j\omega mh)^2). \quad (2.19)$$

Из полученного выражения видно, что схема (2.14) аппроксимирует диффузионный член с первым порядком точности по пространству.

Замечание. Величина $r = \pi/\omega mh$ описывает количество узлов, приходящихся на половину периода волны, при этом имеет место оценка $\pi > \omega mh$. Отсюда следует, что точность решения зависит от количества узлов, приходящихся на половину периода волны.

На рисунках 2.5 и 2.6 приведены графики функций

$$\alpha_1(r) = 1 - \frac{\exp(j\pi/r) + 4 - 5\exp(-j\pi/r)}{2j\pi/r(2 + \exp(-j\pi/r))},$$

$$\alpha_2(r) = 1 - \frac{3(-\exp(j\pi/r) + 2 - \exp(-j\pi/r))}{\pi^2/r^2(2 + \exp(-j\pi/r))},$$

описывающих зависимость погрешности аппроксимации конвективного и диффузионного членов соответственно разностной схемой (2.14) от числа узлов, используемых для решения задачи (2.8) в сравнении с центральной разностной схемой [130].

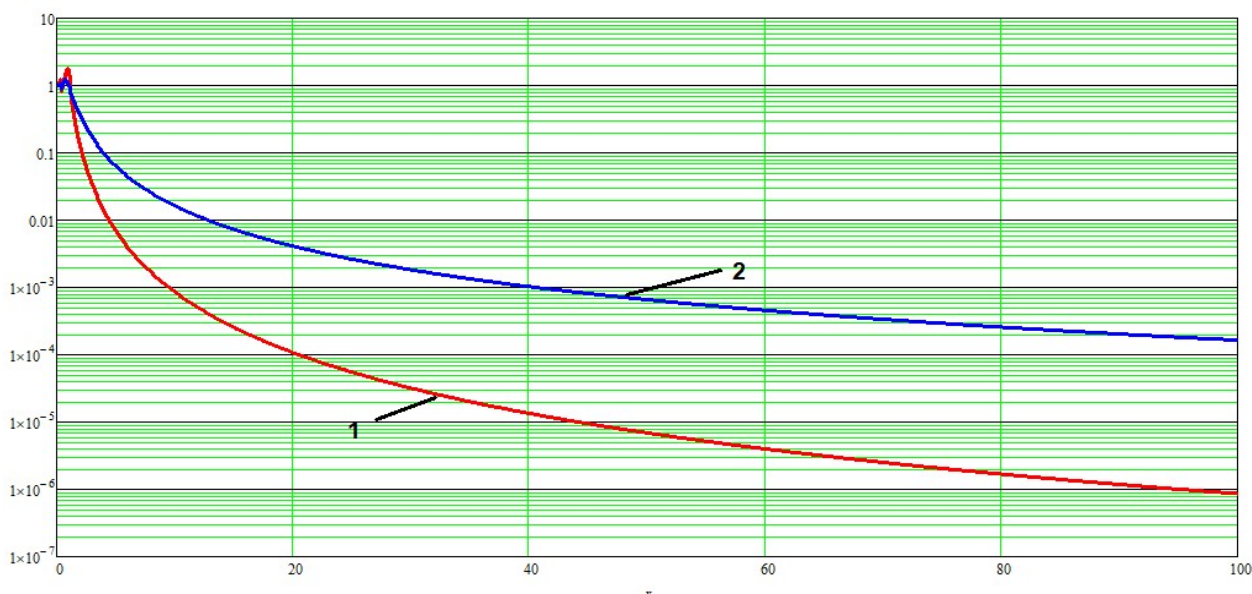


Рисунок 2.5 – График зависимости погрешности аппроксимации конвективного члена от числа узлов: 1 – для схемы (2.14);
2 – для центральной разностной схемы

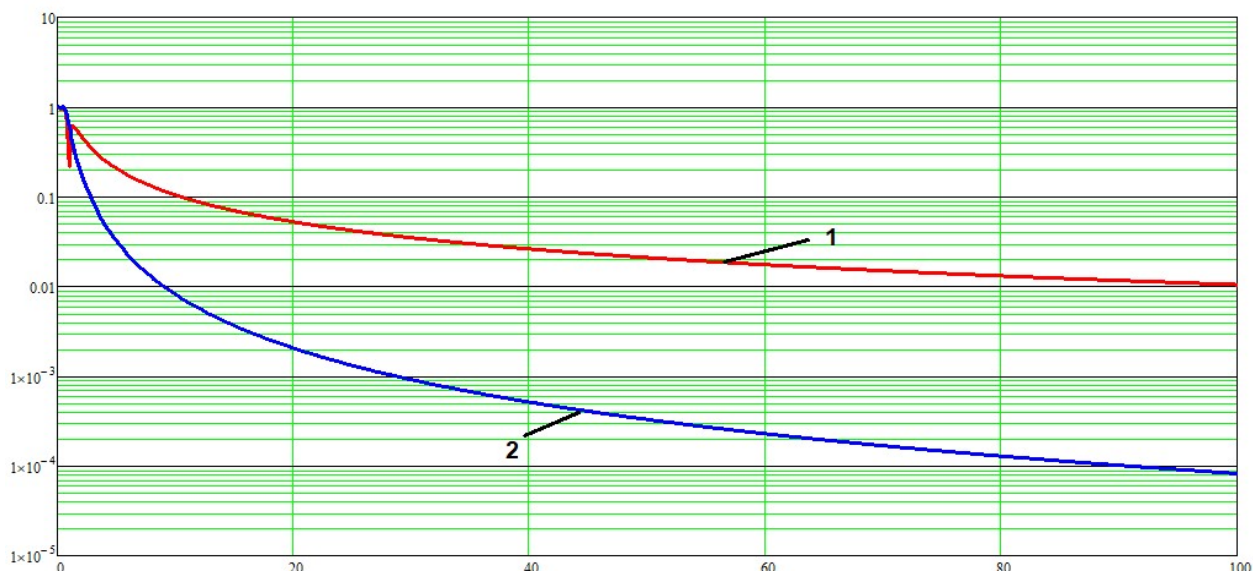


Рисунок 2.6 - График зависимости погрешности аппроксимации диффузионного члена от числа узлов: 1 – для схемы (2.14);
2 – для центральной разностной схемы

Анализируя графики, можно сделать вывод, что схема (2.14), представляющая собой линейную комбинацию центральной разностной схемы и схемы «кабаре», эффективна при решении задач конвекции-диффузии, в которых конвективный перенос преобладает над диффузионным и значения сеточного числа Пекле находятся в диапазоне $2 < Pe \leq 20$.

2.1.3. Сопоставление результатов расчета двумерной задачи конвекции-диффузии на основе схемы «кабаре» и новой разностной схемы

Рассмотрим нестационарное двумерное уравнение конвекции-диффузии

$$\frac{\partial q}{\partial t} + u \frac{\partial q}{\partial x} + v \frac{\partial q}{\partial y} = \mu \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial^2 q}{\partial y^2}, \quad (2.20)$$

где $t \in [0, T]$, $x \in [0, L_x]$, $y \in [0, L_y]$, $q(0, x, y) = q^0(x, y)$, $q(t, 0, y) = q(t, L_x, y) = 0$,
 $q(t, x, 0) = q(t, x, L_y) = 0$.

Для дискретизации задачи будем использовать равномерную расчетную сетку $\omega = \omega_\tau \times \bar{\omega}_x \times \bar{\omega}_y$, где $\bar{\omega}_x = \{x_i | x_i = ih_x, i = 0, 1, \dots, N, Nh_x = L_x\}$, $\bar{\omega}_y = \{y_i | y_i = ih_y, i = 0, 1, \dots, N, Nh_y = L_y\}$, $\omega_\tau = \{t_j | j = 0, 1, \dots\}$, $\tau = t_{n+1} - t_n = const$.

Схема (2.7) для уравнения (2.20) будет иметь вид (схема расщепления по пространству)

$$\frac{q_{i,j}^{n+1/2} - q_{i,j}^n}{\tau} + \psi_{xL} \frac{q_{i-1,j}^{n-1/2} - q_{i-1,j}^{n-1}}{2\tau} + \psi_{xR} \frac{q_{i+1,j}^{n-1/2} - q_{i+1,j}^{n-1}}{2\tau} + \quad (2.21)$$

$$+ u \frac{q_{i+1,j}^n - q_{i-1,j}^n}{4h_x} + \psi_{xL} u \frac{q_{i,j}^n - q_{i-1,j}^n}{h_x} + \psi_{xR} u \frac{q_{i+1,j}^n - q_{i,j}^n}{h_x} = \frac{3}{2} \mu \frac{q_{i+1,j}^n - 2q_{i,j}^n + q_{i-1,j}^n}{h_x^2};$$

$$\frac{q_{i,j}^{n+1} - q_{i,j}^{n+1/2}}{\tau} + \psi_{yL} \frac{q_{i,j-1}^n - q_{i,j-1}^{n-1/2}}{2\tau} + \psi_{yR} \frac{q_{i,j+1}^n - q_{i,j+1}^{n-1/2}}{2\tau} + \quad (2.22)$$

$$+ v \frac{q_{i,j+1}^{n+1/2} - q_{i,j-1}^{n+1/2}}{4h_y} + \psi_{yL} v \frac{q_{i,j}^{n+1/2} - q_{i,j-1}^{n+1/2}}{h_y} + \psi_{yR} v \frac{q_{i,j+1}^{n+1/2} - q_{i,j}^{n+1/2}}{h_y} = \frac{3}{2} \mu \frac{q_{i,j+1}^{n+1/2} - 2q_{i,j}^{n+1/2} + q_{i,j-1}^{n+1/2}}{h_y^2},$$

где $\psi_{xL} = 1$, $\psi_{xR} = 0$ при $u > 0$ и $\psi_{xL} = 0$, $\psi_{xR} = 1$ при $u < 0$; $\psi_{yL} = 1$, $\psi_{yR} = 0$ при $v > 0$ и $\psi_{yL} = 0$, $\psi_{yR} = 1$ при $v < 0$.

Для численного решения задачи (2.20) задавались следующие параметры: размеры расчетной области $L_x = 100$ м, $L_y = 100$ м, горизонтальная составляющая скорости конвективного переноса 4 м/с, вертикальная - 3 м/с, коэффициент диффузии принимал значения: 0, 0.1, 0.4, 2 м²/с. Размер равномерной сетки 100×100 расчетных узлов. Начальное распределение для решения задачи (2.20) задавалось функцией [130]:

$$q(x,y) = \begin{cases} \sin(\pi(x-10)/10) \sin(\pi(y-10)/10), \{x,y\} \in D, D: \{x \in [10,20], y \in [10,20]\}, \\ 0, \{x,y\} \notin D \end{cases} \quad (2.23)$$

Численное решение задачи конвекции с помощью разностной схемы (2.21)-(2.22) на различных временных интервалах приведены на рисунке 2.7.

На рисунках 2.8 и 2.9 приведены численные решения задачи конвекции-диффузии при различных значениях сеточного числа Пекле с помощью схемы «кабаре» и схемы (2.5).

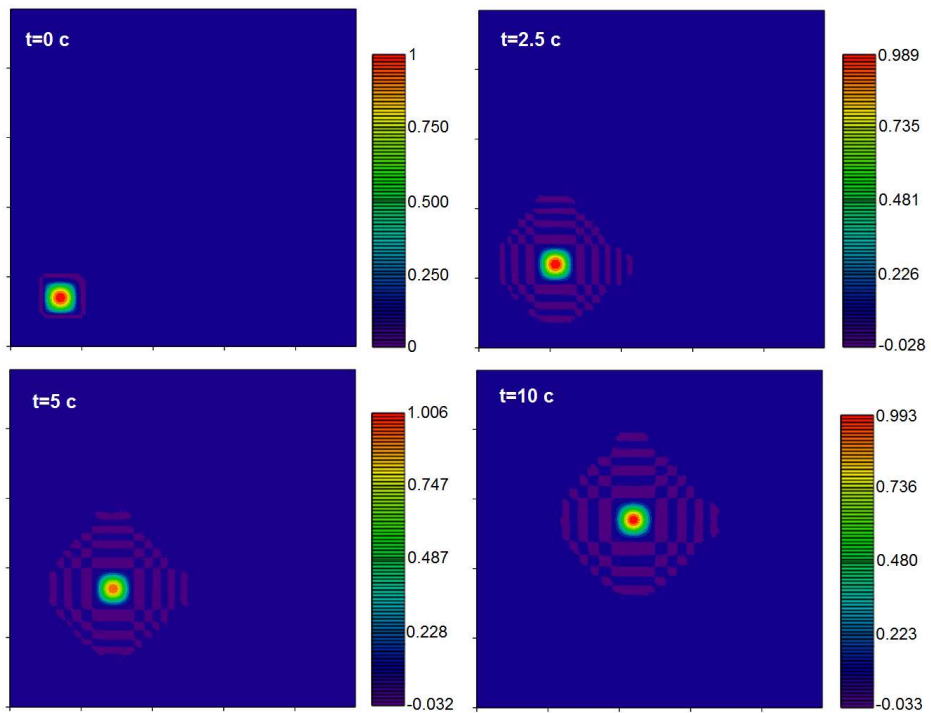


Рисунок 2.7 – Численное решение задачи конвекции с использованием схемы (2.5) на различных временных интервалах

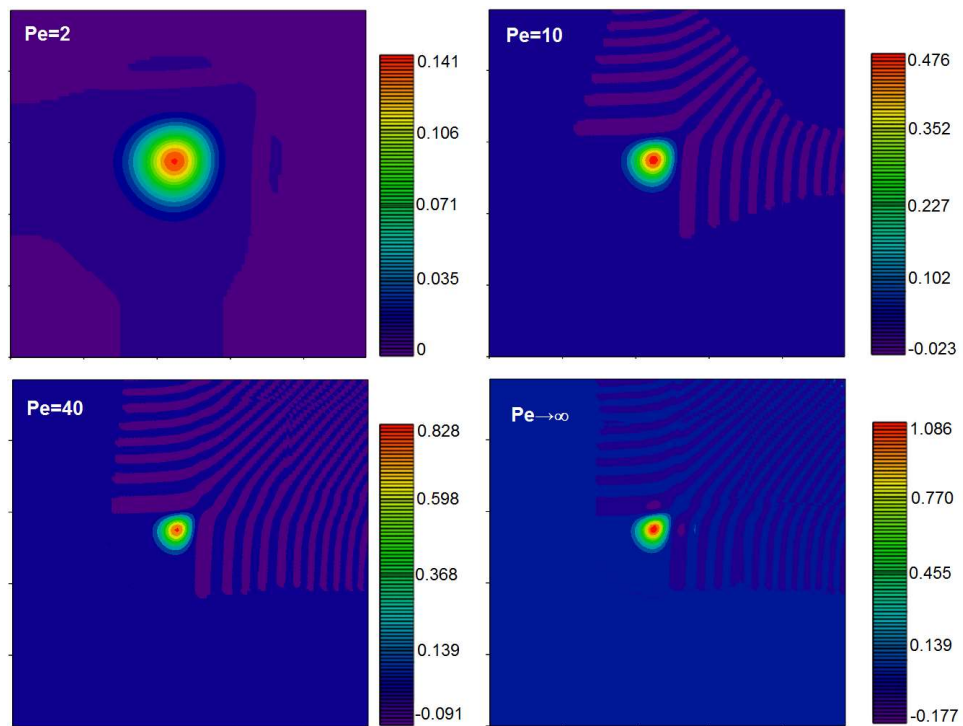


Рисунок 2.8 – Численное решение задачи конвекции-диффузии при различных числах Пекле с использованием схемы «кабаре»

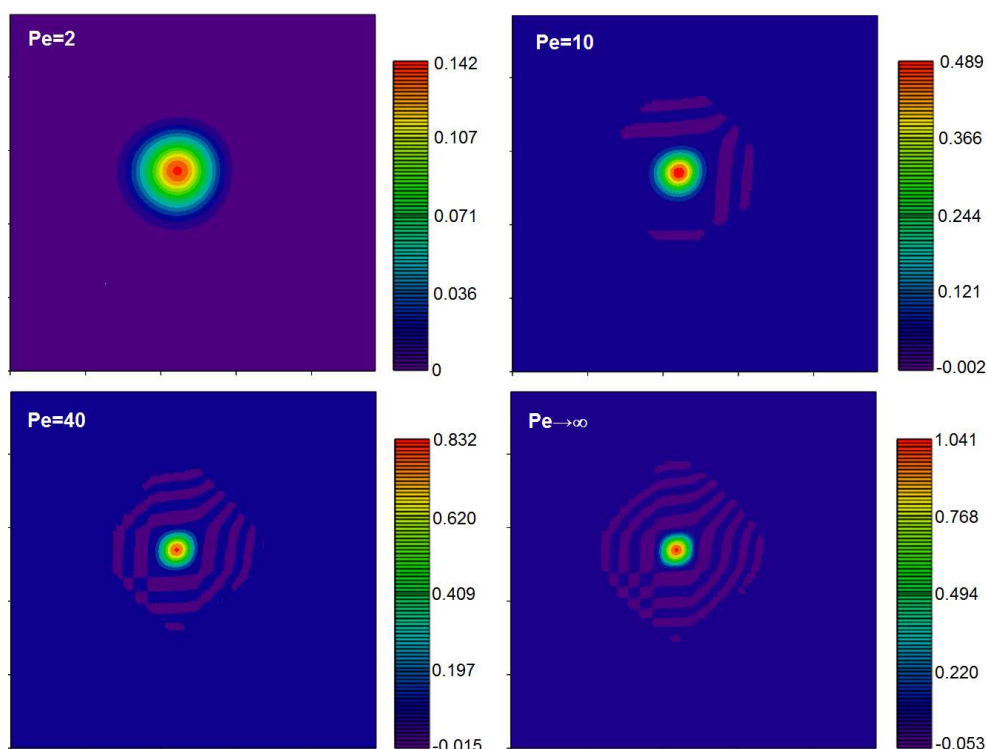


Рисунок 2.9 – Численное решение задачи конвекции-диффузии при различных значениях сеточного числа Пекле с использованием схемы (2.7)

Предельная абсолютная погрешность решения задачи конвекции с помощью схемы «кабаре» равна 0.281 единиц, а с помощью схемы (2.5) – 0,125 единиц. Таким образом, при $Pe \rightarrow \infty$ погрешность численного решения модельной задачи (2.23) с помощью разностной схемы (2.5) в 2.248 раз меньше, чем погрешность при решении с помощью схемы «кабаре». На рисунке 2.10 приведены изображения погрешностей численного решения задачи конвекции для различных схем.

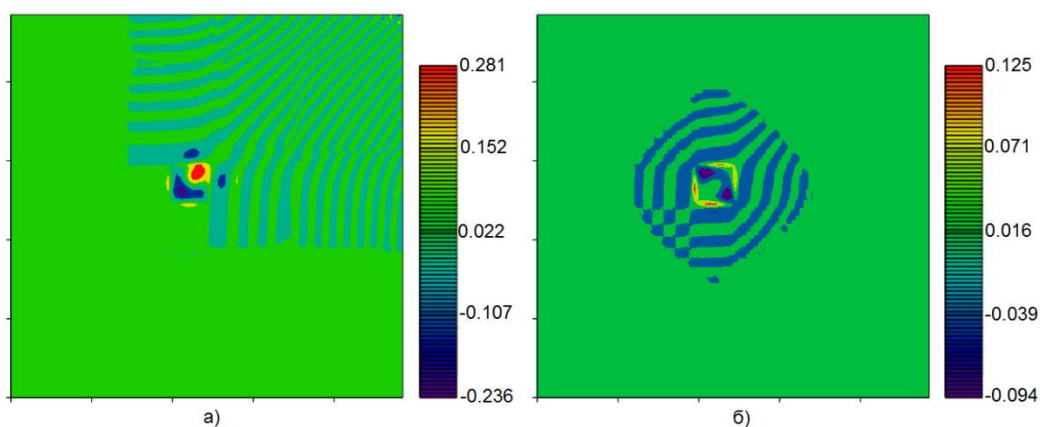


Рисунок 2.10 – Погрешность численного решения задачи конвекции ($\mu = 0, Pe \rightarrow \infty$) с использованием а) схемы «кабаре» и б) схемы (2.5)

2.2. Построение дискретной модели трансформации форм фосфора, азота и кремния в задаче динамики фитопланктона на основе метода заполненности ячеек с использованием линейной комбинации центральной разностной схемы и схемы «кабаре»

2.2.2. Построение дискретного уравнения конвекции-диффузии-реакции на основе метода заполненности ячеек и предложенной схемы

Построим схему, представляющую собой линейную комбинацию центральной разностной схемы и схемы «кабаре», на основе метода заполненности ячеек, который подробно описан в работах [123, 134]. Данная схема обеспечит второй порядок погрешности аппроксимации на границе, что было показано в работах А.И. Сухинова, А.Е. Чистякова [129].

Рассмотрим двумерный случай. Ячейки представляют собой прямоугольники, они могут быть заполненными, частично заполненными или пустыми. Центры ячеек и узлы разнесены на $h_x/2$ и $h_y/2$ по координатам x и y , соответственно. Обозначим через $O_{j,k}$ заполненность ячейки (j,k) . Поля концентраций субстанций рассчитываются в вершинах ячейки, как представлено на рисунке 2.12. Вершинами ячейки (j,k) являются узлы (j,k) , $(j-1,k)$, $(j,k-1)$, $(j-1,k-1)$.

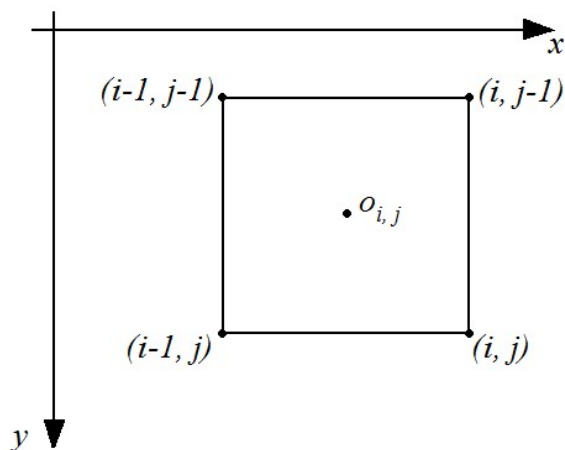


Рисунок 2.12 Расположение ячейки относительно прилегающих к ней узлов

В окрестности узла (i,j) лежат ячейки (i,j) , $(i+1,j)$, $(i,j+1)$, $(i+1,j+1)$, как показано на рисунке 2.13.

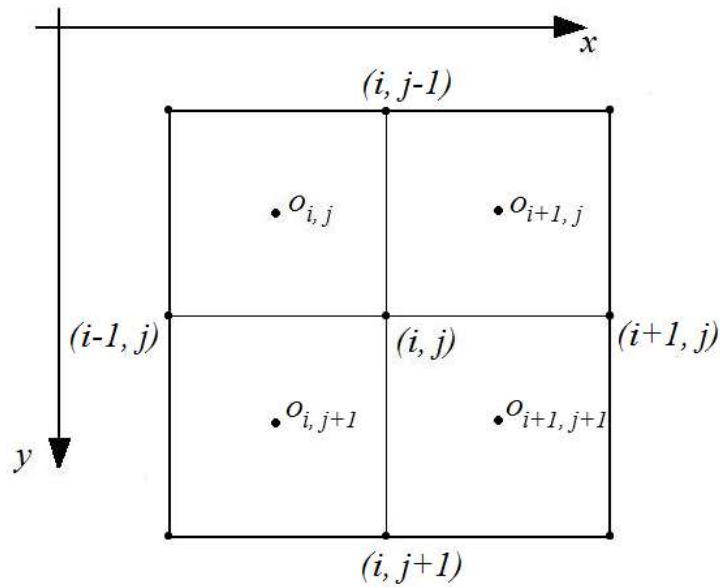


Рисунок 2.13 – Расположение узлов относительно ячеек

Вводятся коэффициенты K_0, K_1, K_2, K_3, K_4 , описывающие заполненность областей, находящихся в окрестности ячейки. Значение K_0 характеризует заполненность области $D_0: x \in (x_{i-1}, x_{i+1}), y \in (y_{j-1}, y_{j+1})$, $K_1 - D_1: x \in (x_i, x_{i+1}), y \in (y_{j-1}, y_{j+1})$, $K_2 - D_2: x \in (x_{i-1}, x_i), y \in (y_{j-1}, y_{j+1})$, $K_3 - D_3: x \in (x_{i-1}, x_{i+1}), y \in (y_j, y_{j+1})$, $K_4 - D_4: x \in (x_{i-1}, x_{i+1}), y \in (y_{j-1}, y_j)$. Заполненные части областей D_m будем называть Ω_m , где $m = \overline{0..4}$. В соответствии с этим коэффициенты K_m можно вычислить по формулам:

$$(K_m)_{i,j} = \frac{S_{\Omega_m}}{S_{D_m}}, \quad (K_0)_{i,j} = \frac{O_{i,j} + O_{i+1,j} + O_{i+1,j+1} + O_{i,j+1}}{4},$$

$$(K_1)_{i,j} = \frac{O_{i+1,j} + O_{i+1,j+1}}{2}, \quad (K_2)_{i,j} = \frac{O_{i,j} + O_{i,j+1}}{2},$$

$$(K_3)_{i,j} = \frac{O_{i+1,j+1} + O_{i,j+1}}{2}, \quad (K_4)_{i,j} = \frac{O_{i,j} + O_{i+1,j}}{2}.$$

Рассмотрим двумерное уравнение конвекции-диффузии-реакции

$$\frac{\partial q}{\partial t} + u \frac{\partial q}{\partial x} + v \frac{\partial q}{\partial y} = \mu \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial^2 q}{\partial y^2} + f, \quad (2.24)$$

с граничными условиями

$$q'_n(x, y, t) = \alpha_n q + \beta_n, \quad (2.25)$$

где u, v – компоненты вектора скорости, μ – коэффициент турбулентного обмена, f – функция, описывающая интенсивность и распределение источников.

Введем равномерную расчетную сетку $\omega = \bar{\omega}_\alpha \times \omega_\tau$, где $\bar{\omega}_\alpha = \{x_\alpha | x_\alpha = i_\alpha h_\alpha, i_\alpha = 0, 1, \dots, N_\alpha, N_\alpha h_\alpha = L_\alpha\}$, $\omega_\tau = \{t_j | j = 0, 1, \dots\}$, $\tau = t_{n+1} - t_n = const$, $\alpha = 1, 2$.

Построим для уравнения (2.24) линейную комбинацию центральной разностной схемы и схемы «кабаре» с учетом заполненности ячеек.

Проинтегрируем по области Ω_0 уравнение (2.24) и воспользуемся свойством линейности интеграла, в результате чего получим

$$\begin{aligned} & \iint_{\Omega_0} \frac{\partial q}{\partial t} dx dy + \iint_{\Omega_0} u \frac{\partial q}{\partial x} dx dy + \iint_{\Omega_0} v \frac{\partial q}{\partial y} dx dy = \\ & = \iint_{\Omega_0} \mu \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} dx dy + \iint_{\Omega_0} \mu \frac{\partial^2 q}{\partial y^2} dx dy + \iint_{\Omega_0} f dx dy. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Вычислим отдельно каждый из полученных интегралов.

$$\iint_{\Omega_0} \frac{\partial q}{\partial t} dx dy \approx (K_0)_{i,j} \iint_{D_0} \frac{\partial q}{\partial t} dx dy = (K_0)_{i,j} \frac{q_{i,j}^{n+1} - q_{i,j}^n}{\tau} h_x h_y. \quad (2.27)$$

Второй интеграл в выражении (2.25) запишется так

$$\begin{aligned} & \iint_{\Omega_0} u \frac{\partial q}{\partial x} dx dy = \iint_{\Omega_1} u \frac{\partial q}{\partial x} dx dy + \iint_{\Omega_2} u \frac{\partial q}{\partial x} dx dy \approx \\ & \approx (K_1)_{i,j} \iint_{D_1} u \frac{\partial q}{\partial x} dx dy + (K_2)_{i,j} \iint_{D_2} u \frac{\partial q}{\partial x} dx dy. \end{aligned}$$

Вычисляя интегралы по областям D_1 и D_2 :

$$\begin{aligned} & \iint_{D_1} u \frac{\partial q}{\partial x} dx dy = \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} dy \int_{x_i}^{x_{i+1/2}} u \frac{\partial q}{\partial x} dx \approx u_{i+1/2,j} \frac{q_{i+1,j} - q_{i,j}}{2} h_y, \\ & \iint_{D_2} u \frac{\partial q}{\partial x} dx dy = \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} dy \int_{x_{i-1/2}}^{x_i} u \frac{\partial q}{\partial x} dx \approx u_{i-1/2,j} \frac{q_{i,j} - q_{i-1,j}}{2} h_y, \end{aligned}$$

в результате чего получим

$$\iint_{\Omega_0} u \frac{\partial q}{\partial x} dx dy = (K_1)_{i,j} u_{i+1/2,j} \frac{q_{i+1,j} - q_{i,j}}{2} h_y + (K_2)_{i,j} u_{i-1/2,j} \frac{q_{i,j} - q_{i-1,j}}{2} h_y,$$

Где $u_{i+1/2,j} = (u_{i+1,j} + u_{i,j}) / 2$.

Разделим полученные выражения на площадь ячейки $h_x h_y$, тогда аппроксимация левой части уравнения (2.24) центральными разностями с учетом заполненности ячеек имеет вид

$$\begin{aligned} & (K_0)_{i,j} \frac{q_{i,j}^{n+1} - q_{i,j}^n}{\tau} + (K_1)_{i,j} u_{i+1/2,j} \frac{q_{i+1,j}^n - q_{i,j}^n}{2h_x} + (K_2)_{i,j} u_{i-1/2,j} \frac{q_{i,j}^n - q_{i-1,j}^n}{2h_x} + \\ & + (K_3)_{i,j} v_{i,j+1/2} \frac{q_{i,j+1}^n - q_{i,j}^n}{2h_y} + (K_4)_{i,j} v_{i,j-1/2} \frac{q_{i,j}^n - q_{i,j-1}^n}{2h_y}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Снова вычислим отдельно каждый из интегралов выражения (2.26)

$$\begin{aligned} & \iint_{\Omega_0} \frac{\partial q}{\partial t} dx dy \simeq (K_0)_{i,j} \iint_{D_0} \frac{\partial q}{\partial t} dx dy = \\ & = (K_0)_{i,j} \frac{q_{i,j}^{n+1} - q_{i,j}^n}{2\tau} h_x h_y + (K_0)_{i,j} \frac{q_{i-1,j}^n - q_{i-1,j}^{n-1}}{2\tau} h_x h_y + (K_0)_{i,j} \frac{q_{i,j-1}^n - q_{i,j-1}^{n-1}}{2\tau} h_x h_y. \end{aligned}$$

Второй и третий интегралы в выражении (2.26) запишутся так

$$\begin{aligned} & \iint_{\Omega_0} u \frac{\partial q}{\partial x} dx dy + \iint_{\Omega_0} v \frac{\partial q}{\partial y} dx dy \simeq (K_2)_{i,j} \iint_{D_2} \frac{\partial q}{\partial x} dx dy + (K_4)_{i,j} \iint_{D_4} \frac{\partial q}{\partial y} dx dy = \\ & + (K_2)_{i,j} u_{i-1/2,j} \frac{q_{i,j} - q_{i-1,j}}{2} h_y + (K_4)_{i,j} v_{i,j-1/2} \frac{q_{i,j} - q_{i,j-1}}{2} h_x. \end{aligned}$$

Разделим полученные выражения на площадь ячейки $h_x h_y$, тогда аппроксимация левой части уравнения (2.24) схемой «кабаре» с учетом заполненности ячеек имеет вид

$$\begin{aligned} & (K_0)_{i,j} \frac{q_{i,j}^{n+1} - q_{i,j}^n}{2\tau} + (K_0)_{i,j} \frac{q_{i-1,j}^n - q_{i-1,j}^{n-1}}{2\tau} + (K_0)_{i,j} \frac{q_{i,j-1}^n - q_{i,j-1}^{n-1}}{2\tau} + \\ & + (K_2)_{i,j} u_{i-1/2,j} \frac{q_{i,j}^n - q_{i-1,j}^n}{2h_x} + (K_4)_{i,j} v_{i,j-1/2} \frac{q_{i,j}^n - q_{i,j-1}^n}{2h_y}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Рассмотрим линейную комбинацию полученных выражений (2.28), (2.29)

$$\begin{aligned}
& (K_0)_{i,j} \frac{q_{i,j}^{n+1} - q_{i,j}^n}{2\tau} + (K_1)_{i,j} u_{i+1/2,j} \frac{q_{i+1,j}^n - q_{i,j}^n}{4h_x} + (K_2)_{i,j} u_{i-1/2,j} \frac{q_{i,j}^n - q_{i-1,j}^n}{4h_x} + \\
& + (K_3)_{i,j} v_{i,j+1/2} \frac{q_{i,j+1}^n - q_{i,j}^n}{4h_y} + (K_4)_{i,j} v_{i,j-1/2} \frac{q_{i,j}^n - q_{i,j-1}^n}{4h_y} + \\
& + (K_0)_{i,j} \frac{q_{i,j}^{n+1} - q_{i,j}^n}{2\tau} + (K_0)_{i,j} \frac{q_{i-1,j}^n - q_{i-1,j}^{n-1}}{2\tau} + (K_0)_{i,j} \frac{q_{i,j-1}^n - q_{i,j-1}^{n-1}}{2\tau} + \\
& + (K_2)_{i,j} u_{i-1/2,j} \frac{q_{i,j}^n - q_{i-1,j}^n}{2h_x} + (K_4)_{i,j} v_{i,j-1/2} \frac{q_{i,j}^n - q_{i,j-1}^n}{2h_y}.
\end{aligned}$$

Приведем подобные

$$\begin{aligned}
& (K_0)_{i,j} \frac{q_{i,j}^{n+1} - q_{i,j}^n}{\tau} + (K_0)_{i,j} \frac{q_{i-1,j}^n - q_{i-1,j}^{n-1}}{2\tau} + (K_0)_{i,j} \frac{q_{i,j-1}^n - q_{i,j-1}^{n-1}}{2\tau} + \\
& + (K_1)_{i,j} u_{i+1/2,j} \frac{q_{i+1,j}^n - q_{i,j}^n}{4h_x} + 3(K_2)_{i,j} u_{i-1/2,j} \frac{q_{i,j}^n - q_{i-1,j}^n}{4h_x} + \\
& + (K_3)_{i,j} v_{i,j+1/2} \frac{q_{i,j+1}^n - q_{i,j}^n}{4h_y} + 3(K_4)_{i,j} v_{i,j-1/2} \frac{q_{i,j}^n - q_{i,j-1}^n}{4h_y}. \tag{2.30}
\end{aligned}$$

Дискретный аналог оператора диффузии с учетом граничных условий третьего рода запишем следующим образом [134]

$$\begin{aligned}
& (\mu q'_x)'_x \simeq (K_1)_{i,j} \mu_{i+1/2,j} \frac{q_{i+1,j} - q_{i,j}}{h_x^2} - (K_2)_{i,j} \mu_{i-1/2,j} \frac{q_{i,j} - q_{i-1,j}}{h_x^2} - \\
& - \left| (K_1)_{i,j} - (K_2)_{i,j} \right| \mu_{i,j} \frac{\alpha_x q_{i,j} + \beta_x}{h_x}. \tag{2.31}
\end{aligned}$$

Разностный аналог уравнения (2.24) с использованием схемы (выражения (2.30), (2.31)) примет вид

$$\begin{aligned}
& (K_0)_{j,k} \frac{q_{j,k}^{n+1} - q_{j,k}^n}{\tau} + (K_0)_{j,k} \frac{q_{j-1,k}^n - q_{j-1,k}^{n-1}}{2\tau} + (K_0)_{j,k} \frac{q_{j,k-1}^n - q_{j,k-1}^{n-1}}{2\tau} + \\
& + (K_1)_{j,k} u_{j+1/2,k} \frac{q_{j+1,k}^n - q_{j,k}^n}{4h_x} + 3(K_2)_{j,k} u_{j-1/2,k} \frac{q_{j,k}^n - q_{j-1,k}^n}{4h_x} + \\
& + (K_3)_{j,k} v_{j,k+1/2} \frac{q_{j,k+1}^n - q_{j,k}^n}{4h_y} + 3(K_4)_{j,k} v_{j,k-1/2} \frac{q_{j,k}^n - q_{j,k-1}^n}{4h_y} = \tag{2.32}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{3}{2}(K_1)_{j,k} \mu_{j+1/2,k} \frac{q_{j+1,k}^n - q_{j,k}^n}{h_x^2} - \frac{3}{2}(K_2)_{j,k} \mu_{j-1/2,k} \frac{q_{j,k}^n - q_{j-1,k}^n}{h_x^2} - \\
&- \frac{3}{2} \left| (K_1)_{j,k} - (K_2)_{j,k} \right| \mu_{j,k} \frac{\alpha_x q_{j,k}^n + \beta_x}{h_x} + \frac{3}{2}(K_3)_{j,k} \mu_{j,k+1/2} \frac{q_{j,k+1}^n - q_{j,k}^n}{h_y^2} - \\
&- \frac{3}{2}(K_4)_{j,k} \mu_{j,k-1/2} \frac{q_{j,k}^n - q_{j,k-1}^n}{h_y^2} - \frac{3}{2} \left| (K_3)_{j,k} - (K_4)_{j,k} \right| \mu_{j,k} \frac{\alpha_x q_{j,k}^n + \beta_x}{h_y} + \frac{3}{2}(K_0)_{j,k} f_{j,k}^n.
\end{aligned}$$

2.2.3. Применение разработанной разностной схемы для построения дискретной модели биогеохимических циклов в водных экосистемах с учетом заполненности ячеек

Аппроксимируем уравнение (1.30) с использованием новой схемы (2.32)

$$\begin{aligned}
&(K_0)_{j,k,l} \frac{q_{j,k,l}^{n+1} - q_{j,k,l}^n}{\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{j-1,k,l}^n - q_{j-1,k,l}^{n-1}}{2\tau} + \\
&+ (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{j,k-1,l}^n - q_{j,k-1,l}^{n-1}}{2\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{j,k,l-1}^n - q_{j,k,l-1}^{n-1}}{2\tau} + \\
&+ (K_1)_{j,k,l} u_{j+1/2,k,l} \frac{q_{j+1,k,l}^n - q_{j,k,l}^n}{4h_x} + 3(K_2)_{j,k,l} u_{j-1/2,k,l} \frac{q_{j,k,l}^n - q_{j-1,k,l}^n}{4h_x} + \\
&+ (K_3)_{j,k,l} v_{j,k+1/2,l} \frac{q_{j,k+1,l}^n - q_{j,k,l}^n}{4h_y} + 3(K_4)_{j,k,l} v_{j,k-1/2,l} \frac{q_{j,k,l}^n - q_{j,k-1,l}^n}{4h_y} + \\
&+ (K_5)_{j,k,l} v_{j,k,l+1/2} \frac{q_{j,k,l+1}^n - q_{j,k,l}^n}{4h_z} + 3(K_6)_{j,k,l} v_{j,k,l-1/2} \frac{q_{j,k,l}^n - q_{j,k,l-1}^n}{4h_z} = \quad (2.33) \\
&= \frac{3}{2}(K_1)_{j,k,l} k_{(h)j+1/2,k,l} \frac{q_{j+1,k,l}^n - q_{j,k,l}^n}{h_x^2} - \frac{3}{2}(K_2)_{j,k,l} k_{(h)j-1/2,k,l} \frac{q_{j,k,l}^n - q_{j-1,k,l}^n}{h_x^2} - \\
&- \frac{3}{2} \left| (K_1)_{j,k,l} - (K_2)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{\alpha_x q_{j,k,l}^n + \beta_x}{h_x} + \frac{3}{2}(K_3)_{j,k,l} k_{(h)j,k+1/2,l} \frac{q_{j,k+1,l}^n - q_{j,k,l}^n}{h_y^2} - \\
&- \frac{3}{2}(K_4)_{j,k,l} k_{(h)j,k-1/2,l} \frac{q_{j,k,l}^n - q_{j,k-1,l}^n}{h_y^2} - \frac{3}{2} \left| (K_3)_{j,k,l} - (K_4)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{\alpha_x q_{j,k,l}^n + \beta_x}{h_y} + \\
&+ \frac{3}{2}(K_5)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l+1/2} \frac{q_{j,k,l+1}^n - q_{j,k,l}^n}{h_z^2} - \frac{3}{2}(K_6)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l-1/2} \frac{q_{j,k,l}^n - q_{j,k,l-1}^n}{h_z^2} -
\end{aligned}$$

$$-\frac{3}{2} \left| (K_5)_{j,k,l} - (K_6)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{\alpha_x q_{j,k,l}^n + \beta_x}{h_z} + \frac{3}{2} (K_0)_{j,k,l} R_{(q_i)j,k,l}^n.$$

Запишем дискретный аналог модели трансформации форм фосфора, азота и кремния, построенный с учетом заполненности ячеек

– для расчета концентрации зеленых водорослей (*Chlorella Vulgaris*)

$$\begin{aligned} & (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(F_1)j,k,l}^{n+1} - q_{(F_1)j,k,l}^n}{\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(F_1)j-1,k,l}^n - q_{(F_1)j,k,l}^{n-1}}{2\tau} + \\ & + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(F_1)j,k-1,l}^n - q_{(F_1)j,k-1,l}^{n-1}}{2\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(F_1)j,k,l-1}^n - q_{(F_1)j,k,l-1}^{n-1}}{2\tau} + \\ & + (K_1)_{j,k,l} u_{j+1/2,k,l} \frac{q_{(F_1)j+1,k,l}^n - q_{(F_1)j,k,l}^n}{4h_x} + 3(K_2)_{j,k,l} u_{j-1/2,k,l} \frac{q_{(F_1)j,k,l}^n - q_{(F_1)j-1,k,l}^n}{4h_x} + \\ & + (K_3)_{j,k,l} v_{j,k+1/2,l} \frac{q_{(F_1)j,k+1,l}^n - q_{(F_1)j,k,l}^n}{4h_y} + 3(K_4)_{j,k,l} v_{j,k-1/2,l} \frac{q_{(F_1)j,k,l}^n - q_{(F_1)j,k-1,l}^n}{4h_y} + \\ & + (K_5)_{j,k,l} v_{j,k,l+1/2} \frac{q_{(F_1)j,k,l+1}^n - q_{(F_1)j,k,l}^n}{4h_z} + 3(K_6)_{j,k,l} v_{j,k,l-1/2} \frac{q_{(F_1)j,k,l}^n - q_{(F_1)j,k,l-1}^n}{4h_z} = \\ & = \frac{3}{2} (K_1)_{j,k,l} k_{(h)j+1/2,k,l} \frac{q_{(F_1)j+1,k,l}^n - q_{(F_1)j,k,l}^n}{h_x^2} - \frac{3}{2} (K_2)_{j,k,l} k_{(h)j-1/2,k,l} \frac{q_{(F_1)j,k,l}^n - q_{(F_1)j-1,k,l}^n}{h_x^2} - \\ & - \frac{3}{2} \left| (K_1)_{j,k,l} - (K_2)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(F_1)j,k,l}^n}{h_x} + \frac{3}{2} (K_3)_{j,k,l} k_{(h)j,k+1/2,l} \frac{q_{(F_1)j,k+1,l}^n - q_{(F_1)j,k,l}^n}{h_y^2} - \\ & - \frac{3}{2} (K_4)_{j,k,l} k_{(h)j,k-1/2,l} \frac{q_{(F_1)j,k,l}^n - q_{(F_1)j,k-1,l}^n}{h_y^2} - \frac{3}{2} \left| (K_3)_{j,k,l} - (K_4)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(F_1)j,k,l}^n}{h_y} + \\ & + \frac{3}{2} (K_5)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l+1/2} \frac{q_{(F_1)j,k,l+1}^n - q_{(F_1)j,k,l}^n}{h_z^2} - \frac{3}{2} (K_6)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l-1/2} \frac{q_{(F_1)j,k,l}^n - q_{(F_1)j,k,l-1}^n}{h_z^2} - \\ & - \frac{3}{2} \left| (K_5)_{j,k,l} - (K_6)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(F_1)j,k,l}^n}{h_z} + \\ & + \frac{3}{2} (K_0)_{j,k,l} \left(C_{(F_1)j,k,l} (1 - K_{F_1R}) q_{(F_1)j,k,l}^n - K_{F_1D} q_{(F_1)j,k,l}^n - K_{F_1E} q_{(F_1)j,k,l}^n \right), \end{aligned}$$

– для расчета концентрации синезеленых водорослей (*Aphanizomenon flos-aquae*)

$$\begin{aligned}
& (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(F_2)j,k,l}^{n+1} - q_{(F_2)j,k,l}^n}{\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(F_2)j-1,k,l}^n - q_{(F_2)j,k,l}^{n-1}}{2\tau} + \\
& + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(F_2)j,k-1,l}^n - q_{(F_2)j,k-1,l}^{n-1}}{2\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(F_2)j,k,l-1}^n - q_{(F_2)j,k,l-1}^{n-1}}{2\tau} + \\
& + (K_1)_{j,k,l} u_{j+1/2,k,l} \frac{q_{(F_2)j+1,k,l}^n - q_{(F_2)j,k,l}^n}{4h_x} + 3(K_2)_{j,k,l} u_{j-1/2,k,l} \frac{q_{(F_2)j,k,l}^n - q_{(F_2)j-1,k,l}^n}{4h_x} + \\
& + (K_3)_{j,k,l} v_{j,k+1/2,l} \frac{q_{(F_2)j,k+1,l}^n - q_{(F_2)j,k,l}^n}{4h_y} + 3(K_4)_{j,k,l} v_{j,k-1/2,l} \frac{q_{(F_2)j,k,l}^n - q_{(F_2)j,k-1,l}^n}{4h_y} + \\
& + (K_5)_{j,k,l} v_{j,k,l+1/2} \frac{q_{(F_2)j,k,l+1}^n - q_{(F_2)j,k,l}^n}{4h_z} + 3(K_6)_{j,k,l} v_{j,k,l-1/2} \frac{q_{(F_2)j,k,l}^n - q_{(F_2)j,k,l-1}^n}{4h_z} = \\
& = \frac{3}{2}(K_1)_{j,k,l} k_{(h)j+1/2,k,l} \frac{q_{(F_2)j+1,k,l}^n - q_{(F_2)j,k,l}^n}{h_x^2} - \frac{3}{2}(K_2)_{j,k,l} k_{(h)j-1/2,k,l} \frac{q_{(F_2)j,k,l}^n - q_{(F_2)j-1,k,l}^n}{h_x^2} - \\
& - \frac{3}{2} \left| (K_1)_{j,k,l} - (K_2)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(F_2)j,k,l}^n}{h_x} + \frac{3}{2}(K_3)_{j,k,l} k_{(h)j,k+1/2,l} \frac{q_{(F_2)j,k+1,l}^n - q_{(F_2)j,k,l}^n}{h_y^2} - \\
& - \frac{3}{2}(K_4)_{j,k,l} k_{(h)j,k-1/2,l} \frac{q_{(F_2)j,k,l}^n - q_{(F_2)j,k-1,l}^n}{h_y^2} - \frac{3}{2} \left| (K_3)_{j,k,l} - (K_4)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(F_2)j,k,l}^n}{h_y} + \\
& + \frac{3}{2}(K_5)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l+1/2} \frac{q_{(F_2)j,k,l+1}^n - q_{(F_2)j,k,l}^n}{h_z^2} - \frac{3}{2}(K_6)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l-1/2} \frac{q_{(F_2)j,k,l}^n - q_{(F_2)j,k,l-1}^n}{h_z^2} - \\
& - \frac{3}{2} \left| (K_5)_{j,k,l} - (K_6)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(F_2)j,k,l}^n}{h_z} + \\
& + \frac{3}{2}(K_0)_{j,k,l} \left(C_{(F_2)j,k,l} (1 - K_{F_2R}) q_{(F_2)j,k,l}^n - K_{F_2D} q_{(F_2)j,k,l}^n - K_{F_2E} q_{(F_2)j,k,l}^n \right),
\end{aligned}$$

– для расчета концентрации диатомовых водорослей (*Skeletonema costatum*)

$$(K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(F_3)j,k,l}^{n+1} - q_{(F_3)j,k,l}^n}{\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(F_3)j-1,k,l}^n - q_{(F_3)j,k,l}^{n-1}}{2\tau} +$$

$$\begin{aligned}
& + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(F_3)j,k-1,l}^n - q_{(F_3)j,k-1,l}^{n-1}}{2\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(F_3)j,k,l-1}^n - q_{(F_3)j,k,l-1}^{n-1}}{2\tau} + \\
& + (K_1)_{j,k,l} u_{j+1/2,k,l} \frac{q_{(F_3)j+1,k,l}^n - q_{(F_3)j,k,l}^n}{4h_x} + 3(K_2)_{j,k,l} u_{j-1/2,k,l} \frac{q_{(F_3)j,k,l}^n - q_{(F_3)j-1,k,l}^n}{4h_x} + \\
& + (K_3)_{j,k,l} v_{j,k+1/2,l} \frac{q_{(F_3)j,k+1,l}^n - q_{(F_3)j,k,l}^n}{4h_y} + 3(K_4)_{j,k,l} v_{j,k-1/2,l} \frac{q_{(F_3)j,k,l}^n - q_{(F_3)j,k-1,l}^n}{4h_y} + \\
& + (K_5)_{j,k,l} v_{j,k,l+1/2} \frac{q_{(F_3)j,k,l+1}^n - q_{(F_3)j,k,l}^n}{4h_z} + 3(K_6)_{j,k,l} v_{j,k,l-1/2} \frac{q_{(F_3)j,k,l}^n - q_{(F_3)j,k,l-1}^n}{4h_z} = \\
& = \frac{3}{2} (K_1)_{j,k,l} k_{(h)j+1/2,k,l} \frac{q_{(F_3)j+1,k,l}^n - q_{(F_3)j,k,l}^n}{h_x^2} - \frac{3}{2} (K_2)_{j,k,l} k_{(h)j-1/2,k,l} \frac{q_{(F_3)j,k,l}^n - q_{(F_3)j-1,k,l}^n}{h_x^2} - \\
& - \frac{3}{2} \left| (K_1)_{j,k,l} - (K_2)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(F_3)j,k,l}^n}{h_x} + \frac{3}{2} (K_3)_{j,k,l} k_{(h)j,k+1/2,l} \frac{q_{(F_3)j,k+1,l}^n - q_{(F_3)j,k,l}^n}{h_y^2} - \\
& - \frac{3}{2} (K_4)_{j,k,l} k_{(h)j,k-1/2,l} \frac{q_{(F_3)j,k,l}^n - q_{(F_3)j,k-1,l}^n}{h_y^2} - \frac{3}{2} \left| (K_3)_{j,k,l} - (K_4)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(F_3)j,k,l}^n}{h_y} + \\
& + \frac{3}{2} (K_5)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l+1/2} \frac{q_{(F_3)j,k,l+1}^n - q_{(F_3)j,k,l}^n}{h_z^2} - \frac{3}{2} (K_6)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l-1/2} \frac{q_{(F_3)j,k,l}^n - q_{(F_3)j,k,l-1}^n}{h_z^2} - \\
& - \frac{3}{2} \left| (K_5)_{j,k,l} - (K_6)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(F_3)j,k,l}^n}{h_z} + \\
& + \frac{3}{2} (K_0)_{j,k,l} \left(C_{(F_3)j,k,l} (1 - K_{F_3R}) q_{(F_3)j,k,l}^n - K_{F_3D} q_{(F_3)j,k,l}^n - K_{F_3E} q_{(F_3)j,k,l}^n \right),
\end{aligned}$$

– для расчета концентрации взвешенного органического фосфора

$$\begin{aligned}
& (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(POP)j,k,l}^{n+1} - q_{(POP)j,k,l}^n}{\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(POP)j-1,k,l}^n - q_{(POP)j,k,l}^{n-1}}{2\tau} + \\
& + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(POP)j,k-1,l}^n - q_{(POP)j,k-1,l}^{n-1}}{2\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(POP)j,k,l-1}^n - q_{(POP)j,k,l-1}^{n-1}}{2\tau} + \\
& + (K_1)_{j,k,l} u_{j+1/2,k,l} \frac{q_{(POP)j+1,k,l}^n - q_{(POP)j,k,l}^n}{4h_x} + 3(K_2)_{j,k,l} u_{j-1/2,k,l} \frac{q_{(POP)j,k,l}^n - q_{(POP)j-1,k,l}^n}{4h_x} +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (K_3)_{j,k,l} v_{j,k+1/2,l} \frac{q_{(POP)j,k+1,l}^n - q_{(POP)j,k,l}^n}{4h_y} + 3(K_4)_{j,k,l} v_{j,k-1/2,l} \frac{q_{(POP)j,k,l}^n - q_{(POP)j,k-1,l}^n}{4h_y} + \\
& + (K_5)_{j,k,l} v_{j,k,l+1/2} \frac{q_{(POP)j,k,l+1}^n - q_{(POP)j,k,l}^n}{4h_z} + 3(K_6)_{j,k,l} v_{j,k,l-1/2} \frac{q_{(POP)j,k,l}^n - q_{(POP)j,k,l-1}^n}{4h_z} = \\
& = \frac{3}{2}(K_1)_{j,k,l} k_{(h)j+1/2,k,l} \frac{q_{(POP)j+1,k,l}^n - q_{(POP)j,k,l}^n}{h_x^2} - \frac{3}{2}(K_2)_{j,k,l} k_{(h)j-1/2,k,l} \frac{q_{(POP)j,k,l}^n - q_{(POP)j-1,k,l}^n}{h_x^2} - \\
& - \frac{3}{2} \left| (K_1)_{j,k,l} - (K_2)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(POP)j,k,l}^n}{h_x} + \frac{3}{2}(K_3)_{j,k,l} k_{(h)j,k+1/2,l} \frac{q_{(POP)j,k+1,l}^n - q_{(POP)j,k,l}^n}{h_y} - \\
& - \frac{3}{2}(K_4)_{j,k,l} k_{(h)j,k-1/2,l} \frac{q_{(POP)j,k,l}^n - q_{(POP)j,k-1,l}^n}{h_y^2} - \frac{3}{2} \left| (K_3)_{j,k,l} - (K_4)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(POP)j,k,l}^n}{h_y} + \\
& + \frac{3}{2}(K_5)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l+1/2} \frac{q_{(POP)j,k,l+1}^n - q_{(POP)j,k,l}^n}{h_z^2} - \frac{3}{2}(K_6)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l-1/2} \frac{q_{(POP)j,k,l}^n - q_{(POP)j,k,l-1}^n}{h_z^2} - \\
& - \frac{3}{2} \left| (K_5)_{j,k,l} - (K_6)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(POP)j,k,l}^n}{h_z} + \\
& + \frac{3}{2}(K_0)_{j,k,l} \left(\sum_{i=1}^3 s_P K_{F_i D} q_{(F_i)j,k,l}^n - K_{PD} q_{(POP)j,k,l}^n - K_{PN} q_{(POP)j,k,l}^n \right),
\end{aligned}$$

– для расчета концентрации растворенного органического фосфора

$$\begin{aligned}
& (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(DOP)j,k,l}^{n+1} - q_{(DOP)j,k,l}^n}{\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(DOP)j-1,k,l}^n - q_{(DOP)j,k,l}^{n-1}}{2\tau} + \\
& + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(DOP)j,k-1,l}^n - q_{(DOP)j,k-1,l}^{n-1}}{2\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(DOP)j,k,l-1}^n - q_{(DOP)j,k,l-1}^{n-1}}{2\tau} + \\
& + (K_1)_{j,k,l} u_{j+1/2,k,l} \frac{q_{(DOP)j+1,k,l}^n - q_{(DOP)j,k,l}^n}{4h_x} + 3(K_2)_{j,k,l} u_{j-1/2,k,l} \frac{q_{(DOP)j,k,l}^n - q_{(DOP)j-1,k,l}^n}{4h_x} + \\
& + (K_3)_{j,k,l} v_{j,k+1/2,l} \frac{q_{(DOP)j,k+1,l}^n - q_{(DOP)j,k,l}^n}{4h_y} + 3(K_4)_{j,k,l} v_{j,k-1/2,l} \frac{q_{(DOP)j,k,l}^n - q_{(DOP)j,k-1,l}^n}{4h_y} + \\
& + (K_5)_{j,k,l} v_{j,k,l+1/2} \frac{q_{(DOP)j,k,l+1}^n - q_{(DOP)j,k,l}^n}{4h_z} + 3(K_6)_{j,k,l} v_{j,k,l-1/2} \frac{q_{(DOP)j,k,l}^n - q_{(DOP)j,k,l-1}^n}{4h_z} =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{3}{2}(K_1)_{j,k,l} k_{(h)j+1/2,k,l} \frac{q_{(DOP)j+1,k,l}^n - q_{(DOP)j,k,l}^n}{h_x^2} - \frac{3}{2}(K_2)_{j,k,l} k_{(h)j-1/2,k,l} \frac{q_{(DOP)j,k,l}^n - q_{(DOP)j-1,k,l}^n}{h_x^2} - \\
&- \frac{3}{2} \left| (K_1)_{j,k,l} - (K_2)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(DOP)j,k,l}^n}{h_x} + \frac{3}{2}(K_3)_{j,k,l} k_{(h)j,k+1/2,l} \frac{q_{(DOP)j,k+1,l}^n - q_{(DOP)j,k,l}^n}{h_y^2} - \\
&- \frac{3}{2}(K_4)_{j,k,l} k_{(h)j,k-1/2,l} \frac{q_{(DOP)j,k,l}^n - q_{(DOP)j,k-1,l}^n}{h_y^2} - \frac{3}{2} \left| (K_3)_{j,k,l} - (K_4)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(DOP)j,k,l}^n}{h_y} + \\
&+ \frac{3}{2}(K_5)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l+1/2} \frac{q_{(DOP)j,k,l+1}^n - q_{(DOP)j,k,l}^n}{h_z^2} - \frac{3}{2}(K_6)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l-1/2} \frac{q_{(DOP)j,k,l}^n - q_{(DOP)j,k,l-1}^n}{h_z^2} - \\
&- \frac{3}{2} \left| (K_5)_{j,k,l} - (K_6)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(DOP)j,k,l}^n}{h_z} + \\
&+ \frac{3}{2}(K_0)_{j,k,l} \left(\sum_{i=1}^3 S_P K_{F_i E} q_{(F_i)j,k,l}^n + K_{PD} q_{(POP)j,k,l}^n - K_{DN} q_{(DOP)j,k,l}^n \right),
\end{aligned}$$

– для расчета концентрации фосфатов

$$\begin{aligned}
&(K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(PO_4)j,k,l}^{n+1} - q_{(PO_4)j,k,l}^n}{\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(PO_4)j-1,k,l}^n - q_{(PO_4)j,k,l}^{n-1}}{2\tau} + \\
&+ (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(PO_4)j,k-1,l}^n - q_{(PO_4)j,k-1,l}^{n-1}}{2\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(PO_4)j,k,l-1}^n - q_{(PO_4)j,k,l-1}^{n-1}}{2\tau} + \\
&+ (K_1)_{j,k,l} u_{j+1/2,k,l} \frac{q_{(PO_4)j+1,k,l}^n - q_{(PO_4)j,k,l}^n}{4h_x} + 3(K_2)_{j,k,l} u_{j-1/2,k,l} \frac{q_{(PO_4)j,k,l}^n - q_{(PO_4)j-1,k,l}^n}{4h_x} + \\
&+ (K_3)_{j,k,l} v_{j,k+1/2,l} \frac{q_{(PO_4)j,k+1,l}^n - q_{(PO_4)j,k,l}^n}{4h_y} + 3(K_4)_{j,k,l} v_{j,k-1/2,l} \frac{q_{(PO_4)j,k,l}^n - q_{(PO_4)j,k-1,l}^n}{4h_y} + \\
&+ (K_5)_{j,k,l} v_{j,k,l+1/2} \frac{q_{(PO_4)j,k,l+1}^n - q_{(PO_4)j,k,l}^n}{4h_z} + 3(K_6)_{j,k,l} v_{j,k,l-1/2} \frac{q_{(PO_4)j,k,l}^n - q_{(PO_4)j,k,l-1}^n}{4h_z} = \\
&= \frac{3}{2}(K_1)_{j,k,l} k_{(h)j+1/2,k,l} \frac{q_{(PO_4)j+1,k,l}^n - q_{(PO_4)j,k,l}^n}{h_x^2} - \frac{3}{2}(K_2)_{j,k,l} k_{(h)j-1/2,k,l} \frac{q_{(PO_4)j,k,l}^n - q_{(PO_4)j-1,k,l}^n}{h_x^2} - \\
&- \frac{3}{2} \left| (K_1)_{j,k,l} - (K_2)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(PO_4)j,k,l}^n}{h_x} + \frac{3}{2}(K_3)_{j,k,l} k_{(h)j,k+1/2,l} \frac{q_{(PO_4)j,k+1,l}^n - q_{(PO_4)j,k,l}^n}{h_y^2} -
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{3}{2}(K_4)_{j,k,l} k_{(h)j,k-1/2,l} \frac{q_{(PO_4)j,k,l}^n - q_{(PO_4)j,k-1,l}^n}{h_y^2} - \frac{3}{2} \left| (K_3)_{j,k,l} - (K_4)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(PO_4)j,k,l}^n}{h_y} + \\
& + \frac{3}{2}(K_5)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l+1/2} \frac{q_{(PO_4)j,k,l+1}^n - q_{(PO_4)j,k,l}^n}{h_z^2} - \frac{3}{2}(K_6)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l-1/2} \frac{q_{(PO_4)j,k,l}^n - q_{(PO_4)j,k,l-1}^n}{h_z^2} - \\
& - \frac{3}{2} \left| (K_5)_{j,k,l} - (K_6)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(PO_4)j,k,l}^n}{h_z} + \\
& + \frac{3}{2}(K_0)_{j,k,l} \left(\sum_{i=1}^3 S_P (C^P)_{F_i}^n (K_{F_iR} - 1) q_{(F_i)j,k,l}^n + K_{PN} q_{(POP)j,k,l}^n + K_{DN} q_{(DOP)j,k,l}^n \right),
\end{aligned}$$

– для расчета концентрации аммония

$$\begin{aligned}
& (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(NH_4)j,k,l}^{n+1} - q_{(NH_4)j,k,l}^n}{\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(NH_4)j-1,k,l}^{n-1} - q_{(NH_4)j,k,l}^{n-1}}{2\tau} + \\
& + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(NH_4)j,k-1,l}^n - q_{(NH_4)j,k-1,l}^{n-1}}{2\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(NH_4)j,k,l-1}^n - q_{(NH_4)j,k,l-1}^{n-1}}{2\tau} + \\
& + (K_1)_{j,k,l} u_{j+1/2,k,l} \frac{q_{(NH_4)j+1,k,l}^n - q_{(NH_4)j,k,l}^n}{4h_x} + 3(K_2)_{j,k,l} u_{j-1/2,k,l} \frac{q_{(NH_4)j,k,l}^n - q_{(NH_4)j-1,k,l}^n}{4h_x} + \\
& + (K_3)_{j,k,l} v_{j,k+1/2,l} \frac{q_{(NH_4)j,k+1,l}^n - q_{(NH_4)j,k,l}^n}{4h_y} + 3(K_4)_{j,k,l} v_{j,k-1/2,l} \frac{q_{(NH_4)j,k,l}^n - q_{(NH_4)j,k-1,l}^n}{4h_y} + \\
& + (K_5)_{j,k,l} v_{j,k,l+1/2} \frac{q_{(NH_4)j,k,l+1}^n - q_{(NH_4)j,k,l}^n}{4h_z} + 3(K_6)_{j,k,l} v_{j,k,l-1/2} \frac{q_{(NH_4)j,k,l}^n - q_{(NH_4)j,k,l-1}^n}{4h_z} = \\
& = \frac{3}{2}(K_1)_{j,k,l} k_{(h)j+1/2,k,l} \frac{q_{(NH_4)j+1,k,l}^n - q_{(NH_4)j,k,l}^n}{h_x^2} - \frac{3}{2}(K_2)_{j,k,l} k_{(h)j-1/2,k,l} \frac{q_{(NH_4)j,k,l}^n - q_{(NH_4)j-1,k,l}^n}{h_x^2} - \\
& - \frac{3}{2} \left| (K_1)_{j,k,l} - (K_2)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(NH_4)j,k,l}^n}{h_x} + \frac{3}{2}(K_3)_{j,k,l} k_{(h)j,k+1/2,l} \frac{q_{(NH_4)j,k+1,l}^n - q_{(NH_4)j,k,l}^n}{h_y^2} - \\
& - \frac{3}{2}(K_4)_{j,k,l} k_{(h)j,k-1/2,l} \frac{q_{(NH_4)j,k,l}^n - q_{(NH_4)j,k-1,l}^n}{h_y^2} - \frac{3}{2} \left| (K_3)_{j,k,l} - (K_4)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(NH_4)j,k,l}^n}{h_y} + \\
& + \frac{3}{2}(K_5)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l+1/2} \frac{q_{(NH_4)j,k,l+1}^n - q_{(NH_4)j,k,l}^n}{h_z^2} - \frac{3}{2}(K_6)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l-1/2} \frac{q_{(NH_4)j,k,l}^n - q_{(NH_4)j,k,l-1}^n}{h_z^2} -
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{3}{2} \left| (K_5)_{j,k,l} - (K_6)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(NH_4)j,k,l}^n}{h_z} - \frac{3}{2} (K_0)_{j,k,l} \cdot K_{42} q_{(NH_4)j,k,l}^n + \\
& + \frac{3}{2} \sum_{i=1}^3 \frac{(K_0)_{j,k,l} \cdot s_N C_{(F_i)j,k,l}^n (K_{F_i R} - 1) \cdot q_{(F_i)j,k,l}^n \cdot q_{(NH_4)j,k,l}^n}{\left(K_{NH_4} + q_{(NH_4)j,k,l}^n \right) \left(q_{(NO_3)j,k,l}^n + q_{(NO_2)j,k,l}^n \right) \exp\left(-K_{psi} q_{(NH_4)j,k,l}^n \right)} + q_{(NH_4)j,k,l}^n, \\
& \quad K_{NO_3} + \left(q_{(NO_3)j,k,l}^n + q_{(NO_2)j,k,l}^n \right)
\end{aligned}$$

– для расчета концентрации нитритов

$$\begin{aligned}
& (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(NO_2)j,k,l}^{n+1} - q_{(NO_2)j,k,l}^n}{\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(NO_2)j-1,k,l}^{n-1} - q_{(NO_2)j,k,l}^n}{2\tau} + \\
& + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(NO_2)j,k-1,l}^{n-1} - q_{(NO_2)j,k,l}^n}{2\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(NO_2)j,k,l-1}^{n-1} - q_{(NO_2)j,k,l}^n}{2\tau} + \\
& + (K_1)_{j,k,l} u_{j+1/2,k,l} \frac{q_{(NO_2)j+1,k,l}^n - q_{(NO_2)j,k,l}^n}{4h_x} + 3(K_2)_{j,k,l} u_{j-1/2,k,l} \frac{q_{(NO_2)j,k,l}^n - q_{(NO_2)j-1,k,l}^n}{4h_x} + \\
& + (K_3)_{j,k,l} v_{j,k+1/2,l} \frac{q_{(NO_2)j,k+1,l}^n - q_{(NO_2)j,k,l}^n}{4h_y} + 3(K_4)_{j,k,l} v_{j,k-1/2,l} \frac{q_{(NO_2)j,k,l}^n - q_{(NO_2)j,k-1,l}^n}{4h_y} + \\
& + (K_5)_{j,k,l} v_{j,k,l+1/2} \frac{q_{(NO_2)j,k,l+1}^n - q_{(NO_2)j,k,l}^n}{4h_z} + 3(K_6)_{j,k,l} v_{j,k,l-1/2} \frac{q_{(NO_2)j,k,l}^n - q_{(NO_2)j,k,l-1}^n}{4h_z} = \\
& = \frac{3}{2} (K_1)_{j,k,l} k_{(h)j+1/2,k,l} \frac{q_{(NO_2)j+1,k,l}^n - q_{(NO_2)j,k,l}^n}{h_x^2} - \frac{3}{2} (K_2)_{j,k,l} k_{(h)j-1/2,k,l} \frac{q_{(NO_2)j,k,l}^n - q_{(NO_2)j-1,k,l}^n}{h_x^2} - \\
& - \frac{3}{2} \left| (K_1)_{j,k,l} - (K_2)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(NO_2)j,k,l}^n}{h_x} + \frac{3}{2} (K_3)_{j,k,l} k_{(h)j,k+1/2,l} \frac{q_{(NO_2)j,k+1,l}^n - q_{(NO_2)j,k,l}^n}{h_y^2} - \\
& - \frac{3}{2} (K_4)_{j,k,l} k_{(h)j,k-1/2,l} \frac{q_{(NO_2)j,k,l}^n - q_{(NO_2)j,k-1,l}^n}{h_y^2} - \frac{3}{2} \left| (K_3)_{j,k,l} - (K_4)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(NO_2)j,k,l}^n}{h_y} + \\
& + \frac{3}{2} (K_5)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l+1/2} \frac{q_{(NO_2)j,k,l+1}^n - q_{(NO_2)j,k,l}^n}{h_z^2} - \frac{3}{2} (K_6)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l-1/2} \frac{q_{(NO_2)j,k,l}^n - q_{(NO_2)j,k,l-1}^n}{h_z^2} - \\
& - \frac{3}{2} \left| (K_5)_{j,k,l} - (K_6)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(NO_2)j,k,l}^n}{h_z} + \frac{3}{2} (K_0)_{j,k,l} \left(K_{42} q_{(NH_4)j,k,l}^n - K_{23} q_{(NO_2)j,k,l}^n \right) +
\end{aligned}$$

$$+ \frac{3}{2} \sum_{i=1}^3 \frac{(K_0)_{j,k,l} s_N C_{(F_i)j,k,l}^n (K_{F_i R} - 1) \exp(-K_{psi} q_{(NH_4)j,k,l}^n) \cdot q_{(F_i)j,k,l}^n \cdot q_{(NO_2)j,k,l}^n}{\left(q_{(NO_3)j,k,l}^n + q_{(NO_2)j,k,l}^n \right) \exp(-K_{psi} q_{(NH_4)j,k,l}^n) + \frac{q_{(NH_4)j,k,l}^n \left(K_{NO_3} + \left(q_{(NO_3)j,k,l}^n + q_{(NO_2)j,k,l}^n \right) \right)}{K_{NH_4} + q_{(NH_4)j,k,l}^n}},$$

– для расчета концентрации нитратов

$$\begin{aligned} & (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(NO_3)j,k,l}^{n+1} - q_{(NO_3)j,k,l}^n}{\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(NO_3)j-1,k,l}^n - q_{(NO_3)j,k,l}^{n-1}}{2\tau} + \\ & + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(NO_3)j,k-1,l}^n - q_{(NO_3)j,k,l}^{n-1}}{2\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(NO_3)j,k,l-1}^n - q_{(NO_3)j,k,l}^{n-1}}{2\tau} + \\ & + (K_1)_{j,k,l} u_{j+1/2,k,l} \frac{q_{(NO_3)j+1,k,l}^n - q_{(NO_3)j,k,l}^n}{4h_x} + 3(K_2)_{j,k,l} u_{j-1/2,k,l} \frac{q_{(NO_3)j,k,l}^n - q_{(NO_3)j-1,k,l}^n}{4h_x} + \\ & + (K_3)_{j,k,l} v_{j,k+1/2,l} \frac{q_{(NO_3)j,k+1,l}^n - q_{(NO_3)j,k,l}^n}{4h_y} + 3(K_4)_{j,k,l} v_{j,k-1/2,l} \frac{q_{(NO_3)j,k,l}^n - q_{(NO_3)j,k-1,l}^n}{4h_y} + \\ & + (K_5)_{j,k,l} v_{j,k,l+1/2} \frac{q_{(NO_3)j,k,l+1}^n - q_{(NO_3)j,k,l}^n}{4h_z} + 3(K_6)_{j,k,l} v_{j,k,l-1/2} \frac{q_{(NO_3)j,k,l}^n - q_{(NO_3)j,k,l-1}^n}{4h_z} = \\ & = \frac{3}{2} (K_1)_{j,k,l} k_{(h)j+1/2,k,l} \frac{q_{(NO_3)j+1,k,l}^n - q_{(NO_3)j,k,l}^n}{h_x^2} - \frac{3}{2} (K_2)_{j,k,l} k_{(h)j-1/2,k,l} \frac{q_{(NO_3)j,k,l}^n - q_{(NO_3)j-1,k,l}^n}{h_x^2} - \\ & - \frac{3}{2} \left| (K_1)_{j,k,l} - (K_2)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(NO_3)j,k,l}^n}{h_x} + \frac{3}{2} (K_3)_{j,k,l} k_{(h)j,k+1/2,l} \frac{q_{(NO_3)j,k+1,l}^n - q_{(NO_3)j,k,l}^n}{h_y^2} - \\ & - \frac{3}{2} (K_4)_{j,k,l} k_{(h)j,k-1/2,l} \frac{q_{(NO_3)j,k,l}^n - q_{(NO_3)j,k-1,l}^n}{h_y^2} - \frac{3}{2} \left| (K_3)_{j,k,l} - (K_4)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(NO_3)j,k,l}^n}{h_y} + \\ & + \frac{3}{2} (K_5)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l+1/2} \frac{q_{(NO_3)j,k,l+1}^n - q_{(NO_3)j,k,l}^n}{h_z^2} - \frac{3}{2} (K_6)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l-1/2} \frac{q_{(NO_3)j,k,l}^n - q_{(NO_3)j,k,l-1}^n}{h_z^2} - \\ & - \frac{3}{2} \left| (K_5)_{j,k,l} - (K_6)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(NO_3)j,k,l}^n}{h_z} + \frac{3}{2} (K_0)_{j,k,l} \cdot K_{23} q_{(NO_2)j,k,l}^n + \\ & + \frac{3}{2} \sum_{i=1}^3 \frac{(K_0)_{j,k,l} \cdot s_N C_{(F_i)j,k,l}^n (K_{F_i R} - 1) \exp(-K_{psi} q_{(NH_4)j,k,l}^n) \cdot q_{(F_i)j,k,l}^n \cdot q_{(NO_3)j,k,l}^n}{\left(q_{(NO_3)j,k,l}^n + q_{(NO_2)j,k,l}^n \right) \exp(-K_{psi} q_{(NH_4)j,k,l}^n) + \frac{q_{(NH_4)j,k,l}^n \left(K_{NO_3} + \left(q_{(NO_3)j,k,l}^n + q_{(NO_2)j,k,l}^n \right) \right)}{K_{NH_4} + q_{(NH_4)j,k,l}^n}}, \end{aligned}$$

– для расчета концентрации растворенного неорганического кремния

$$\begin{aligned}
& (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(Si)j,k,l}^{n+1} - q_{(Si)j,k,l}^n}{\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(Si)j-1,k,l}^n - q_{(Si)j,k,l}^{n-1}}{2\tau} + \\
& + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(Si)j,k-1,l}^n - q_{(Si)j,k-1,l}^{n-1}}{2\tau} + (K_0)_{j,k,l} \frac{q_{(Si)j,k,l-1}^n - q_{(Si)j,k,l-1}^{n-1}}{2\tau} + \\
& + (K_1)_{j,k,l} u_{j+1/2,k,l} \frac{q_{(Si)j+1,k,l}^n - q_{(Si)j,k,l}^n}{4h_x} + 3(K_2)_{j,k,l} u_{j-1/2,k,l} \frac{q_{(Si)j,k,l}^n - q_{(Si)j-1,k,l}^n}{4h_x} + \\
& + (K_3)_{j,k,l} v_{j,k+1/2,l} \frac{q_{(Si)j,k+1,l}^n - q_{(Si)j,k,l}^n}{4h_y} + 3(K_4)_{j,k,l} v_{j,k-1/2,l} \frac{q_{(Si)j,k,l}^n - q_{(Si)j,k-1,l}^n}{4h_y} + \\
& + (K_5)_{j,k,l} v_{j,k,l+1/2} \frac{q_{(Si)j,k,l+1}^n - q_{(Si)j,k,l}^n}{4h_z} + 3(K_6)_{j,k,l} v_{j,k,l-1/2} \frac{q_{(Si)j,k,l}^n - q_{(Si)j,k,l-1}^n}{4h_z} = \\
& = \frac{3}{2}(K_1)_{j,k,l} k_{(h)j+1/2,k,l} \frac{q_{(Si)j+1,k,l}^n - q_{(Si)j,k,l}^n}{h_x^2} - \frac{3}{2}(K_2)_{j,k,l} k_{(h)j-1/2,k,l} \frac{q_{(Si)j,k,l}^n - q_{(Si)j-1,k,l}^n}{h_x^2} - \\
& - \frac{3}{2} \left| (K_1)_{j,k,l} - (K_2)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(Si)j,k,l}^n}{h_x} + \frac{3}{2}(K_3)_{j,k,l} k_{(h)j,k+1/2,l} \frac{q_{(Si)j,k+1,l}^n - q_{(Si)j,k,l}^n}{h_y^2} - \\
& - \frac{3}{2}(K_4)_{j,k,l} k_{(h)j,k-1/2,l} \frac{q_{(Si)j,k,l}^n - q_{(Si)j,k-1,l}^n}{h_y^2} - \frac{3}{2} \left| (K_3)_{j,k,l} - (K_4)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(Si)j,k,l}^n}{h_y} + \\
& + \frac{3}{2}(K_5)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l+1/2} \frac{q_{(Si)j,k,l+1}^n - q_{(Si)j,k,l}^n}{h_z^2} - \frac{3}{2}(K_6)_{j,k,l} k_{(h)j,k,l-1/2} \frac{q_{(Si)j,k,l}^n - q_{(Si)j,k,l-1}^n}{h_z^2} - \\
& - \frac{3}{2} \left| (K_5)_{j,k,l} - (K_6)_{j,k,l} \right| k_{(h)j,k,l} \frac{q_{(Si)j,k,l}^n}{h_z} + \\
& + \frac{3}{2}(K_0)_{j,k,l} \cdot \left(s_{Si} C_{F_3}^n (K_{F_3R} - 1) q_{(F_3)j,k,l}^n + s_{Si} K_{F_3D} q_{(F_3)j,k,l}^n \right).
\end{aligned}$$

2.3. Построение дискретной модели гидродинамики мелководных водоемов с учетом транспорта тепла и солей

Рассмотрим систему уравнений гидродинамики мелководных водоемов с учетом транспорта тепла и солей

$$u'_t + uu'_x + vu'_y + wu'_z = -\frac{1}{\rho}P'_x + (\mu u'_x)'_x + (\mu u'_y)'_y + (v u'_z)'_z + 2\Omega(v \sin \vartheta - w \cos \vartheta), \quad (2.34)$$

$$v'_t + uv'_x + vv'_y + wv'_z = -\frac{1}{\rho}P'_y + (\mu v'_x)'_x + (\mu v'_y)'_y + (v v'_z)'_z - 2\Omega u \sin \vartheta, \quad (2.35)$$

$$w'_t + uw'_x + vw'_y + ww'_z = -\frac{1}{\rho}P'_z + (\mu w'_x)'_x + (\mu w'_y)'_y + (v w'_z)'_z + 2\Omega u \cos \vartheta + g, \quad (2.36)$$

$$\rho'_t + (\rho u)'_x + (\rho v)'_y + (\rho w)'_z = 0, \quad (2.37)$$

$$T'_t + uT'_x + vT'_y + wT'_z = (\mu T'_x)'_x + (\mu T'_y)'_y + (v T'_z)'_z + f_T, \quad (2.38)$$

$$S'_t + uS'_x + vS'_y + wS'_z = (\mu S'_x)'_x + (\mu S'_y)'_y + (v S'_z)'_z + f_S, \quad (2.39)$$

Для построения дискретной модели введем равномерную сетку:

$$\bar{w}_h = \{t^n = n\tau, x_i = ih_x, y_j = jh_y, z_k = kh_z;$$

$$n = \overline{0..N_t}, i = \overline{0..N_x}, j = \overline{0..N_y}, k = \overline{0..N_z};$$

$$N_t\tau = T, N_x h_x = l_x, N_y h_y = l_y, N_z h_z = l_z \},$$

где n, i, j, k – индексы по временной и пространственным переменным, τ, h_x, h_y, h_z – шаги по временной и пространственным переменным, l_t, l_x, l_y, l_z – длина расчетной области по временной и пространственным переменным, N_t, N_x, N_y, N_z – количество узлов по временной и пространственным переменным.

Продифференцируем уравнение (2.36) по пространственным координатам

$$P'_x = p'_x, \quad (2.40)$$

$$P'_y = p'_y, \quad (2.41)$$

$$P'_z = p'_z + \rho_0 g. \quad (2.42)$$

Дискретный аналог первой производной по времени имеет вид:

$$u'_t \approx \frac{\hat{u} - u}{\tau},$$

где u – значение поля на предыдущем n -м временном слое, \hat{u} – на текущем $(n+1)$ -м временном слое.

Для аппроксимации по временной переменной уравнения диффузии – конвекции – реакции использованы схемы с весами. Подставим уравнения (2.40)-(2.42) в систему (2.34)-(2.36) и аппроксимируем производную по времени

$$\begin{aligned} \frac{\hat{u} - u}{\tau} + u\bar{u}'_x + v\bar{u}'_y + w\bar{u}'_z = \\ = -\frac{1}{\rho} p'_x + (\mu\bar{u}'_x)'_x + (\mu\bar{u}'_y)'_y + (v\bar{u}'_z)'_z + 2\Omega(v \sin \vartheta - w \cos \vartheta), \end{aligned} \quad (2.43)$$

$$\frac{\hat{v} - v}{\tau} + u\bar{v}'_x + v\bar{v}'_y + w\bar{v}'_z = -\frac{1}{\rho} p'_y + (\mu\bar{v}'_x)'_x + (\mu\bar{v}'_y)'_y + (v\bar{v}'_z)'_z - 2\Omega u \sin \vartheta, \quad (2.44)$$

$$\begin{aligned} \frac{\hat{w} - w}{\tau} + u\bar{w}'_x + v\bar{w}'_y + w\bar{w}'_z = \\ = -\frac{1}{\rho} p'_z + (\mu\bar{w}'_x)'_x + (\mu\bar{w}'_y)'_y + (v\bar{w}'_z)'_z + 2\Omega u \cos \vartheta + g \left(\frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right), \end{aligned} \quad (2.45)$$

где $\bar{u} = \sigma \hat{u} + (1 - \sigma)u$, $\sigma \in [0, 1]$ - вес схемы.

Распишем систему уравнений (2.34)-(2.37), используя аддитивную схему расщепления по физическим процессам (MAC - метод). Этот численный метод гарантирует выполнение баланса массы (уравнение неразрывности), являясь устойчивым. Преобразуем первое слагаемое каждого уравнения

$$\begin{aligned} \frac{\hat{u} - \tilde{u} + \tilde{u} - u}{\tau} + u\bar{u}'_x + v\bar{u}'_y + w\bar{u}'_z = \\ = -\frac{1}{\rho} p'_x + (\mu\bar{u}'_x)'_x + (\mu\bar{u}'_y)'_y + (v\bar{u}'_z)'_z + 2\Omega(v \sin \vartheta - w \cos \vartheta), \end{aligned} \quad (2.46)$$

$$\begin{aligned} \frac{\hat{v} - \tilde{v} + \tilde{v} - v}{\tau} + u\bar{v}'_x + v\bar{v}'_y + w\bar{v}'_z = \\ = -\frac{1}{\rho} p'_y + (\mu\bar{v}'_x)'_x + (\mu\bar{v}'_y)'_y + (v\bar{v}'_z)'_z - 2\Omega u \sin \vartheta, \end{aligned} \quad (2.47)$$

$$\begin{aligned} \frac{\hat{w} - \tilde{w} + \tilde{w} - w}{\tau} + u_x \bar{w}' + v\bar{w}'_y + w\bar{w}'_z = -\frac{1}{\rho} p'_z + (\mu\bar{w}'_x)'_x + (\mu\bar{w}'_y)'_y + (v\bar{w}'_z)'_z + \\ + 2\Omega u \cos \vartheta + g(\rho_0 / \rho - 1) \end{aligned} \quad (2.48)$$

Разобьем каждое уравнение системы (2.46)-(2.48) на две части следующим образом

$$\frac{\tilde{u}-u}{\tau} + u\tilde{u}'_x + v\tilde{u}'_y + w\tilde{u}'_z = (\mu\tilde{u}'_x)'_x + (\mu\tilde{u}'_y)'_y + (v\tilde{u}'_z)'_z + 2\Omega(v\sin\vartheta - w\cos\vartheta), \quad (2.49)$$

$$\frac{\tilde{v}-v}{\tau} + u\tilde{v}'_x + v\tilde{v}'_y + w\tilde{v}'_z = (\mu\tilde{v}'_x)'_x + (\mu\tilde{v}'_y)'_y + (v\tilde{v}'_z)'_z - 2\Omega u \sin\vartheta, \quad (2.50)$$

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{w}-w}{\tau} + u_x\tilde{w}' + v\tilde{w}'_y + w\tilde{w}'_z = (\mu\tilde{w}'_x)'_x + (\mu\tilde{w}'_y)'_y + (v\tilde{w}'_z)'_z + \\ + 2\Omega u \cos\vartheta + g(\rho_0 / \rho - 1) \end{aligned} \quad (2.51)$$

$$\frac{\hat{u}-\tilde{u}}{\tau} = -\frac{1}{\rho} p'_x, \quad (2.52)$$

$$\frac{\hat{v}-\tilde{v}}{\tau} = -\frac{1}{\rho} p'_y, \quad (2.53)$$

$$\frac{\hat{w}-\tilde{w}}{\tau} = -\frac{1}{\rho} p'_z, \quad (2.54)$$

где \tilde{u} - значение поля на промежуточном временном слое, $\bar{u} = \frac{\tilde{u} + u}{2}$.

Система уравнений (2.49)-(2.51) представляет собой расчет скорости без учета давления, система уравнений (2.52)-(2.54) - уточнение скорости по давлению.

Уравнения (2.52)-(2.54) умножим на ρ и продифференцируем по переменным x, y, z соответственно

$$\frac{(\rho\hat{u})'_x - (\rho\tilde{u})'_x}{\tau} = -p''_{xx}, \quad (2.55)$$

$$\frac{(\rho\hat{v})'_y - (\rho\tilde{v})'_y}{\tau} = -p''_{yy}, \quad (2.56)$$

$$\frac{(\rho\hat{w})'_z - (\rho\tilde{w})'_z}{\tau} = -p''_{zz}. \quad (2.57)$$

Сложим левые и правые части уравнений (2.55)-(2.57)

$$\frac{(\rho\hat{u})'_x - (\rho\tilde{u})'_x}{\tau} + \frac{(\rho\hat{v})'_y - (\rho\tilde{v})'_y}{\tau} + \frac{(\rho\hat{w})'_z - (\rho\tilde{w})'_z}{\tau} = -p''_{xx} - p''_{yy} - p''_{zz}. \quad (2.58)$$

Подставим (2.37) в (3.58) в результате чего получим:

$$-\rho'_t - \frac{(\rho\tilde{u})'_x}{\tau} - \frac{(\rho\tilde{v})'_y}{\tau} - \frac{(\rho\tilde{w})'_z}{\tau} = -p''_{xx} - p''_{yy} - p''_{zz} \text{ или}$$

$$p''_{xx} + p''_{yy} + p''_{zz} = \rho'_t + \frac{(\rho\tilde{u})'_x}{\tau} + \frac{(\rho\tilde{v})'_y}{\tau} + \frac{(\rho\tilde{w})'_z}{\tau} \quad (2.59)$$

Уравнения (2.52)-(2.54), (2.59) и определяют метод расщепления по физическим процессам в случае переменной плотности.

Задачу расчета полей скоростей водного потока, солёности и температуры можно решить в несколько шагов.

1 шаг. Аппроксимация задачи расчета 3D полей солёности и температуры.

Запишем дискретный аналог уравнения для расчета 3D полей солёности и температуры на основе метода баланса с учетом метода заполненности ячеек. Аппроксимация уравнений (2.38), (2.39) имеет вид

$$\begin{aligned} & (q_0)_{i,j,k} \frac{\widehat{T}_{i,j,k} - T_{i,j,k}}{\tau} + \\ & + (q_1)_{i,j,k} u_{i+1/2,j,k} \frac{\bar{T}_{i+1,j,k} - \bar{T}_{i,j,k}}{2h_x} + (q_2)_{i,j,k} u_{i-1/2,j,k} \frac{\bar{T}_{i,j,k} - \bar{T}_{i-1,j,k}}{2h_x} + \\ & + (q_3)_{i,j,k} v_{i,j+1/2,k} \frac{\bar{T}_{i,j+1,k} - \bar{T}_{i,j,k}}{2h_y} + (q_4)_{i,j,k} v_{i,j-1/2,k} \frac{\bar{T}_{i,j,k} - \bar{T}_{i,j-1,k}}{2h_y} + \\ & + (q_5)_{i,j,k} w_{i,j,k+1/2} \frac{\bar{T}_{i,j,k+1} - \bar{T}_{i,j,k}}{2h_z} + (q_6)_{i,j,k} w_{i,j,k-1/2} \frac{\bar{T}_{i,j,k} - \bar{T}_{i,j,k-1}}{2h_z} = \\ & = (q_1)_{i,j,k} \mu_{i+1/2,j,k} \frac{\bar{T}_{i+1,j,k} - \bar{T}_{i,j,k}}{h_x^2} - (q_2)_{i,j,k} \mu_{i-1/2,j,k} \frac{\bar{T}_{i,j,k} - \bar{T}_{i-1,j,k}}{h_x^2} + \\ & + (q_3)_{i,j,k} \mu_{i,j+1/2,k} \frac{\bar{T}_{i,j+1,k} - \bar{T}_{i,j,k}}{h_y^2} - (q_4)_{i,j,k} \mu_{i,j-1/2,k} \frac{\bar{T}_{i,j,k} - \bar{T}_{i,j-1,k}}{h_y^2} + \\ & + (q_5)_{i,j,k} \nu_{i,j,k+1/2} \frac{\bar{T}_{i,j,k+1} - \bar{T}_{i,j,k}}{h_z^2} - (q_6)_{i,j,k} \nu_{i,j,k-1/2} \frac{\bar{T}_{i,j,k} - \bar{T}_{i,j,k-1}}{h_z^2} + (q_0)_{i,j,k} (f_T)_{i,j,k}, \end{aligned} \quad (2.60)$$

где u, v, w и T - значения компонент вектора скорости течения и поля температуры на предыдущем n -м временном слое соответственно, \widehat{T} - на текущем $(n+1)$ -м временном слое, $\bar{T} = \sigma\widehat{T} + (1 - \sigma)T$, $\sigma \in [0, 1]$ - вес схемы.

Дискретное уравнение для расчета поля солёности строится аналогично.

Поле плотности $\rho(T, S)$ рассчитывается по формуле (1.71) для каждого узла (i, j, k) на текущем временном слое $(n+1)$.

2 шаг. Аппроксимация задачи расчета поля скорости течения на промежуточном временном слое.

Дискретный аналог уравнения (2.34) для расчета вектора скорости на промежуточном временном слое имеет вид

$$\begin{aligned}
& (q_0)_{i,j,k} \frac{\tilde{u}_{i,j,k} - u_{i,j,k}}{\tau} + \\
& + (q_1)_{i,j,k} u_{i+1/2,j,k} \frac{\bar{u}_{i+1,j,k} - \bar{u}_{i,j,k}}{2h_x} + (q_2)_{i,j,k} u_{i-1/2,j,k} \frac{\bar{u}_{i,j,k} - \bar{u}_{i-1,j,k}}{2h_x} + \\
& + (q_3)_{i,j,k} v_{i,j+1/2,k} \frac{\bar{u}_{i,j+1,k} - \bar{u}_{i,j,k}}{2h_y} + (q_4)_{i,j,k} v_{i,j-1/2,k} \frac{\bar{u}_{i,j,k} - \bar{u}_{i,j-1,k}}{2h_y} + \\
& + (q_5)_{i,j,k} v_{i,j,k+1/2} \frac{\bar{u}_{i,j,k+1} - \bar{u}_{i,j,k}}{2h_z} + (q_6)_{i,j,k} v_{i,j,k-1/2} \frac{\bar{u}_{i,j,k} - \bar{u}_{i,j,k-1}}{2h_z} = \quad (2.61) \\
& = (q_1)_{i,j,k} \mu_{i+1/2,j,k} \frac{\bar{u}_{i+1,j,k} - \bar{u}_{i,j,k}}{h_x^2} - (q_2)_{i,j,k} \mu_{i-1/2,j,k} \frac{\bar{u}_{i,j,k} - \bar{u}_{i-1,j,k}}{h_x^2} + \\
& + (q_3)_{i,j,k} \mu_{i,j+1/2,k} \frac{\bar{u}_{i,j+1,k} - \bar{u}_{i,j,k}}{h_y^2} - (q_4)_{i,j,k} \mu_{i,j-1/2,k} \frac{\bar{u}_{i,j,k} - \bar{u}_{i,j-1,k}}{h_y^2} + \\
& + (q_5)_{i,j,k} v_{i,j,k+1/2} \frac{\bar{u}_{i,j,k+1} - \bar{u}_{i,j,k}}{h_z^2} - (q_6)_{i,j,k} v_{i,j,k-1/2} \frac{\bar{u}_{i,j,k} - \bar{u}_{i,j,k-1}}{h_z^2} + \\
& + \left((q_5)_{i,j,k} - (q_6)_{i,j,k} \right) H \left((q_5)_{i,j,k} - (q_6)_{i,j,k} \right) \frac{\rho_a C_p \left(\left| \vec{V}_a - \vec{V} \right| \right) \left(u_a - u_{i,j,k} \right) \left| \vec{V}_a - \vec{V} \right|}{\rho h_z} -
\end{aligned}$$

$$-\left((q_6)_{i,j,k} - (q_5)_{i,j,k}\right) H\left((q_6)_{i,j,k} - (q_5)_{i,j,k}\right) \frac{\rho_v C_p \left(|\vec{V}|\right) u |\vec{V}|}{\rho h_z} + 2\Omega (v_{i,j,k} \sin \vartheta - w_{i,j,k} \cos \vartheta),$$

где $\vec{V}_a = \{u_a, v_a\}$ – скорость ветра, $H(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x \geq 0 \end{cases}$ – функция Хэвисайда.

3 шаг. Аппроксимация задачи расчета давления.

Дискретный аналог уравнения (2.59) для расчета давления запишется следующим образом

$$\begin{aligned} & (q_1)_{i,j,k} \frac{\hat{p}_{i+1,j,k} - \hat{p}_{i,j,k}}{h_x^2} - (q_2)_{i,j,k} \frac{\hat{p}_{i,j,k} - \hat{p}_{i-1,j,k}}{h_x^2} + (q_3)_{i,j,k} \frac{\hat{p}_{i,j+1,k} - \hat{p}_{i,j,k}}{h_y^2} - \\ & - (q_4)_{i,j,k} \frac{\hat{p}_{i,j,k} - \hat{p}_{i,j-1,k}}{h_y^2} + (q_5)_{i,j,k} \frac{\hat{p}_{i,j,k+1} - \hat{p}_{i,j,k}}{h_z^2} - (q_6)_{i,j,k} \frac{\hat{p}_{i,j,k} - \hat{p}_{i,j,k-1}}{h_z^2} + \\ & + \left((q_5)_{i,j,k} - (q_6)_{i,j,k} \right) H\left((q_5)_{i,j,k} - (q_6)_{i,j,k} \right) \left(\frac{\hat{p}_{i,j,k} - p_{i,j,k}}{\tau^2 h_z g} + \frac{\omega \hat{\rho}_{i,j,k}}{\tau h_z} \right) = \\ & = (q_0)_{i,j,k} \frac{\hat{\rho}_{i,j,k} - \rho_{i,j,k}}{\tau^2} + \frac{(q_1)_{i,j,k} (\hat{\rho} \tilde{u})_{i+1/2,j,k} - (q_2)_{i,j,k} (\hat{\rho} \tilde{u})_{i-1/2,j,k}}{\tau h_x} + \\ & + \frac{(q_3)_{i,j,k} (\hat{\rho} \tilde{v})_{i,j+1/2,k} - (q_4)_{i,j,k} (\hat{\rho} \tilde{v})_{i,j-1/2,k}}{\tau h_y} + \\ & + \frac{(q_5)_{i,j,k} (\hat{\rho} \tilde{w})_{i,j,k+1/2} - (q_6)_{i,j,k} (\hat{\rho} \tilde{w})_{i,j,k-1/2}}{\tau h_z} + \\ & + \left(\frac{(q_2)_{i,j,k} - (q_1)_{i,j,k}}{\tau h_x} (\hat{\rho} \tilde{u})_{i,j,k} + \frac{(q_4)_{i,j,k} - (q_3)_{i,j,k}}{\tau h_y} (\hat{\rho} \tilde{v})_{i,j,k} \right) m_{i,j,k}, \end{aligned} \quad (2.62)$$

где $\hat{\rho}$, ρ – плотность водной среды на текущем $(n+1)$ -м и предыдущем n -м временных слоях; \tilde{u} – значение поля на промежуточном временном слое; $(\hat{\rho} \tilde{u})_{i+1/2,j,k} = (\hat{\rho}_{i+1,j,k} \tilde{u}_{i+1,j,k} + \hat{\rho}_{i,j,k} \tilde{u}_{i,j,k})/2$, $m_{i,j,k}$ – маска граничного условия. Для граничных узлов (боковая или верхняя граница) $m_{i,j,k} = 0$, иначе (на входе или на выходе) – $m_{i,j,k} = 1$.

4 шаг. Аппроксимация задачи получения поля скорости водного потока с учетом давления.

Дискретный аналог системы уравнений (2.52) - (2.54) имеет вид

$$(q_0)_{i,j,k} \frac{\hat{u}_{i,j,k} - \tilde{u}_{i,j,k}}{\tau} = - \left((q_1)_{i,j,k} \frac{\hat{p}_{i+1,j,k} - \hat{p}_{i,j,k}}{2h_x \hat{\rho}_{i,j,k}} + (q_2)_{i,j,k} \frac{\hat{p}_{i,j,k} - \hat{p}_{i-1,j,k}}{2h_x \hat{\rho}_{i,j,k}} \right),$$

$$(q_0)_{i,j,k} \frac{\hat{v}_{i,j,k} - \tilde{v}_{i,j,k}}{\tau} = - \left((q_3)_{i,j,k} \frac{\hat{p}_{i,j,k+1} - \hat{p}_{i,j,k}}{2h_y \hat{\rho}_{i,j,k}} + (q_4)_{i,j,k} \frac{\hat{p}_{i,j,k} - \hat{p}_{i,j,k-1}}{2h_y \hat{\rho}_{i,j,k}} \right),$$

$$(q_0)_{i,j,k} \frac{\hat{w}_{i,j,k} - \tilde{w}_{i,j,k}}{\tau} = - \left((q_5)_{i,j,k} \frac{\hat{p}_{i,j,k+1} - \hat{p}_{i,j,k}}{2h_z \hat{\rho}_{i,j,k}} + (q_6)_{i,j,k} \frac{\hat{p}_{i,j,k} - \hat{p}_{i,j,k-1}}{2h_z \hat{\rho}_{i,j,k}} \right).$$

2.4. Краткие выводы по главе 2

Во второй главе построен дискретный аналог непрерывной модели трансформации форм фосфора, азота и кремния и динамики фитопланктона. Уравнения конвекции-диффузии используются при решении многих прикладных задач: задач моделирования гидродинамики мелководных водоемов, аэродинамики, переноса веществ и др. Стандартные схемы непригодны для решения задач, в которых ставится условие преобладания конвекции над диффузией, так как имеют недостаточную точность аппроксимации. Для решения подобных задач предложена трехслойная разностная схема, представляющая собой линейную комбинацию схемы «кабаре» и центральной разностной схемы. Проведено исследование устойчивости и показано, что предложенная схема устойчива при числах Куранта, находящихся в интервале $[0, 0.75]$, и больших значениях сеточного числа Пекле ($Pe > 2$). Для исследования точности предложенной разностной схемы была решена двумерная задача конвекции-диффузии при различных значениях сеточного числа Пекле. В предельном случае ($Pe \rightarrow \infty$) показано, что погрешность численного решения модельной задачи на основе предложенной разностной схемы в 2.248 раз меньше, чем погрешность при решении с помощью схемы «кабаре». Для модели биогеохимических циклов в водных экосистемах на основе предложенной разностной схемы построена дискретная модель, учитывающая заполненности контрольных объемов.

**ГЛАВА 3. ВЫБОР ИТЕРАЦИОННОГО МЕТОДА РЕШЕНИЯ
СИСТЕМ СЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ЗАДАЧ МОДЕЛИРОВАНИЯ
БИОГЕОХИМИЧЕСКИХ ЦИКЛОВ В МЕЛКОВОДНЫХ ВОДОЕМАХ.
ПОДБОР ЗНАЧЕНИЙ ПАРАМЕТРОВ СИСТЕМЫ
И НАЧАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ**

**3.1. Обзор некоторых итерационных методов для решения систем
линейных алгебраических уравнений**

Для решения задач конвекции-диффузии-реакции была построена библиотека итерационных методов, которая включает в себя:

- метод Якоби;
- метод Зейделя;
- метод верхней релаксации (МВР);
- метод скорейшего спуска (МСС);
- метод минимальных невязок (ММН);
- модифицированный попеременно-треугольный метод скорейшего спуска (МПТМСС).

Метод Якоби

Рассмотрим систему линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N a_{ij} u_j = f_i, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (3.1)$$

Итерационный метод Якоби имеет вид

$$y_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(f_i - \sum_{i \neq j} a_{ij} y_j^{(k)} \right), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (3.2)$$

где k - счетчик итерации и предполагается, что элементы главной диагонали a_{ii} не равны нулю.

Достаточным условием сходимости метода Якоби является диагональное преобладание элементов матрицы A [119]

$$\sum_{i \neq j} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| < 1. \quad (3.3)$$

Окончание итераций определяется либо заданием максимального числа итераций n_0 , либо условием

$$\max_{1 \leq i \leq N} |y_i^{(k+1)} - y_i^{(k)}| < \varepsilon, \quad (3.4)$$

где ε - заданное число.

Метод Зейделя

Рассмотрим систему линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N a_{ij} u_j = f_i, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (3.5)$$

Итерационный метод Зейделя имеет вид

$$y_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(- \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} y_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^N a_{ij} y_j^{(k)} + f_i \right), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (3.6)$$

где k - счетчик итерации и предполагается, что элементы главной диагонали a_{ii} отличны от нуля.

Запишем эту формулу в векторном виде. Матрицу A представим в виде

$$A = L + D + U,$$

$$\text{где } L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_{21} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{N1} & a_{N2} & \dots & 0 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & a_{NN} \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \dots & a_{1N} \\ 0 & 0 & \dots & a_{2N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}.$$

Получаем формулу для метода Зейделя в векторном виде

$$(D + L)y^{(k+1)} + Uy^{(k)} = f, \quad k = 0, 1, \dots \quad (3.7)$$

Запишем эту схему в каноническом виде

$$(D + L)(y^{(k+1)} - y^{(k)}) + Ay^{(k)} = f, \quad k = 0, 1, \dots, \quad y^{(0)} \in H. \quad (3.8)$$

Для сходимости этого метода в H_A при любом начальном приближении достаточно, чтобы оператор A был самосопряжен и положительно определен в H [119].

Метод верхней релаксации

Введем в схему метода Зейделя итерационный параметр ω [119]

$$(D + \omega L) \frac{y^{(k+1)} - y^{(k)}}{\omega} + Ay^{(k)} = f, \quad k = 0, 1, \dots, \quad y^{(0)} \in H. \quad (3.9)$$

Итерационный метод (3.9) при $\omega > 1$ называется методом верхней релаксации, при $\omega = 1$ - методом полной релаксации или метод Зейделя, при $\omega < 1$ - методом нижней релаксации.

Для сходимости метода релаксации в H_A к условиям сходимости для метода Зейделя добавляется еще одно – на итерационный параметр ω . Таким образом. Достаточными условиями для сходимости метода релаксации будут самосопряженность и положительная определенности оператора A и условие $0 < \omega < 2$.

Метод скорейшего спуска

Этот метод описан в работе Самарского А.А., Николаева Е.С. [119]. Необходимо решить операторное уравнение

$$Au = f \quad (3.10)$$

с самосопряженным и положительно определенным оператором A . Задача рассматривается в конечномерном гильбертовом пространстве H . Итерационные приближения вычисляются по двухслойной схеме

$$B \frac{y_{k+1} - y_k}{\tau_{k+1}} + Ay_k = f, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (3.11)$$

где B – положительно определенный оператор ($B > 0$).

Итерационные параметры τ_{k+1} для неявного процесса находятся по формуле

$$\tau_{k+1} = \frac{(r_k, \omega_k)}{(A\omega_k, \omega_k)}, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (3.12)$$

где $\omega_k = B^{-1}r_k$ - поправка, $r_k = Ay_k - f$ - невязка.

Метод минимальных невязок

Решается операторное уравнение [119]

$$Au = f \quad (3.13)$$

с несамосопряженным и невырожденным оператором A . Задача рассматривается в конечномерном гильбертовом пространстве H . Итерационные приближения вычисляются по двухслойной схеме

$$B \frac{y_{k+1} - y_k}{\tau_{k+1}} + Ay_k = f, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (3.14)$$

где B^*A – положительно определенный оператор.

Итерационные параметры τ_{k+1} для неявного процесса находятся по формуле

$$\tau_{k+1} = \frac{(A\omega_k, r_k)}{(A\omega_k, A\omega_k)}, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (3.15)$$

где $\omega_k = B^{-1}r_k$ – поправка, $r_k = Ay_k - f$ – невязка.

Модифицированный попеременно-треугольный метод скорейшего спуска

Решается операторное уравнение

$$Ax = f, \quad A: H \rightarrow H, \quad (3.16)$$

где A – линейный, положительно определенный оператор ($A > 0$). Задача рассматривается в конечномерном гильбертовом пространстве H . Для нахождения решения задачи (3.16) будем использовать неявный итерационный процесс

$$B \frac{x^{m+1} - x^m}{\tau_{m+1}} + Ax^m = f, \quad B: H \rightarrow H. \quad (3.17)$$

В уравнении (3.17) m – номер итерации, $\tau > 0$ – итерационный параметр, а B – некоторый обратимый оператор, который называется предобуславливателем или стабилизатором. Обращение оператора B в (3.17) должно быть существенно проще, чем непосредственное обращение исходного оператора A в (3.16). Оператор B построен, исходя из аддитивного представления оператора A_0 – симметричной части оператора A

$$A_0 = R_1 + R_2, \quad R_1 = R_2^*, \quad (3.18)$$

где $A = A_0 + A_1$, $A_0 = A_0^*$, $A_1 = -A_1^*$.

Оператор-предобуславливатель запишется в следующем виде

$$B = (D + \omega R_1)D^{-1}(D + \omega R_2), \quad D = D^* > 0, \quad \omega > 0, \quad (3.19)$$

где D – некоторый оператор.

Соотношения (3.18), (3.19) задают модифицированный попеременно-треугольный метод (МПТМ) решения сеточных уравнений [132], если определены операторы R_1, R_2 и указаны способы определения параметров τ_{m+1} , ω и оператора D .

Алгоритм модифицированного попеременно-треугольного метода скорейшего спуска для решения сеточных уравнений имеет вид [82]

$$r^m = Ax^m - f,$$

$$B(\omega_m)\omega^m = r^m,$$

$$\hat{\omega}_m = \frac{2\|\omega^m\|}{\|A\omega^m\|},$$

$$\tau_{m+1} = \hat{\omega}_m + \frac{2\|\omega^m\|^2}{(A\omega^m, \omega^m)}, \quad (3.20)$$

$$x^{m+1} = x^m - \tau_{m+1}\omega^m,$$

$$\omega_{m+1} = \hat{\omega}_m.$$

3.2. Сравнение разностных схем и итерационных методов решения сеточных уравнений диффузии-конвекции-реакции

3.2.1. Сравнение итерационных методов на примере решения системы сеточных уравнений для задач моделирования биогеохимических циклов в мелководных водоемах

Проведем сравнение итерационных методов решения сеточных уравнений диффузии-конвекции-реакции (8). В таблице 3.1 приведено сравнение значений числа итераций для итерационных методов решения задачи моделирования биогеохимических циклов в мелководных водоемах.

Таблица 3.1 – Сравнение значений числа итераций для итерационных методов решения задачи биогеохимических циклов в мелководных водоемах

Шаг τ	Матрица	Метод Якоби	МСС (по поправке)	ММН	Метод Зейделя	МВР	МШТМСС
0.01	F1	9	26	27	6	52	6
	F2	9	26	27	6	52	6
	F3	10	27	29	6	57	6
	POP	4	6	7	1	1	3
	DOP	5	9	9	2	14	4
	PO ₄	6	15	16	4	28	5
	NH ₄	8	20	21	5	37	5
	NO ₂	6	13	14	3	23	4
	NO ₃	7	19	20	4	36	5
	Si	5	10	11	2	16	4
0.1	F1	36	60	61	19	85	11
	F2	36	60	61	19	85	11
	F3	38	64	64	20	90	11
	POP	9	10	10	2	8	5
	DOP	16	22	23	6	25	7
	PO ₄	24	38	38	12	50	9
	NH ₄	29	48	48	15	65	9
	NO ₂	23	36	37	11	47	9
	NO ₃	29	47	48	15	64	9
	Si	18	26	26	8	31	7
1	F1	291	294	317	131	109	24
	F2	291	294	317	131	109	24
	F3	305	310	334	139	114	24
	POP	113	103	116	37	36	12
	DOP	144	133	152	54	48	14
	PO ₄	220	216	238	94	79	20
	NH ₄	256	255	278	113	94	21
	NO ₂	254	254	277	112	94	21
	NO ₃	272	273	296	121	101	23
	Si	169	159	180	67	59	16
10	F1	2830	2859	2917	1211	172	70
	F2	2830	2859	2917	1211	172	70
	F3	2974	3007	3063	1284	180	74
	POP	1583	1591	1646	578	101	52
	DOP	1881	1893	1951	730	118	51
	PO ₄	2581	2605	2663	1085	158	65
	NH ₄	2917	2949	3006	1256	177	72
	NO ₂	3359	3399	3454	1479	201	88
	NO ₃	4005	1057	4109	1806	234	110
	Si	2081	2095	2154	832	130	58
100	F1	28219	30451	28727	11864	1590	511
	F2	28219	30451	28727	11864	1590	511
	F3	29659	31921	30193	12585	1669	531
	POP	20416	22529	20800	7960	1165	367
	DOP	25965	28177	26445	10737	1468	218

	PO ₄	30266	32551	30819	12888	1702	499
	NH ₄	33662	36005	34273	14587	1887	565
	NO ₂	42668	45171	43431	19089	2377	568
	NO ₃	54194	57423	56771	24624	2982	996
	Si	25335	27533	25802	10422	1433	543

3.2.2. Сравнение двухслойной и трехслойной итерационных схем для решения сеточных уравнений диффузии-конвекции-реакции

В книге Самарского А.А. и Николаева Е.С. [119] описаны двухслойный и трехслойный методы сопряженных направлений. Рассмотрим задачу нахождения приближенного решения линейного операторного уравнения

$$Au = f, \quad (3.21)$$

где A – симметричный положительно определенный оператор, действующий в вещественном гильбертовом пространстве H .

Неявная двухслойная итерационная схема градиентного метода имеет вид [121]:

$$B \frac{y_{k+1} - y_k}{\tau_{k+1}} + Ay_k = f, \quad k = 0, 1, \dots$$

или

$$By_{k+1} = (1 - \tau_{k+1}A)y_k + \tau_{k+1}f, \quad k = 0, 1, \dots \quad (3.22)$$

Норма погрешности $z_k = y_k - u$ будет минимальной для любого k при

$$\tau_{k+1} = \frac{(Cx_k, x_k)}{(Cx_k, Cx_k)}, \quad (3.23)$$

где $x_k = D^{1/2}z_k$, $C = D^{-1/2}(DB^{-1}A)D^{-1/2}$.

Двухслойный градиентный метод сходится за $n_0(\varepsilon) = \ln \varepsilon / \ln \rho$ итераций, где $\varepsilon > 0$ - точность вычислений, $\rho = \min_{\tau} \|E - \tau C\|$.

Трехслойная схема метода сопряженных направлений записывается следующим образом:

$$By_{k+1} = \alpha_{k+1}(B - \tau_{k+1}A)y_k + (1 - \alpha_{k+1})By_{k-1} + \alpha_{k+1}\tau_{k+1}f, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (3.24)$$

$$By_1 = (B - \tau_1A)y_0 + \tau_1f, \quad y_0 \in H.$$

Норма погрешности $z_k = y_k - u$ будет минимальной для любого k при

$$\tau_{k+1} = \frac{(Cx_k, x_k)}{(Cx_k, Cx_k)}, \quad (3.25)$$

$$\alpha_{k+1} = \left(1 - \frac{\tau_{k+1}}{\tau_k} \frac{(Cx_k, x_k)}{(Cx_{k-1}, x_{k-1})} \frac{1}{\alpha_1} \right)^{-1}, \quad (3.26)$$

где $x_k = D^{1/2} z_k$, $C = D^{-1/2} (DB^{-1}A) D^{-1/2}$.

В работе [121] отмечается, что методы сопряженных направлений сходятся существенно быстрее, чем градиентные методы. То есть если $H = H_N$ - конечномерное пространство, то методы сопряженных направлений сходятся за конечное число итераций, не превышающее размерность этого пространства.

Для сравнения скорости сходимости двух- и трехслойных итерационных методов выберем метод скорейшего спуска (двухслойный) и метод сопряженных градиентов (трехслойный). Проведем эксперимент для простейшего двумерного уравнения конвекции-диффузии

$$q'_t + uq'_x + vq'_y = \mu q'_{xx} + \mu q'_{yy}, \text{ где } u, \mu = \text{const}.$$

Таблица 3.2 – Сравнение количества итераций
для двух- и трехслойных методов.

Шаг по времени	Метод скорейшего спуска	Метод сопряженных градиентов
0,01	6	5
0,1	13	10
1	70	25
10	605	78
100	5215	216

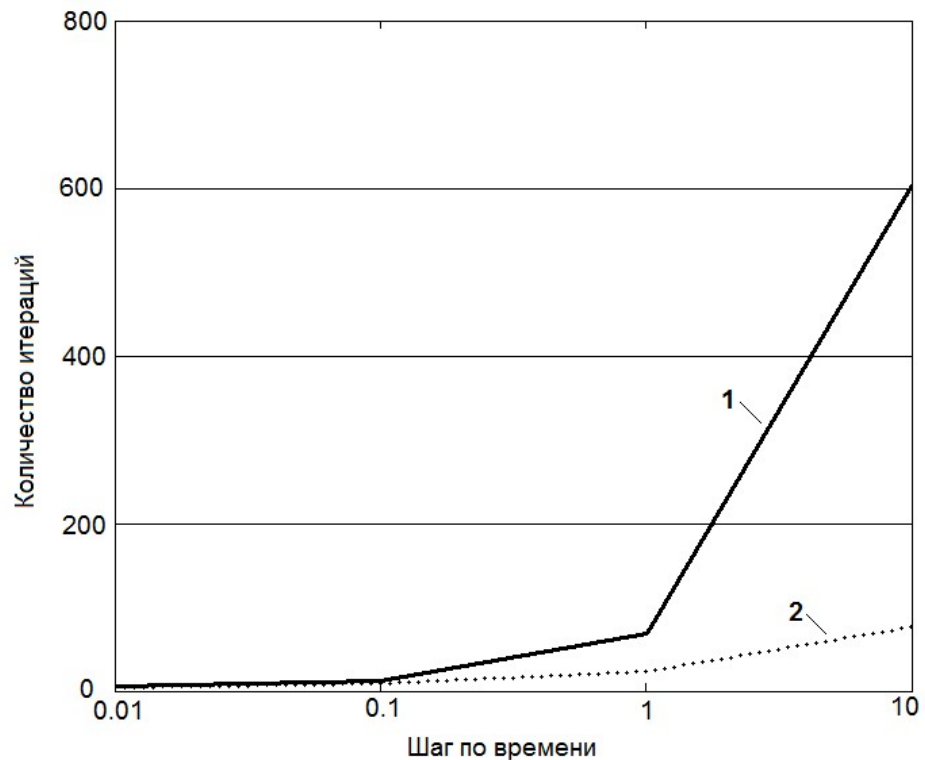


Рисунок 3.1 – Зависимость количества итераций от шага по времени для двухслойного метода скорейшего спуска (1) и трехслойного метода сопряженных градиентов (2)

Из таблицы 3.2 и рисунка 3.1 видно, что трехслойный метод сопряженных градиентов сходится существенно быстрее, чем двухслойный метод скорейшего спуска, при этом количество итераций не превышает размерности пространства.

3.2.3. О четырехслойной итерационной схеме

Рассмотрим задачу нахождения приближенного решения линейного операторного уравнения (3.21). Ниже приведено исследование четырехслойной итерационной схемы [101]. Условия устойчивости такой схемы получены в работе [120].

Четырехслойная итерационная схема решения сеточных уравнений имеет вид

$$By_{k+1} = \beta_{k+1}(B - \tau_{k+1}A)y_k + (1 - \alpha_{k+1})By_{k-1} + (\alpha_{k+1} - \beta_{k+1})By_{k-2} + \beta_{k+1}\tau_{k+1}f, \quad (3.27)$$

для $k = 2, 3, \dots$, $By_1 = \beta_1(B - \tau_1A)y_0 + \tau_1f$,

$$By_2 = \beta_2(B - \tau_2 A)y_1 + (1 - \alpha_2)By_0 + \beta_2\tau_2 f, \quad y_0 \in H.$$

Необходимо найти параметры $\{\tau_k\}$, $\{\alpha_k\}$ и $\{\beta_k\}$, при которых норма эквивалентной погрешности $x_k = y_k - u$ была бы минимальной для любого k .

Рассчитаем параметры схемы. Перепишем (3.27) в виде

$$B \frac{(y_{k+1} + (\alpha_{k+1} - 1)y_{k-1} + (\beta_{k+1} - \alpha_{k+1})y_{k-2})/\beta_{k+1} - y_k}{\tau_{k+1}} = f - Ay_k.$$

Действительно, для уравнения погрешности схемы (3.27)

$$\frac{x_{k+1} + (\alpha_{k+1} - 1)x_{k-1} + (\beta_{k+1} - \alpha_{k+1})x_{k-2}}{\beta_{k+1}} - x_k = -\tau_{k+1}Cx_k, \quad C = B^{-1}A$$

ИЛИ

$$x_{k+1} = \beta_{k+1}(E - \tau_{k+1}C)x_k + (1 - \alpha_{k+1})x_{k-1} + (\alpha_{k+1} - \beta_{k+1})x_{k-2}. \quad (3.28)$$

Для минимизации нормы x_n в H ($n \geq 1$) необходимо и достаточно, чтобы

$$(x_{k+1}, Cx_j) = 0, \quad j = \overline{0, k}, \quad (3.29)$$

ИЛИ

$$(x_{k+1}, Cx_j) = -\beta_{k+1}\tau_{k+1}(Cx_k, Cx_j) = 0. \quad (3.30)$$

При $k=j$ получим $(x_{k+1}, Cx_k) = -\beta_{k+1}\tau_{k+1}(Cx_k, Cx_k)$.

Из (3.28), (3.29) следует

$$(Cx_{k-2}, x_{k+1}) = \beta_{k+1}(Cx_{k-2}, (E - \tau_{k+1}C)x_k) + (1 - \alpha_{k+1})(Cx_{k-2}, x_{k-1}) + (\alpha_{k+1} - \beta_{k+1})(Cx_{k-2}, x_{k-2}),$$

$$(Cx_{k-1}, x_{k+1}) = \beta_{k+1}(Cx_{k-1}, (E - \tau_{k+1}C)x_k) + (1 - \alpha_{k+1})(Cx_{k-1}, x_{k-1}) + (\alpha_{k+1} - \beta_{k+1})(Cx_{k-1}, x_{k-2}),$$

$$(Cx_k, x_{k+1}) = \beta_{k+1}(Cx_k, (E - \tau_{k+1}C)x_k) + (1 - \alpha_{k+1})(Cx_k, x_{k-1}) + (\alpha_{k+1} - \beta_{k+1})(Cx_k, x_{k-2}).$$

Запишем систему для расчета $\{\tau_k\}$, $\{\alpha_k\}$ и $\{\beta_k\}$

$$\begin{cases} -\tau_{k+1}\beta_{k+1}(Cx_{k-2}, Cx_k) + (\alpha_{k+1} - \beta_{k+1})(Cx_{k-2}, x_{k-2}) = 0 \\ -\tau_{k+1}\beta_{k+1}(Cx_{k-1}, Cx_k) + (1 - \alpha_{k+1})(Cx_{k-1}, x_{k-1}) = 0 \\ (Cx_k, x_k) - \tau_{k+1}(Cx_k, Cx_k) = 0 \end{cases}$$

Преобразуем систему уравнений

$$\begin{cases} \beta_{k+1} = \alpha_{k+1} \frac{(Cx_{k-2}, x_{k-2})}{(Cx_{k-2}, x_{k-2}) + \tau_{k+1}(Cx_{k-2}, Cx_k)}, \\ \tau_{k+1}\alpha_{k+1} \frac{(Cx_{k-2}, x_{k-2})(Cx_{k-1}, Cx_k)}{(Cx_{k-2}, x_{k-2}) + \tau_{k+1}(Cx_{k-2}, Cx_k)} + \alpha_{k+1}(Cx_{k-1}, x_{k-1}) = (Cx_{k-1}, x_{k-1}), \\ \tau_{k+1} = \frac{(Cx_k, x_k)}{(Cx_k, Cx_k)}, \end{cases}$$

Введем обозначение $\varphi_{k+1} = \frac{(Cx_{k-2}, x_{k-2})}{(Cx_{k-2}, x_{k-2}) + \tau_{k+1}(Cx_{k-2}, Cx_k)}$, тогда

$$\tau_{k+1} = \frac{(Cx_k, x_k)}{(Cx_k, Cx_k)}, \quad \alpha_{k+1} = \frac{(Cx_{k-1}, x_{k-1})}{(Cx_{k-1}, x_{k-1}) + \tau_{k+1}\varphi_{k+1}(Cx_{k-1}, Cx_k)},$$

$$\beta_{k+1} = \alpha_{k+1}\varphi_{k+1}. \quad (3.31)$$

Преобразуем выражение (3.28)

$$Cx_{k-2} = (-x_{k-1} + \beta_{k-1}x_{k-2} + (1 - \alpha_{k-1})x_{k-3} + (\alpha_{k-1} - \beta_{k-1})x_{k-4}) / (\tau_{k-1}\beta_{k-1}).$$

Запишем выражение (Cx_{k-2}, Cx_k) с учетом полученного выражения

$$\begin{aligned} (Cx_{k-2}, Cx_k) &= \\ &= \left((-x_{k-1} + \beta_{k-1}x_{k-2} + (1 - \alpha_{k-1})x_{k-3} + (\alpha_{k-1} - \beta_{k-1})x_{k-4}) / (\tau_{k-1}\beta_{k-1}), Cx_k \right) = 0. \end{aligned}$$

Таким образом, получим $\varphi_{k+1} = 1$. Следовательно, $\beta_{k+1} \equiv \alpha_{k+1}$.

В итоге выражение (3.28) преобразуется к виду

$$x_{k+1} = \alpha_{k+1}(E - \tau_{k+1}C)x_k + (1 - \alpha_{k+1})x_{k-1}. \quad (3.32)$$

В итоге получили, что x_{k+1} зависит только от x_k , x_{k-1} и не зависит от x_n , $n = \overline{0, k-2}$. Другими словами, доказано, что четырехслойная итерационная схема решения сеточных уравнений преобразуется к трехслойной схеме.

3.3. Исследование стационарных решений задачи динамики фитопланктона с учетом трансформации соединений фосфора, азота и кремния

Уточним параметры модели динамики фитопланктона с учетом трансформации соединений фосфора, азота и кремния (1.23)-(1.28), при которых наступают стационарные режимы [100].

Рассмотрим случай пространственно-равномерного распределения субстанций (фитопланктона, форм фосфора, азота и кремния):

$$\begin{aligned} \frac{dq_{F_i}}{dt} &= C_{F_i} (1 - K_{F_iR}) q_{F_i} - K_{F_iD} q_{F_i} - K_{F_iE} q_{F_i}, \quad i = \overline{1,3}, \\ \frac{dq_{POP}}{dt} &= \sum_{i=1}^3 s_P K_{F_iD} q_{F_i} - K_{PD} q_{POP} - K_{PN} q_{POP}, \\ \frac{dq_{DOP}}{dt} &= \sum_{i=1}^3 s_P K_{F_iE} q_{F_i} + K_{PD} q_{POP} - K_{DN} q_{DOP}, \\ \frac{dq_{PO_4}}{dt} &= \sum_{i=1}^3 s_P C_{F_i} (K_{F_iR} - 1) q_{F_i} + K_{PN} q_{POP} + K_{DN} q_{DOP}, \quad (3.33) \\ \frac{dq_{NH_4}}{dt} &= \sum_{i=1}^3 s_N C_{F_i} (K_{F_iR} - 1) \frac{f_N^{(2)}(NH_4)}{f_N(NO_3, NO_2, NH_4)} q_{F_i} + \sum_{i=1}^3 s_N (K_{F_iD} + K_{F_iE}) q_{F_i} - K_{42} q_{NH_4}, \\ \frac{dq_{NO_2}}{dt} &= \sum_{i=1}^3 s_N C_{F_i} (K_{F_iR} - 1) \frac{f_N^{(1)}(NO_3, NO_2, NH_4)}{f_N(NO_3, NO_2, NH_4)} \cdot \frac{q_{NO_2}}{q_{NO_2} + q_{NO_3}} q_{F_i} + K_{42} q_{NH_4} - K_{23} q_{NO_2}, \\ \frac{dq_{NO_3}}{dt} &= \sum_{i=1}^3 s_N C_{F_i} (K_{F_iR} - 1) \frac{f_N^{(1)}(NO_3, NO_2, NH_4)}{f_N(NO_3, NO_2, NH_4)} \cdot \frac{q_{NO_3}}{q_{NO_2} + q_{NO_3}} q_{F_i} + K_{23} q_{NO_2}, \\ \frac{dq_{Si}}{dt} &= s_{Si} C_{F_3} (K_{F_3R} - 1) q_{F_3} + s_{Si} K_{F_3D} q_{F_3}. \end{aligned}$$

Решим систему обыкновенных дифференциальных уравнений методом Рунге-Кутты [119]. Проведем несколько численных экспериментов, предполагая, что развитие фитопланктона зависит от единственного лимитирующего вещества.

Для системы ОДУ (3.33) рассчитаем начальные условия и параметры уравнений, при которых наступают стационарные режимы. Возьмем начальные значения концентраций: $q_{F_1}(0) = 2.5$ мг/л, $q_{F_2}(0) = 2.6$ мг/л, $q_{F_3}(0) = 0.91$ мг/л, $q_{POP}(0)$

$= 0.07 \text{ мг/л}$, $q_{DOP}(0) = 0.07 \text{ мг/л}$, $q_{PO_4}(0) = 0.005 \text{ мг/л}$, $q_{NH_4}(0) = 0.11 \text{ мг/л}$, $q_{NO_2}(0) = 0.0178 \text{ мг/л}$, $q_{NO_3}(0) = 0.304 \text{ мг/л}$, $q_{Si}(0) = 0.4 \text{ мг/л}$; коэффициенты: $K_{NF_i} = 2.8 \text{ сут}^{-1}$, $K_{F_iR} = 0.15 \text{ сут}^{-1}$, $K_{F_iD} = 0.05 \text{ сут}^{-1}$, $K_{F_iE} = 0.15 \text{ сут}^{-1}$, $K_{PD} = 0.015 \text{ сут}^{-1}$, $K_{PN} = 0.02 \text{ сут}^{-1}$, $K_{DN} = 0.1 \text{ сут}^{-1}$, $K_{42} = 0.9 \text{ сут}^{-1}$, $K_{23} = 2.5 \text{ сут}^{-1}$, $K_{psi} = 1.46 \text{ сут}^{-1}$, $s_P = 0.01$, $s_N = 0.016$, $s_{Si} = 0.023$, $K_{PO_4} = 0.024$, $K_{NO_3} = 3$, $K_{NH_4} = 2$, $K_{Si} = 3$.

Полученные стационарные режимы системы ОДУ (3.33) в предположении, что развитие фитопланктона лимитируется единственным биогенным веществом - фосфором, азотом или кремнием - изображены на рисунке 3.2–3.4 соответственно. Рисунок 3.2 описывает влияние кремния на развитие диатомовых водорослей, рисунок 3.3 описывает влияние фосфора на развитие различных видов фитопланктона, рисунок 3.4 описывает влияние азота на развитие различных видов фитопланктона.

В результате вычислительного эксперимента видно, что при указанных выше значениях начальных концентраций и параметров уравнений наступают стационарные режимы для системы ОДУ (3.33), описывающей случай пространственно-равномерного распределения субстанций. Полученные значения в дальнейшем будут использованы для моделирования более сложной ситуации, когда учитывается движение среды, соленость и температура.

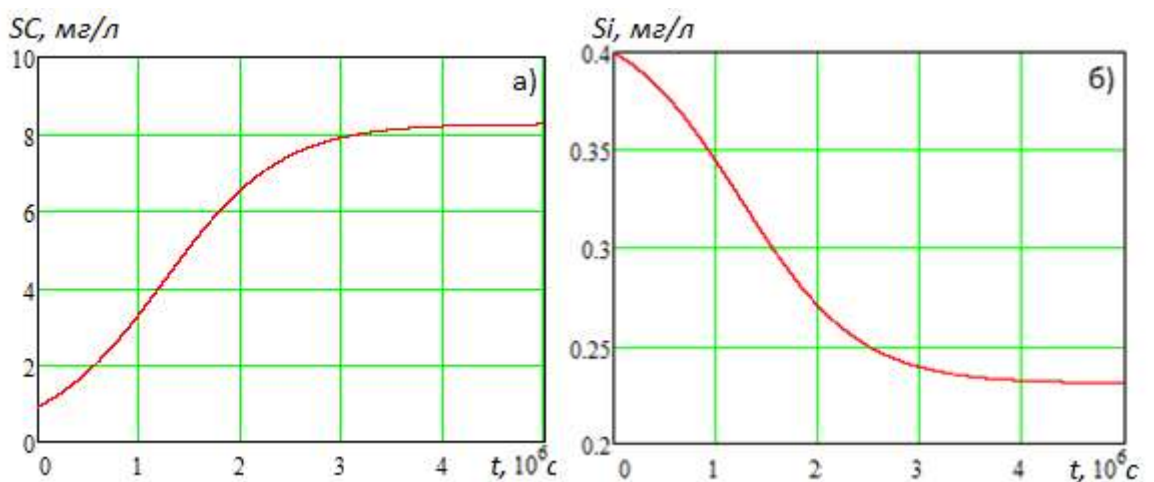


Рисунок 3.2 – Стационарный режим системы ОДУ в предположении, что развитие фитопланктона (диатомовых водорослей) лимитируется кремнием: а) диатомовая водоросль (SC), б) кремний (Si)

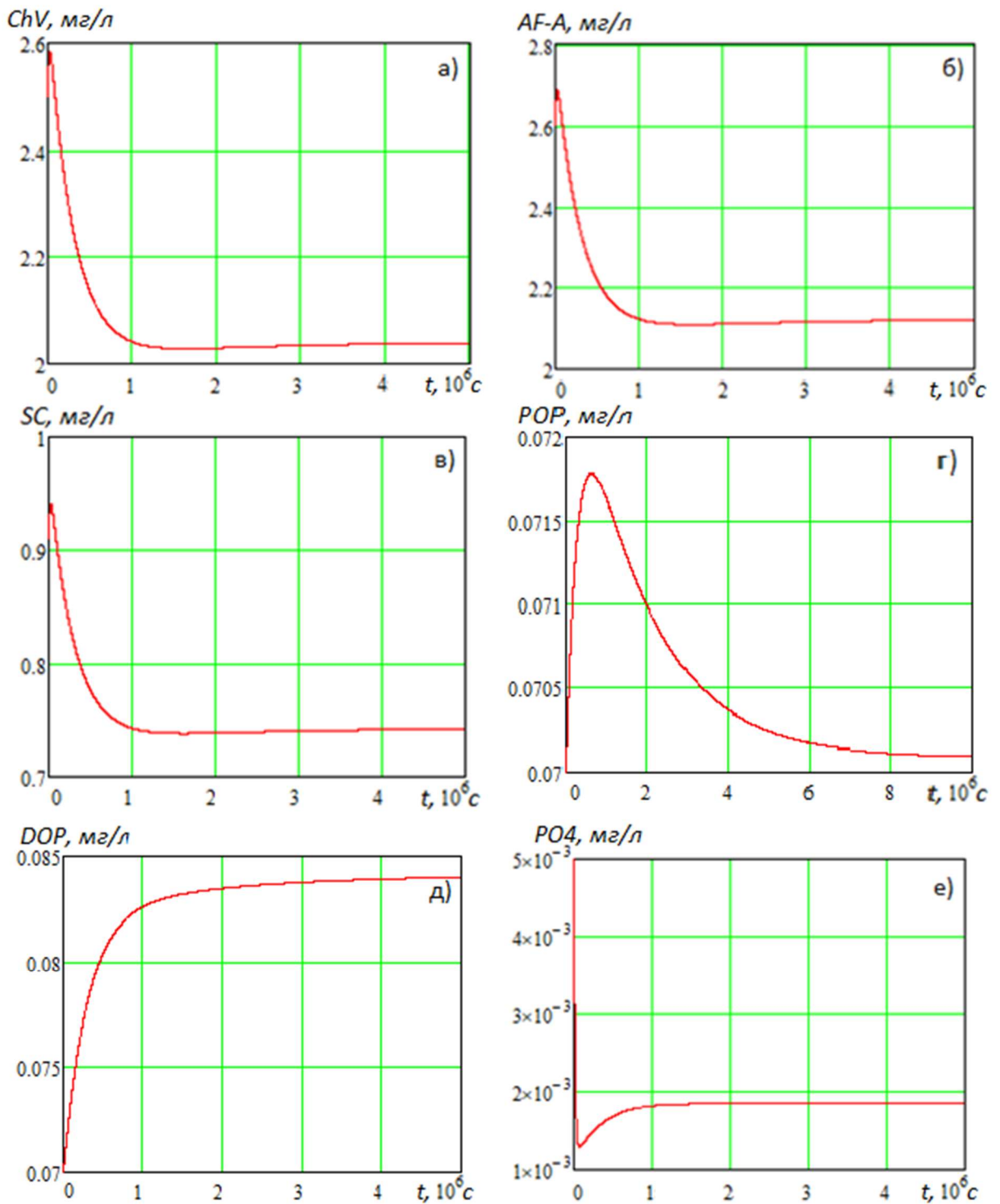


Рисунок 3.3 – Стационарный режим системы ОДУ в предположении, что развитие фитопланктона лимитируется фосфором: а) зеленая водоросль (ChV), б) синезеленая водоросль ($AF-A$), в) диатомовая водоросль (SC), г) взвешенный органический фосфор (POP), д) растворенный органический фосфор (DOP), е) фосфаты (PO_4)

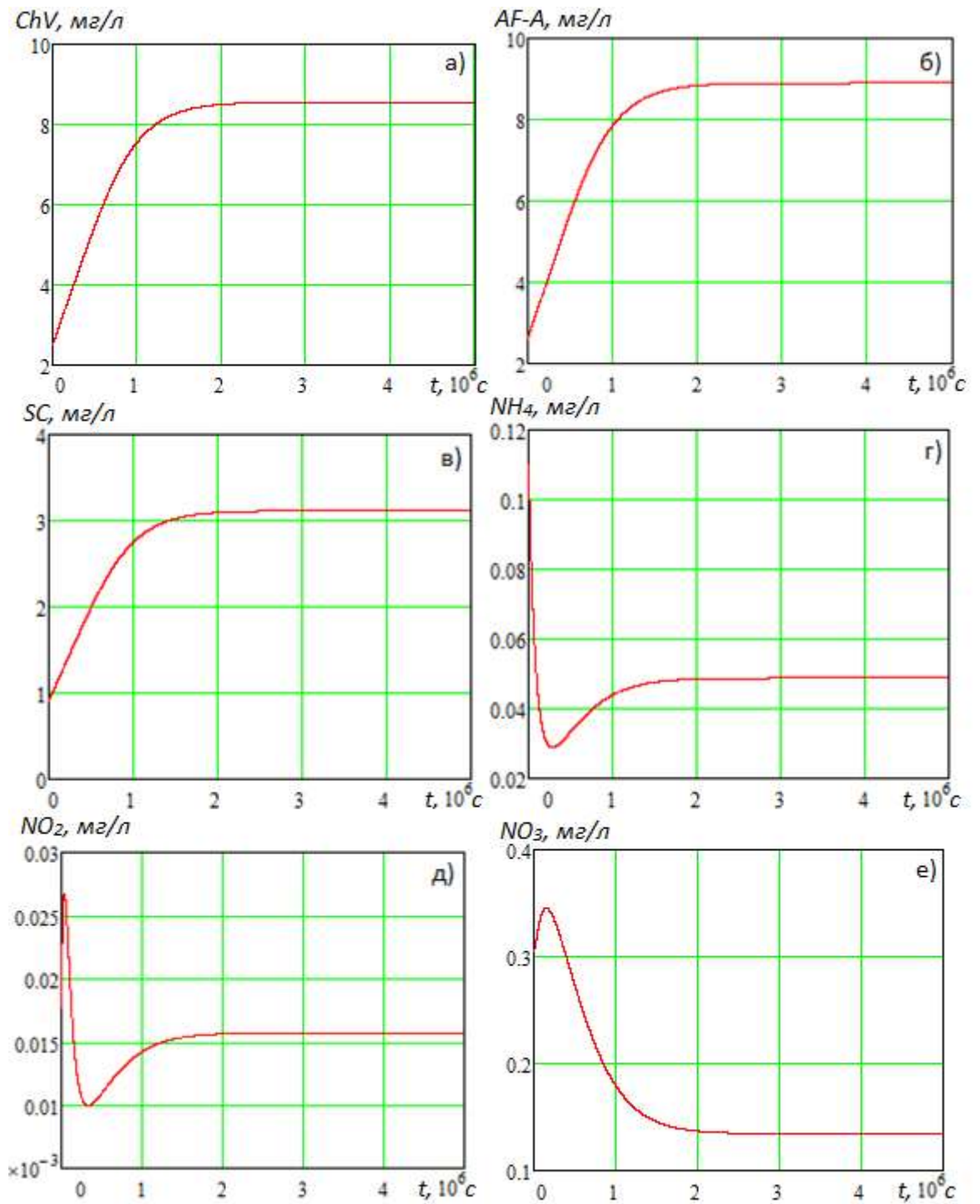


Рисунок 3.4 – Стационарный режим системы ОДУ в предположении, что развитие фитопланктона лимитируется азотом: а) зеленая водоросль (ChV), б) синезеленая водоросль ($AF-A$), в) диатомовая водоросль (SC), г) аммоний (NH_4), д) нитриты (NO_2), е) нитраты (NO_3)

Полученные значения параметров системы (1.23)-(1.28), описывающей динамику фитопланктона с учетом трансформации форм фосфора, азота и кремния, представим в таблице 3.3.

Таблица 3.3. Значения биогеохимических параметров модели динамики фитопланктона с учетом трансформации форм фосфора, азота и кремния

Обозначение	Название	Величина	Единица измерения
K_{NF_1}	максимальная удельная скорость роста зеленой водоросли	2.8	1/сут
K_{NF_2}	максимальная удельная скорость роста синезеленой водоросли	2.8	1/сут
K_{NF_3}	максимальная удельная скорость роста диатомовой водоросли	2.8	1/сут
K_{F_1R}	удельная скорость дыхания зеленой водоросли	0.15	1/сут
K_{F_2R}	удельная скорость дыхания синезеленой водоросли	0.15	1/сут
K_{F_3R}	удельная скорость дыхания диатомовой водоросли	0.15	1/сут
K_{F_1D}	удельная скорость отмирания зеленой водоросли	0.05	1/сут
K_{F_2D}	удельная скорость отмирания синезеленой водоросли	0.05	1/сут
K_{F_3D}	удельная скорость отмирания диатомовой водоросли	0.05	1/сут
K_{F_1E}	удельная скорость экскреции зеленой водоросли	0.15	1/сут
K_{F_2E}	удельная скорость экскреции синезеленой водоросли	0.15	1/сут
K_{F_3E}	удельная скорость экскреции диатомовой водоросли	0.15	1/сут
K_{PD}	удельная скорость автолиза взвешенного органического фосфора (<i>POP</i>)	0.015	1/сут
K_{PN}	коэффициент фосфатификации взвешенного органического фосфора (<i>POP</i>)	0.02	1/сут
K_{DN}	коэффициент фосфатификации растворенного органического фосфора (<i>DOP</i>)	0.1	1/сут
K_{42}	удельная скорость окисления аммония до нитритов	0.9	1/сут
K_{23}	удельная скорость окисления нитритов до нитратов	2.5	1/сут
K_{psi}	коэффициент ингибирования аммония	1.46	1/сут
K_{PO_4}	константа полунасыщения фосфатами	0.24	
K_{NO_3}	константа полунасыщения нитратами	0.3	
K_{NH_4}	константа полунасыщения аммонием	0.2	
K_{Si}	константа полунасыщения кремнием	3	
SP	нормировочный коэффициент содержания фосфора	0.01	
SN	нормировочный коэффициент содержания азота	0.016	
SSi	нормировочный коэффициент содержания кремния	0.023	

3.4. Восстановление полей солености и температуры с использованием схем повышенного порядка точности

При моделировании динамики развития фитопланктонных популяций необходимо учитывать соленость и температуру, которые на картах задаются, как правило, в отдельных точках или изолиниями уровня. Использовать такие карты нежелательно из-за возникновения погрешности вычислений. Таким образом, возникает задача обработки гидрологической информации. Использование более гладких функций для приближения функциональных зависимостей, описывающих поля солености и температуры, позволяет повысить точность гидродинамических расчетов [81].



Рисунок 3.5 – Исходное изображение изолиний уровня солености (изогалин) Азовского моря

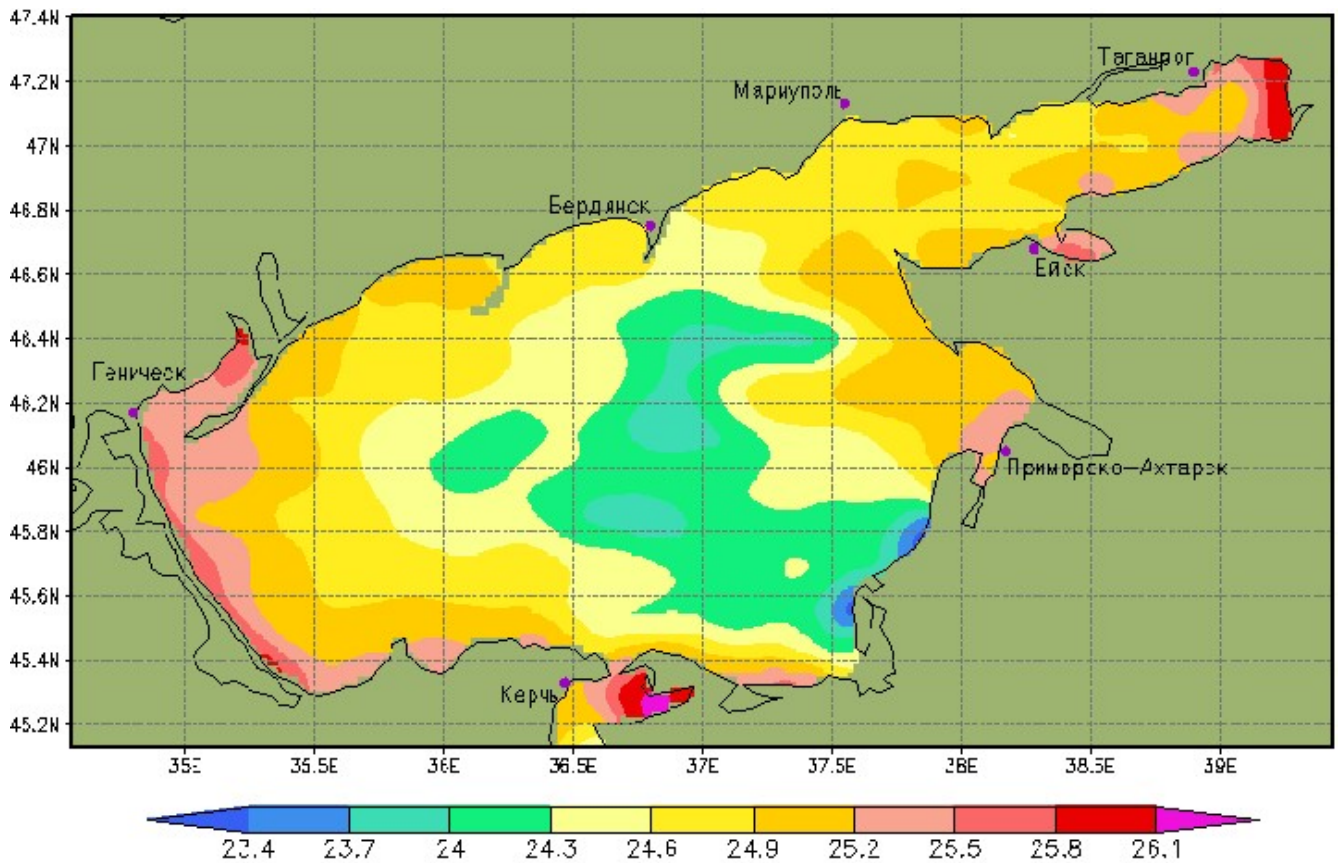


Рисунок 3.6 – Исходное изображение изолиний температуры (изотерм) Азовского моря (июль 2019)

Для получения функции солёности можно использовать решение уравнения диффузии, которое на длительные интервалы времени сводится к решению уравнения Лапласа. Однако функция солёности, полученная подобным образом, может не обладать достаточной степенью гладкости в точках задания значений поля. Поэтому используем уравнение, применяемое для получения схем повышенного порядка точности для уравнения Лапласа:

$$\Delta H - \frac{h^2}{12} \Delta^2 H = 0. \quad (3.34)$$

где H - солёность водоема [133].

При решении задачи обработки гидрологической информации получены изолинии солёности и температуры, для чего применен алгоритм распознавания. С помощью описанного выше алгоритма интерполяции и путем наложения границ

области получены карты солености и температуры Азовского моря (рисунки 3.7, 3.8).

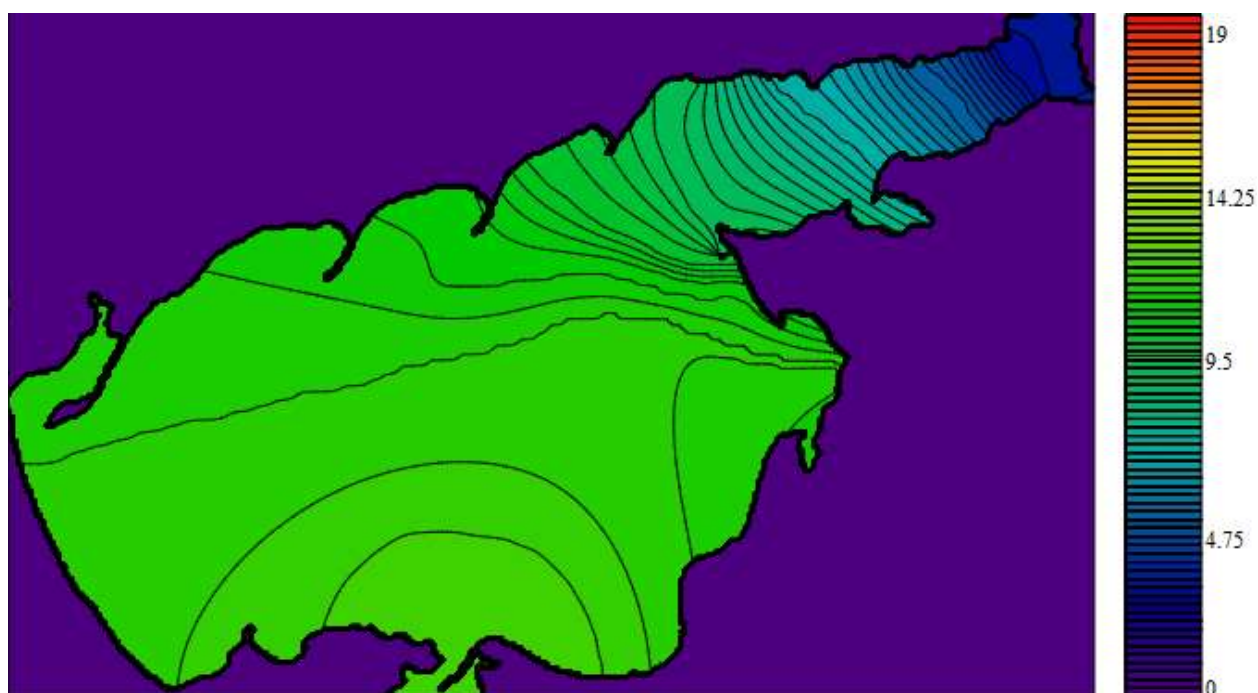


Рисунок 3.7 – Восстановленное поле солености Азовского моря

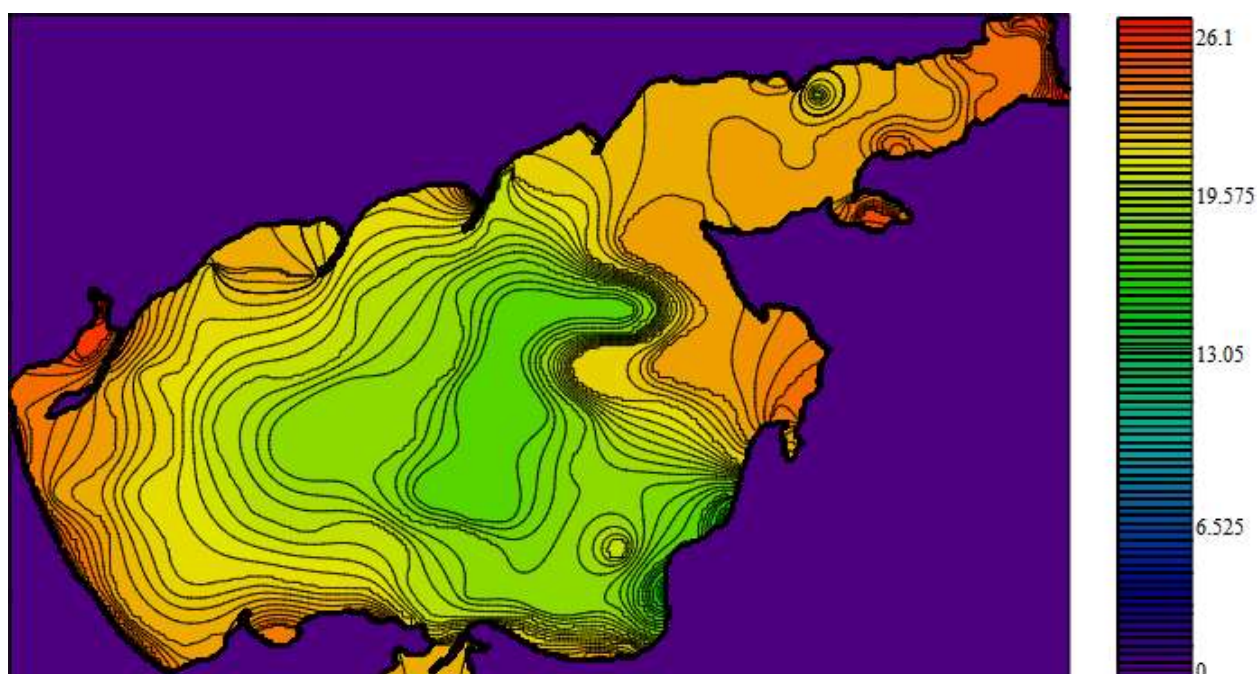


Рисунок 3.8 – Восстановленное поле температуры Азовского моря

Полученные двумерные поля солености и температуры в дальнейшем будут использованы как начальные приближения для построения 3D полей солености и температуры для пространственного моделирования динамики фитопланктонных популяций.

3.5. Статистическая обработка натуральных данных о стоках рек в акваторию Азовского моря

Вместе с речными водами в акваторию Азовского моря поступают различные биогенные вещества, в том числе фосфор, азот и кремний, что, несомненно, оказывает большое влияние на биохимический состав мелководного водоема. Проанализируем ряды многолетних наблюдений за стоком реки Дон (рисунок 3.9), как реки с наибольшим расходом воды ($680 \text{ м}^3/\text{с}$ против $425 \text{ м}^3/\text{с}$ у реки Кубань) из всех, что впадают в Азовское море [109].

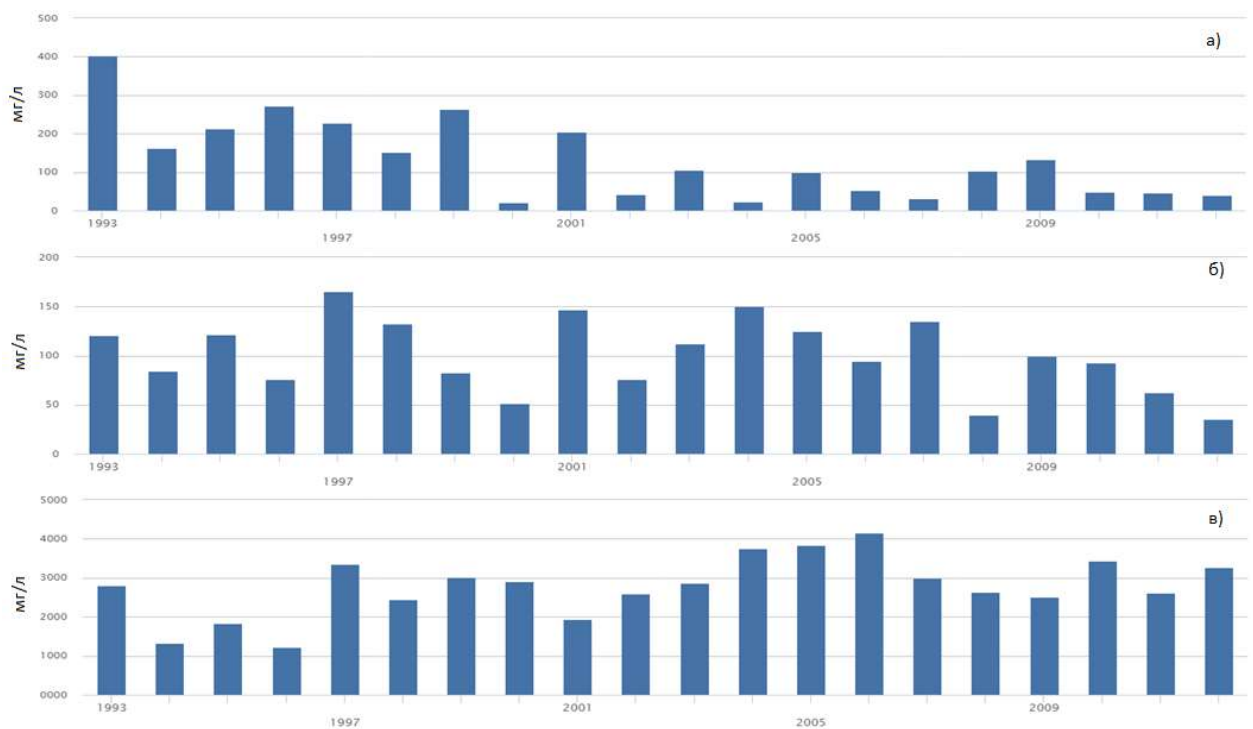


Рисунок 3.9 – Ряды многолетних наблюдений за стоком реки Дон (1993-2012 гг.):
а) азот ($N-NH_4$); б) фосфор (PO_4); в) кремний (SiO_4)

Таблица 3.4. Результаты расчета статистических параметров данных натуральных наблюдений.

Показатель	$N-NH_4$	PO_4	SiO_4
Количество значений	20	20	20
Максимальное значение	403,9	165,0	4166,7
Минимальное значение	20,6	35,4	287,3
Среднее арифметическое значение	132,3	100,1	2648,1
Дисперсия	10362,5	1309,0	868441,9
Стандартное отклонение	101,8	36,2	931,9
Коэффициент асимметрии C_s	0,9	-0,1	-0,7
Коэффициент эксцесса C_e	0,2	-0,9	0,2
Коэффициент вариации C_v	0,8	0,4	0,4
Отношение C_s/C_v	1,2	-0,3	-2,0
Коэффициент автокорреляции	0,3	-0,1	0,1
Отношение Неймана	1,1	2,0	1,8

По результатам статистической обработки натуральных наблюдений за гидрохимическими показателями реки Дон, можно сделать выводы: рассматриваемые биогены имеют как положительную, так и отрицательную асимметрию; высокие значения C_s для азота и кремния означают смещенность случайных величин относительно центра распределения; большие значения дисперсий и среднеквадратических отклонений получены для всех биогенов; коэффициенты автокорреляции малы, следовательно, ряды натуральных данных имеют сильную нелинейную тенденцию; вариация во всех рядах больше 20%, следовательно, ряды сильно вариативны; для азота можно утверждать наличие автокорреляционной связи по критерию Андерсона при количестве значений в выборке 20, так как коэффициент автокорреляции превышает 0,299 при 5%-м уровне значимости. Для фосфора и кремния автокорреляционных связей нет; для азота можно утверждать наличие автокорреляции остатков по критерию Неймана при 5%-м уровне значимости для 20 наблюдений, т.к. отношение Неймана меньше 1,2. Для азота и кремния гипотезу об автокорреляции остатков отвергаем.

В результате статистического анализа натуральных данных можно сделать вывод о неоднородности данных многолетних наблюдений, что связано со стохастичностью поступлений биогенных веществ со стоком реки Дон в результате воздействия различных факторов природного и антропогенного характера. Для

использования натуральных данных в моделях их необходимо разбить на сезоны. В дальнейшей работе будем рассматривать летний сезон.

3.6. Краткие выводы по главе 3

В данной главе приведен обзор основных итерационных методов для решения систем линейных алгебраических уравнений, приведена сравнительная таблица скорости сходимости этих методов. Проведено сравнение двух- и трехслойных итерационных методов на примере метода скорейшего спуска и метода сопряженных градиентов. Показано, что использование трехслойных итерационных методов дает значительное ускорение по сравнению с двухслойными. Показано, что использование методов с четырьмя и более количеством временных слоев не дает ускорения, т.к. четырехслойная итерационная схема решения сеточных уравнений преобразуется к трехслойной схеме. Рассмотрен случай пространственно-равномерного распределения субстанций (фитопланктона, форм фосфора, азота и кремния). Система разбивается на три системы обыкновенных дифференциальных уравнений, каждая из которых моделирует зависимость роста фитопланктона от единственного питательного вещества. Эти системы решены методом Рунге-Кутты, получены стационарные режимы (рисунки 3.2-3.4), для которых определены значения параметров системы и начальные условия. Проведено восстановление полей солености и температуры Азовского моря по гидрологическим картам. Полученные двумерные поля солености и температуры, которые в дальнейшем будут использованы как начальные приближения для построения 3D полей солености и температуры. Проведен статистический анализ натурной информации о стоке реки Дон, который показал, что для использования натуральных данных в моделях их необходимо разбить на сезоны.

ГЛАВА 4. РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА И ПРОВЕДЕНИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА ПО МОДЕЛИРОВАНИЮ БИОГЕОХИМИЧЕСКИХ ЦИКЛОВ В АЗОВСКОМ МОРЕ

4.1. Алгоритм и программная реализация задачи

4.1.1. Общие сведения о программном комплексе

Программный комплекс предназначен для построения трехмерных полей концентраций фитопланктона и питательных веществ - биохимических соединений фосфора, азота и кремния, а также построения прогнозов динамики развития экосистем мелководных водоемов на примере Азовского моря, например, при повышении уровня солености.

Область применения – построение полей распределений концентраций фитопланктона и биохимических соединений питательных элементов.

Минимальное требование к ЭВМ для функционирования программного комплекса - операционная система не ниже Windows 7.

Для создания программного комплекса использовался язык C++, среда Visual Studio.

4.1.2. Функциональное назначение программного комплекса

Разработанный программный комплекс предназначен для математического моделирования динамики развития фитопланктона с учетом трансформации форм фосфора, азота и кремния. Программный комплекс моделирует динамику развития трех видов фитопланктона – синезеленых водорослей (*Aphanizomenon flos-aquae*), зеленых водорослей (*Chlorella vulgaris BIN*), диатомовых водорослей (*Skeletonema costatum*), их конкуренцию за питательные вещества, трансформацию форм этих питательных элементов – фосфора, азота и кремния, их поглощение, выделение, переход из одного биохимического соединения в другое, учитывается влияние солености и температуры на скорость роста фитопланктона.

Программный блок «Биогеохимические циклы» («BGChCycles.exe») использует трехмерный вектор скорости движения водного потока в акватории Азовского моря, а также трехмерные поля солености и температуры, рассчитанные с помощью программы «Расчет движения водной среды», разработанной Сухиновым А.И. и Чистяковым А.Е. В программе при расчете учитывались такие факторы и процессы как сила Кориолиса, турбулентный обмен, сложная геометрия дна и береговой линии, испарение, стоки рек, ветровые течения и трение о дно. Схема алгоритма программы «Расчет движения водной среды» («Azov3d.exe») представлена на рисунке 4.1.

4.1.3. Логической структуры программного комплекса

Разработанное программное обеспечение используется для моделирования динамики развития трех видов фитопланктона с учетом поглощения, выделения и перехода из одной формы в другую соединений фосфора, азота и кремния, состоит из следующих блоков

- управляющий блок (входит функция задания граничных условий, цикл по временной координате, в котором вызывается функция расчета концентраций фитопланктона и биогенных элементов, функции ввода–вывода данных);

- блок ввода начальных данных для расчета концентраций фитопланктона и питательных веществ (вводятся значения параметров уравнений, вводится поле трехмерного вектора скорости течения водной среды (гидродинамической составляющей), поля солености и температуры, начальные распределения концентраций фитопланктона и биогенных элементов, задается геометрия расчетной области);

- блок построения сеточных уравнений для концентраций фитопланктона и питательных веществ в соответствии с разностной схемой (считаются и записываются в массив коэффициенты и правая часть соответствующего сеточного уравнения, представленного в канонической форме);

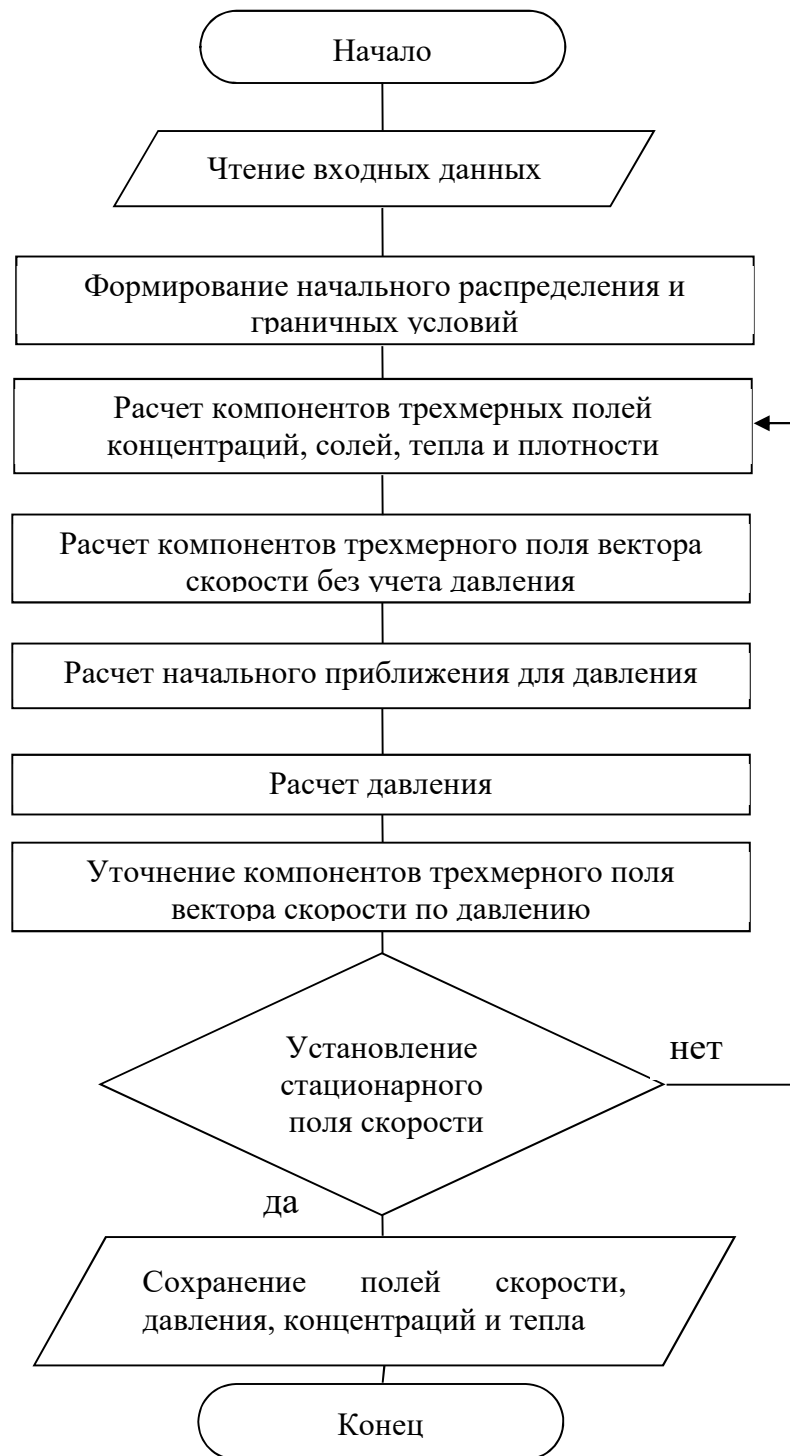


Рисунок 4.1 – Схема алгоритма программы

- блок расчета сеточных уравнений для концентраций фитопланктона и питательных веществ адаптивным попеременно - треугольным методом скорейшего спуска (результатом работы являются значения концентраций фитопланктона и питательных веществ на следующем временном слое);
- блок вывода значений концентраций рассчитываемых полей в файлы.

Ниже приведено описание структуры данных программного комплекса.

В программе задаются параметры

- количество шагов по пространству в направлениях осей Ox , Oy , Oz : $n1=355$, $n2=233$, $n3=36$;
- размерность 3D массивов: $n=n1*n2*n3$;
- размерность 2D массивов: $n2d=n1*n2$;
- начальный момент времени: $t=0.0$;
- шаг по времени: $dt=500.0$;
- шаги по пространству в направлениях осей Ox , Oy , Oz : $dx=1000.0$, $dy=1000.0$, $dz=0.5$;
- временной интервал: $t0=30*86400.0$ (30 суток);
- заданная погрешность измерений полей концентраций субстанций: $e=0.0000000001$;

Через программный интерфейс пользователем вводятся следующие параметры (таблица 3.3)

- максимальная удельная скорость роста зеленой водоросли: $k_{nf1} = 2.8$;
- максимальная удельная скорость роста синезеленой водоросли: $k_{nf2} = 2.8$;
- максимальная удельная скорость роста диатомовой водоросли: $k_{nf3} = 2.8$;
- удельная скорость дыхания зеленой водоросли: $k_{fr1} = 0.15$;
- удельная скорость дыхания синезеленой водоросли: $k_{fr2} = 0.15$;
- удельная скорость дыхания диатомовой водоросли: $k_{fr3} = 0.15$;
- удельная скорость экскреции зеленой водоросли: $k_{fe1} = 0.15$;
- удельная скорость экскреции синезеленой водоросли: $k_{fe2} = 0.15$;
- удельная скорость экскреции диатомовой водоросли: $k_{fe3} = 0.15$;
- удельная скорость отмирания зеленой водоросли: $k_{fd1} = 0.05$;
- удельная скорость отмирания синезеленой водоросли: $k_{fd2} = 0.05$;
- удельная скорость отмирания диатомовой водоросли: $k_{fd3} = 0.05$;
- константа полунасыщения фосфатами: $k_{po4} = 0.24$;
- константа полунасыщения нитратами: $k_{no3} = 0.3$;
- константа полунасыщения аммонием: $k_{nh4} = 0.2$;

- константа полунасыщения кремнием: $k_{si} = 3$;
- удельная скорость автолиза POP: $k_{pd} = 0.015$;
- коэффициент фосфатофикации POP: $k_{pn} = 0.02$;
- коэффициент ингибирования аммония: $k_{psi} = 1.46$;
- коэффициент фосфатофикации DOP: $k_{dn} = 0.1$;
- удельная скорость окисления аммония до нитритов: $k_{42} = 0.9$;
- удельная скорость окисления нитритов до нитратов: $k_{23} = 2.5$;
- нормировочный коэффициент содержания фосфора: $sp = 0.001$;
- нормировочный коэффициент содержания азота: $sn = 0.016$;
- нормировочный коэффициент содержания кремния: $s_{Si} = 0.023$;
- оптимальная температура для зеленой водоросли: $T_{opt1} = 24$;
- оптимальная температура для синезеленой водоросли: $T_{opt2} = 24$;
- оптимальная температура для диатомовой водоросли: $T_{opt3} = 24$;
- оптимальная соленость для зеленой водоросли: $S_{opt1} = 7$;
- оптимальная соленость для синезеленой водоросли: $S_{opt2} = 7$;
- оптимальная соленость для диатомовой водоросли: $S_{opt3} = 11.5$.

Хранение данных организовано с помощью следующих одномерных вещественных массивов

- для компонентов трехмерного вектора скорости: $u[n]$, $v[n]$, $w[n]$;
- для поля давления $a[n]$;
- для поля коэффициента турбулентного обмена: $tu[n]$, $nu[n]$ – вертикальная и горизонтальная составляющие соответственно;
- для полей солености и температуры: $S[n]$, $T[n]$;
- для полей концентраций трех видов фитопланктона и соединений фосфора, азота и кремния $F1[n]$, $F2[n]$, $F3[n]$, $POP[n]$, $DOP[n]$, $PO4[n]$, $NH4[n]$, $NO2[n]$, $NO3[n]$, $Si[n]$.

Значения номеров граничных условий (маски) для полей скорости, давления, концентраций субстанций хранятся в одномерных целочисленных массивах $s1[n]$, $s2[n]$, $s3[n]$ соответственно.

Опишем алгоритм работы программы для математического моделирования биогеохимических циклов с учетом специфики Азовского моря

1. Начало работы программы.

2. Выделение памяти под массивы; чтение входных данных: трёхмерных данных о геометрии расчетной области, векторного поля скоростей водного потока, полей солености и температуры, параметров уравнений;

3. Инициализация начальных и граничных условий.

4. Начало цикла по времени t .

5. Вычисление концентраций фитопланктона и питательных элементов осуществляется в два этапа

5.1. Построение сеточных уравнений для расчета концентраций фитопланктона и питательных элементов.

Значения концентраций субстанций записываются в одномерные массивы. Упорядоченной тройке целых чисел (i, j, k) ставится в соответствие номер элемента (i, j, k) в одномерном массиве - номер центрального элемента, стоящего в центре шаблона сеточного уравнения, в соответствии с формулой: $m_0 = n_2 n_3 i + n_3 j + k$. Номера элементов, находящихся в окрестности центра шаблона ($m_1, m_2, m_3, m_4, m_5, m_6, m_{24}, m_{26}, m_{46}, m_{246}$) рассчитываются по формулам

Начало цикла по i, j, k :

$$m_0 = n_2 n_3 i + n_3 j + k; \quad m_1 = m_0 + n_2 n_3; \quad m_2 = m_0 - n_2 n_3; \quad m_3 = m_0 + n_3; \quad m_4 = m_0 - n_3; \\ m_5 = m_0 + 1; \quad m_6 = m_0 - 1; \quad m_{24} = m_0 - n_2 n_3 - n_3; \quad m_{26} = m_0 - n_2 n_3 - 1; \quad m_{46} = m_0 - n_3 - 1; \\ m_{246} = m_0 - n_2 n_3 - n_3 - 1.$$

Затем для элементов, находящихся в окрестности центра шаблона вычисляются коэффициенты сеточных уравнений. Коэффициенты сеточных уравнений и правые части рассчитываются в соответствии с представлением сеточного уравнения в канонической форме. Ниже приведен фрагмент алгоритма для расчета сеточных уравнений для узлов в окрестности центра шаблона

$$c_{1,m_0} = 0.5 dt \left(-0.5 (u_{m_1} + u_{m_0}) + (m u_{m_1} + m u_{m_0}) / dx \right) / dx,$$

$$c_{2,m_0} = 0.5dt \left(0.5(u_{m_2} + u_{m_0}) + (mu_{m_2} + mu_{m_0}) / dx \right) / dx ,$$

$$c_{3,m_0} = 0.5dt \left(-0.5(v_{m_3} + v_{m_0}) + (mu_{m_3} + mu_{m_0}) / dy \right) / dy ,$$

$$c_{4,m_0} = 0.5dt \left(0.5(v_{m_4} + v_{m_0}) + (mu_{m_4} + mu_{m_0}) / dy \right) / dy ,$$

$$c_{5,m_0} = 0.5dt \left(-0.5(w_{m_5} + w_{m_0}) + (mu_{m_5} + mu_{m_0}) / dz \right) / dz ,$$

$$c_{6,m_0} = 0.5dt \left(0.5(w_{m_6} + w_{m_0}) + (mu_{m_6} + mu_{m_0}) / dz \right) / dz .$$

Уточняются коэффициенты для узлов, стоящих в окрестности центра шаблона. Фрагмент алгоритма приведен ниже

$$c_{1,m_0} = k_1 c_{1,m_0} ; c_{2,m_0} = k_2 c_{2,m_0} ; c_{3,m_0} = k_3 c_{3,m_0} ;$$

$$c_{4,m_0} = k_4 c_{4,m_0} ; c_{5,m_0} = k_5 c_{5,m_0} ; c_{6,m_0} = k_6 c_{6,m_0} ,$$

где $k_i \in [0,1]$ - коэффициенты заполненности расчетных ячеек.

Вычисляются коэффициенты для узла, стоящего в центре шаблона

$$c_{0,m_0} = k_0 + c_{1,m_0} + c_{2,m_0} + c_{3,m_0} + c_{4,m_0} + c_{5,m_0} + c_{6,m_0} .$$

Вычисляются правые части сеточных уравнений для расчета концентраций фитопланктона и питательных элементов

$$f_{1,m_0} = k_0 F_{1,m_0} + k_0 dt \left(C_{F_1} (1 - K_{F_1R}) F_{1,m_0} - K_{F_1D} F_{1,m_0} - K_{F_1E} F_{1,m_0} \right) ;$$

$$f_{2,m_0} = k_0 F_{1,m_0} + k_0 dt \left(C_{F_1} (1 - K_{F_1R}) F_{1,m_0} - K_{F_1D} F_{1,m_0} - K_{F_1E} F_{1,m_0} \right) ;$$

$$f_{3,m_0} = k_0 F_{1,m_0} + k_0 dt \left(C_{F_1} (1 - K_{F_1R}) F_{1,m_0} - K_{F_1D} F_{1,m_0} - K_{F_1E} F_{1,m_0} \right) ;$$

$$f_{4,m_0} = k_0 POP_{m_0} + k_0 dt \left(\sum_{i=1}^3 s_P K_{F_iD} F_{i,m_0} - K_{PD} POP_{m_0} - K_{PN} POP_{m_0} \right) ;$$

$$f_{5,m_0} = k_0 DOP_{m_0} + k_0 dt \left(\sum_{i=1}^3 s_P K_{F_iE} F_{i,m_0} + K_{PD} POP_{m_0} - K_{DN} DOP_{m_0} \right) ;$$

$$f_{6,m_0} = k_0 PO_{4,m_0} + k_0 dt \left(\sum_{i=1}^3 s_P C_{F_i} (K_{F_iR} - 1) F_{i,m_0} + K_{PN} POP_{m_0} + K_{DN} DOP_{m_0} \right) ;$$

$$\begin{aligned}
f_{7,m_0} &= k_0 NH_{4,m_0} + k_0 dt \left(\sum_{i=1}^3 s_N C_{F_i} (K_{F_i R} - 1) \frac{NH_{4,m_0}}{K_{NH_4} + NH_{4,m_0}} \div \right. \\
&\div \left. \left(\frac{(NO_{3,m_0} + NO_{2,m_0}) \exp(-K_{psi} NH_{4,m_0})}{(NO_{3,m_0} + NO_{2,m_0}) + K_{NO_3}} + \frac{NH_{4,m_0}}{K_{NH_4} + NH_{4,m_0}} \right) F_{i,m_0} \right) + \\
&+ \sum_{i=1}^3 s_N (K_{F_i D} + K_{F_i E}) F_{i,m_0} - K_{42} NH_{4,m_0} \Big); \\
f_{8,m_0} &= k_0 NO_{2,m_0} + k_0 dt \left(\sum_{i=1}^3 s_N C_{F_i} (K_{F_i R} - 1) \frac{(NO_{3,m_0} + NO_{2,m_0}) \exp(-K_{psi} NH_{4,m_0})}{(NO_{3,m_0} + NO_{2,m_0}) + K_{NO_3}} \div \right. \\
&\div \left. \left(\frac{(NO_{3,m_0} + NO_{2,m_0}) \exp(-K_{psi} NH_{4,m_0})}{(NO_{3,m_0} + NO_{2,m_0}) + K_{NO_3}} + \frac{NH_{4,m_0}}{K_{NH_4} + NH_{4,m_0}} \right) \cdot \frac{NO_{2,m_0}}{NO_{2,m_0} + NO_{3,m_0}} F_{i,m_0} + \right. \\
&+ \left. K_{42} NH_{4,m_0} - K_{23} NO_{2,m_0} \right); \\
f_{9,m_0} &= k_0 NO_{3,m_0} + k_0 dt \left(\sum_{i=1}^3 s_N C_{F_i} (K_{F_i R} - 1) \frac{(NO_{3,m_0} + NO_{2,m_0}) \exp(-K_{psi} NH_{4,m_0})}{(NO_{3,m_0} + NO_{2,m_0}) + K_{NO_3}} \div \right. \\
&\div \left. \left(\frac{(NO_{3,m_0} + NO_{2,m_0}) \exp(-K_{psi} NH_{4,m_0})}{(NO_{3,m_0} + NO_{2,m_0}) + K_{NO_3}} + \frac{NH_{4,m_0}}{K_{NH_4} + NH_{4,m_0}} \right) \cdot \frac{NO_{3,m_0}}{NO_{2,m_0} + NO_{3,m_0}} F_{i,m_0} + \right. \\
&+ \left. K_{23} NO_{3,m_0} \right); \\
f_{10,m_0} &= s_{Si} C_{F_3} (K_{F_3 R} - 1) F_{3,m_0} + s_{Si} K_{F_3 D} F_{3,m_0},
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
C_{F_{1,2}} &= K_{NF_{1,2}} \exp \left(-\alpha \left(\frac{T_{m_0} - T_{opt}}{T_{opt}} \right)^2 \right) \exp \left(-\beta \left(\frac{S_{m_0} - S_{opt}}{S_{opt}} \right)^2 \right) \times \\
&\times \min \left\{ \frac{PO_{4,m_0}}{PO_{4,m_0} + K_{PO_4}}, \frac{(NO_{3,m_0} + NO_{2,m_0}) \exp(-K_{psi} NH_{4,m_0})}{(NO_{3,m_0} + NO_{2,m_0}) + K_{NO_3}} \right\}, \\
C_{F_3} &= K_{NF_3} \exp \left(-\alpha \left(\frac{T_{m_0} - T_{opt}}{T_{opt}} \right)^2 \right) \exp \left(-\beta \left(\frac{S_{m_0} - S_{opt}}{S_{opt}} \right)^2 \right) \times
\end{aligned}$$

$$\times \min \left\{ \frac{PO_{4,m_0}}{PO_{4,m_0} + K_{PO_4}}, \frac{(NO_{3,m_0} + NO_{2,m_0}) \exp(-K_{psi} NH_{4,m_0})}{(NO_{3,m_0} + NO_{2,m_0}) + K_{NO_3}}, \frac{Si_{m_0}}{Si_{m_0} + K_{Si}} \right\}.$$

Конец цикла по i,j,k.

5.2. Для каждого поля концентраций вызывается функция расчета сеточных уравнений модифицированным попеременно–треугольным итерационным методом (3.18-3.20), [132]

Начало цикла по норме вектора невязки.

– поиск максимальной невязки для текущего уравнения по формуле

$$r^m = f - Ax^m;$$

– вычисление системы уравнений с нижнетреугольной матрицей

$$(E + \omega A_1)u = r^m;$$

– вычисление системы уравнений с верхнетреугольной матрицей

$$(E + \omega A_2)\omega^m = u;$$

– расчет скалярных произведений $(\omega^m, \omega^m), (A\omega^m, \omega^m), (A\omega^m, A\omega^m)$;

– расчет итерационных параметров $\tau_{m+1}, \hat{\omega}_m$;

– переход на следующий итерационный слой в соответствии с формулой

$$x^{m+1} = x^m + \tau_{m+1} \omega^m.$$

Если норма вектора невязки больше заданной величины, то происходит возврат в начало цикла по норме вектора невязки, иначе выполнение цикла по норме вектора невязки прекращается.

Результатом работы данной функции является расчет полей концентраций субстанций.

6. Производится шаг по времени $t=t+dt$.

7. Если условие выхода из цикла по времени не выполняется, то возврат в п.3.

8. Данные распределений концентраций фитопланктона и биогеохимических соединений выводятся в текстовые файлы (таблица 4.1).

9. Конец работы программы.

Таблица 4.1. Выходные файлы для распределений концентраций субстанций.

<i>Номер</i>	<i>Обозначение</i>	<i>Название</i>
1.	F1	зеленая водоросль <i>Chlorella vulgaris</i>
2.	F2	синезеленая водоросль <i>Aphanizomenon flos-aquae</i>
3.	F3	диатомовая водоросль <i>Skeletonema costatum</i>
4.	PO4	фосфаты
5.	POP	взвешенный органический фосфор
6.	DOP	растворенный органический фосфор
7.	NO3	нитраты
8.	NO2	нитриты
9.	NH4	аммоний
10.	Si	растворенный неорганический кремний (кремниевые кислоты)

4.1.4. Используемые технические средства

Минимальная конфигурация технических средств, необходимых для функционирования программного комплекса

- ПЭВМ IBM PC – совместимый компьютер;
- процессор Intel Core i5;
- тактовая частота процессора не менее 2,5 ГГц;
- дисковый накопитель объемом не менее 1024 Мб;
- ОЗУ объемом не менее 2 Гб;
- операционная система не ниже Windows 7;
- программная платформа не ниже .NET Framework 4.0;
- поддерживаемая архитектура 64-разрядная (x64);
- устройство вывода (монитор);
- устройства ввода - клавиатура, манипулятор «мышь».

4.1.5. Вызов и загрузка программного комплекса

Работы программного обеспечения начинается с запуска исполняемого файла «BGChCycles.exe». В процессе выполнения программы происходит чтение входных данных из текстовых файлов «setka1000.txt», «u.txt», «v.txt», «w.txt», «a.txt», «Salinity.txt», «Temperature.txt».

Программа имеет пользовательский интерфейс (рис. 4.2). В окне можно вручную задать коэффициенты уравнений, выбрать метод решения. На форму

помещен ProgressBar для визуализации степени завершенности процесса вычислений. Также в форму динамически выводится количество итераций.

Биогеохимические циклы

Максимальная удельная скорость роста зеленой водоросли 2,8

Максимальная удельная скорость роста синезеленой водоросли 2,8

Максимальная удельная скорость роста диатомовой водоросли 2,8

Константа полунасыщения фосфатами 0,24

Константа полунасыщения нитратами 0,3

Константа полунасыщения аммонием 0,2

Константа полунасыщения кремнием 3

Удельная скорость дыхания зеленой водоросли 0,15

Удельная скорость дыхания синезеленой водоросли 0,15

Удельная скорость дыхания диатомовой водоросли 0,15

Удельная скорость окисления аммония до нитритов 0,9

Удельная скорость окисления нитритов до нитратов 2,5

Оптимальная температура для зеленой водоросли 24

Оптимальная температура для синезеленой водоросли 24

Оптимальная температура для диатомовой водоросли 24

Удельная скорость экскреции зеленой водоросли 0,15

Удельная скорость экскреции синезеленой водоросли 0,15

Удельная скорость экскреции диатомовой водоросли 0,15

Удельная скорость отмирания зеленой водоросли 0,05

Удельная скорость отмирания синезеленой водоросли 0,05

Удельная скорость отмирания диатомовой водоросли 0,05

Удельная скорость автолиза POP 0,015

Коэффициент фосфатификации POP 0,02

Коэффициент фосфатификации DOP 0,1

Коэффициент ингибирования аммония 1,46

Нормировочный коэффициент содержания N 0,016

Нормировочный коэффициент содержания P 0,001

Нормировочный коэффициент содержания Si 0,023

Оптимальная соленость для зеленой водоросли 7

Оптимальная соленость для синезеленой водоросли 7

Оптимальная соленость для диатомовой водоросли 11,5

Методы решения сеточных уравнений

Якоби Зейдель MBP MMH MMP ПТМ

Количество итераций

F1 F2 F3 POP DOP PO4 NH4 NO2 NO3 Si

Рисунок 4.2 – Пользовательский интерфейс программного комплекса

4.1.6 Входные и выходные данные программного комплекса

Для выполнения программного компонента «BGChCycles.exe» необходимо наличие следующих текстовых файлов:

- «setka1000.txt» - содержит сетку глубин Азовского моря;
- «u.txt», «v.txt», «w.txt» - содержат поле вектора скорости водного потока;
- «a.txt» - содержит величины гидродинамического давления;
- «Salinity.txt» - содержит поле солености Азовского моря;
- «Temperature.txt» - содержит поле температуры Азовского моря.

Результаты работы программы записываются в текстовые файлы «F1.txt», «F2.txt», «F3.txt», «POP.txt», «DOP.txt», «PO4.txt», «NH4.txt», «NO2.txt», «NO3.txt», «Si.txt». Фрагмент выходного файла «F1.txt» изображен на рис. 4.3.

Файл	Правка	Формат	Вид	Справка						
)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
)	2.046607	2.046604	2.046601	2.046597	2.046594	2.046591	2.046588	2.046584	2.046581	2.046577
)	2.046377	2.046377	2.046377	2.046377	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046384
)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
)	2.046604	2.046601	2.046598	2.046595	2.046592	2.046589	2.046585	2.046582	2.046578	2.046574
)	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378
)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
)	2.046602	2.046599	2.046596	2.046593	2.046589	2.046586	2.046583	2.046580	2.046576	2.046572
)	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378
)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
)	2.046600	2.046597	2.046594	2.046590	2.046587	2.046584	2.046581	2.046577	2.046574	2.046570
)	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378
)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
)	2.046598	2.046595	2.046591	2.046588	2.046585	2.046582	2.046578	2.046575	2.046572	2.046568
)	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378
)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
)	2.046596	2.046592	2.046589	2.046586	2.046583	2.046580	2.046576	2.046573	2.046570	2.046566
)	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378
)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
)	2.046594	2.046590	2.046587	2.046584	2.046581	2.046578	2.046574	2.046571	2.046568	2.046564
)	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378
)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
)	2.046592	2.046589	2.046585	2.046582	2.046579	2.046576	2.046572	2.046569	2.046566	2.046562
)	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378
)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
)	2.046590	2.046587	2.046584	2.046580	2.046577	2.046574	2.046571	2.046567	2.046564	2.046560
)	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378
)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
)	2.046588	2.046585	2.046582	2.046579	2.046575	2.046572	2.046569	2.046565	2.046562	2.046558
)	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378	2.046378
)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000

Рисунок 4.3 – Фрагмент выходного текстового файла «F1.txt» для вывода данных о распределении зеленой водоросли *Chlorella vulgaris*

4.2. Результаты численных экспериментов

Было проведено численное моделирование решения задачи динамики фитопланктонных популяций с учетом трансформации форм фосфора, азота и кремния на примере Азовского моря. Моделируемая область соответствует физическим размерам Азовского моря: длина равна 355 км, ширина равна 233 км, шаг по пространству в горизонтальном направлении 1000 м. На рисунке 4.4 приведен спутниковый снимок Азовского моря, полученный с помощью спектрорадиометра с умеренным разрешением (MODIS) на спутнике NASA "Aqua" 31 июля 2004 года [91]. На снимке отчетливо видно распространение зеленых и

синезеленых водорослей в области Таганрогского залива и диатомовых водорослей в центральной части моря.



Рисунок 4.4 – Спутниковый снимок Азовского моря

На рисунках 4.5-4.14 представлена картина динамики изменения концентрации трех видов фитопланктона и биогенных веществ в Азовском море с течением времени для равномерного начального распределения. Временной интервал - 30 суток. Рисунки отражают влияние солености и температуры на развитие трех видов фитопланктона, поглощение фитопланктоном фосфатов и форм азота, переход форм фосфора и азота из одной в другую, а также поглощение кремния диатомовыми водорослями.

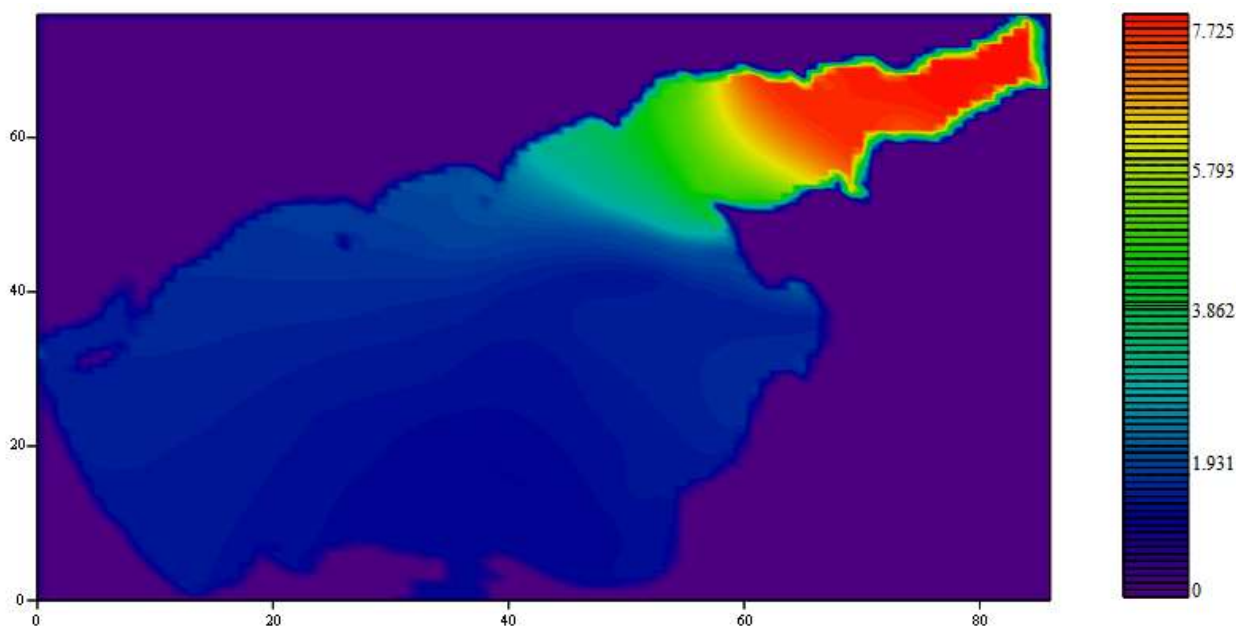


Рисунок 4.5 – Распределение концентрации зеленой водоросли *Chlorella vulgaris*

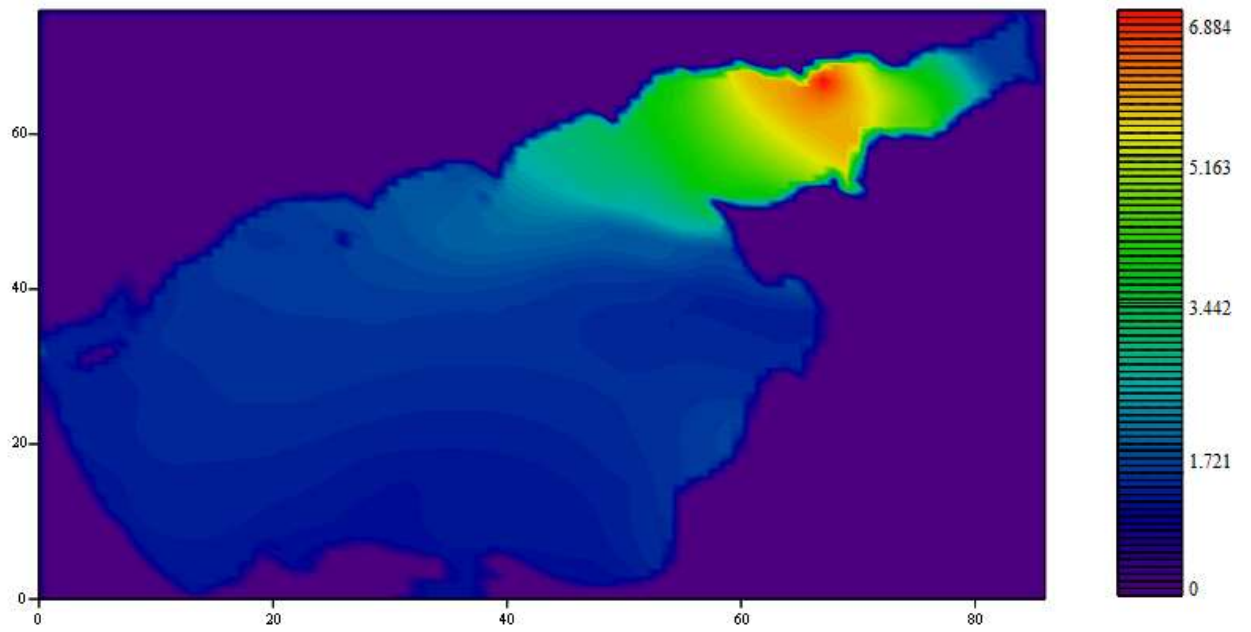


Рисунок 4.6 – Распределение концентрации синезеленой водоросли

Aphanizomenon flos-aquae

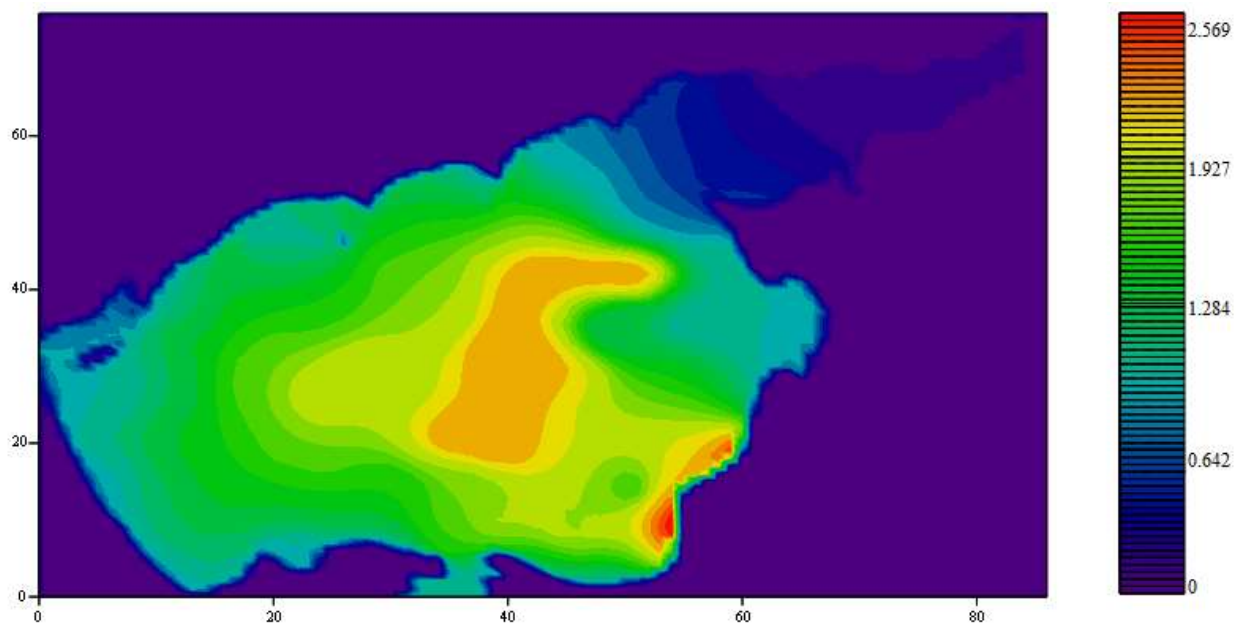


Рисунок 4.7 – Распределение концентрации диатомовой водоросли

Skeletonema costatum

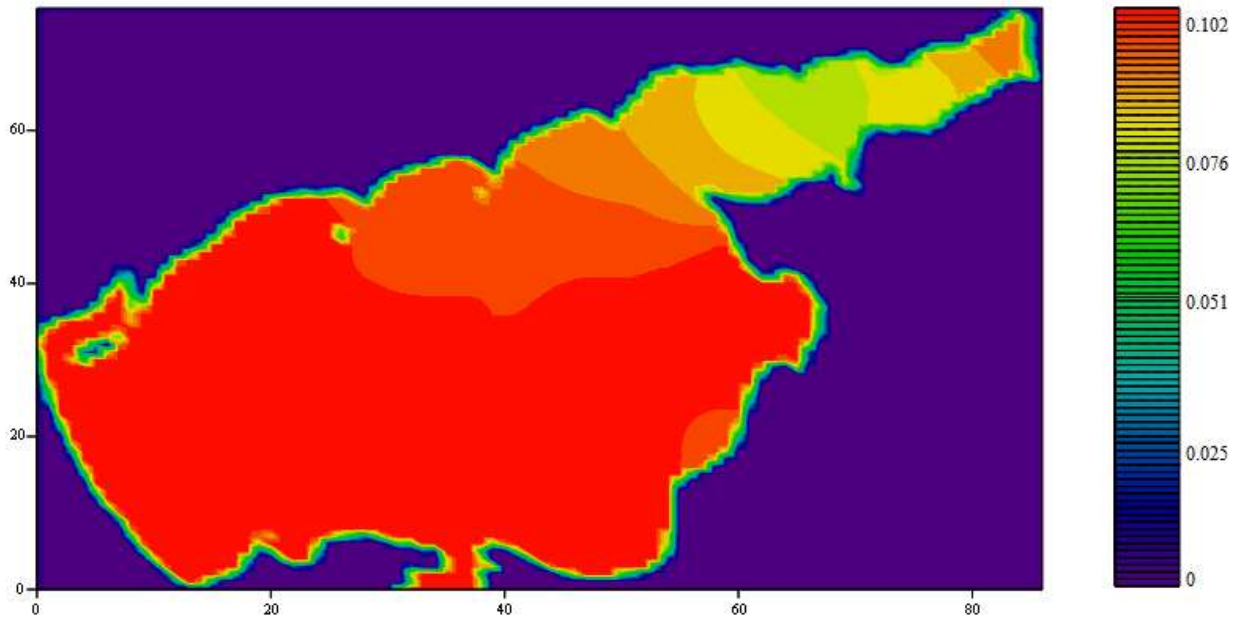


Рисунок 4.8 – Распределение концентрации фосфатов

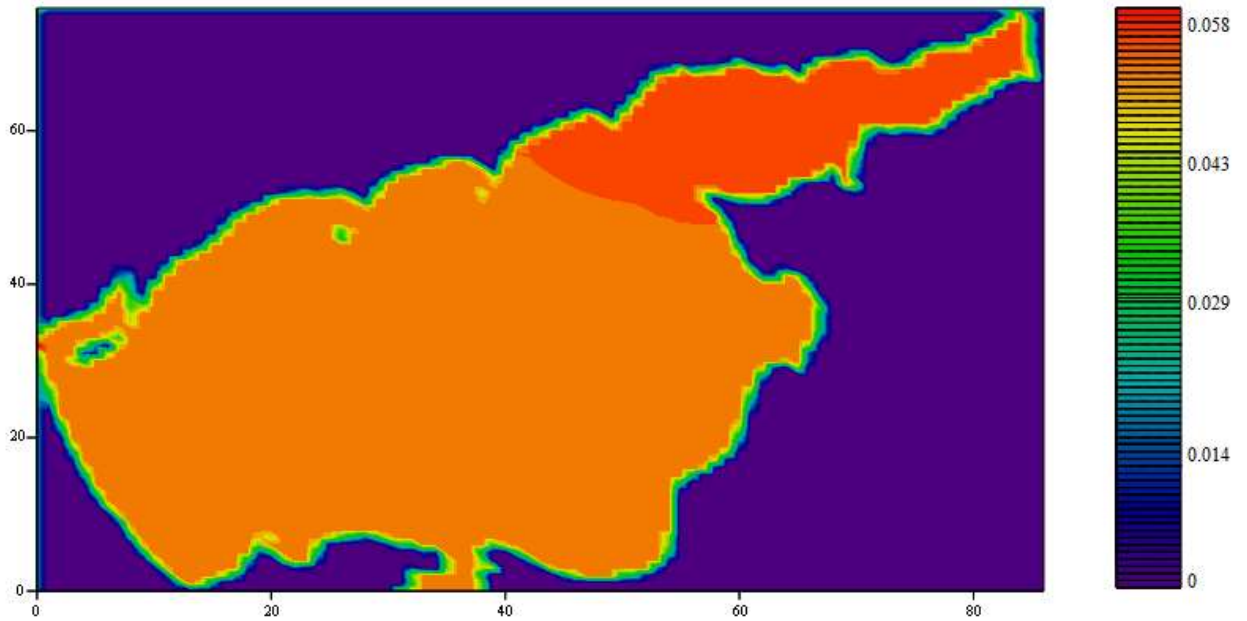


Рисунок 4.9 – Распределение концентрации взвешенного органического фосфора

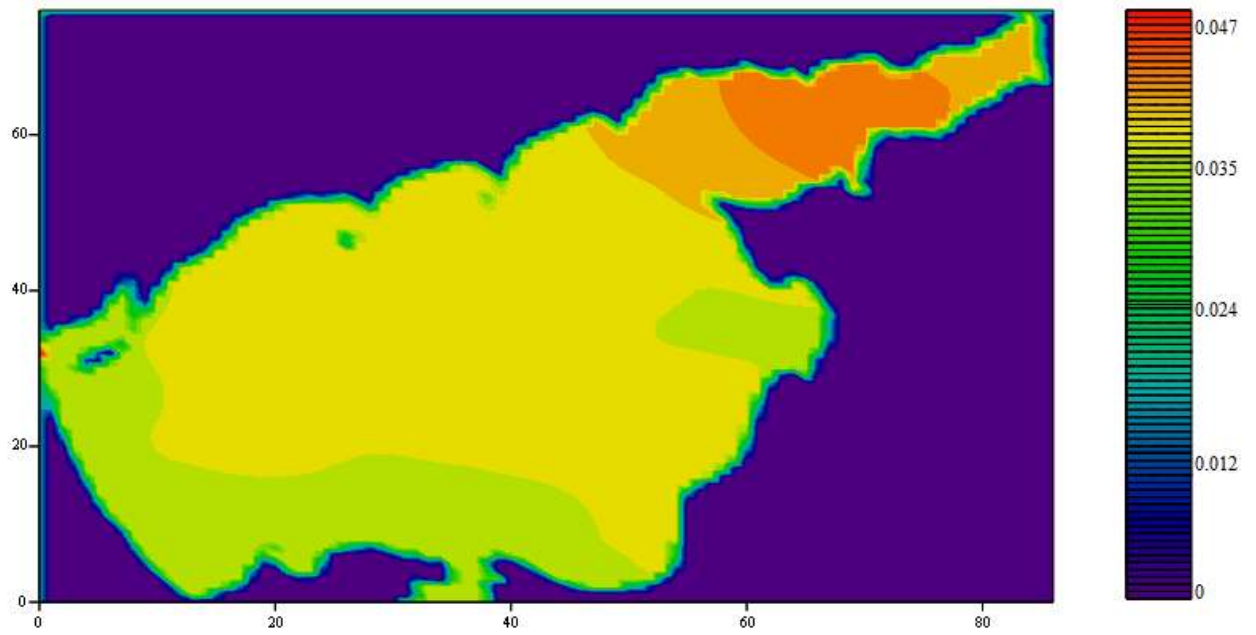


Рисунок 4.10 – Распределение концентрации растворенного органического фосфора

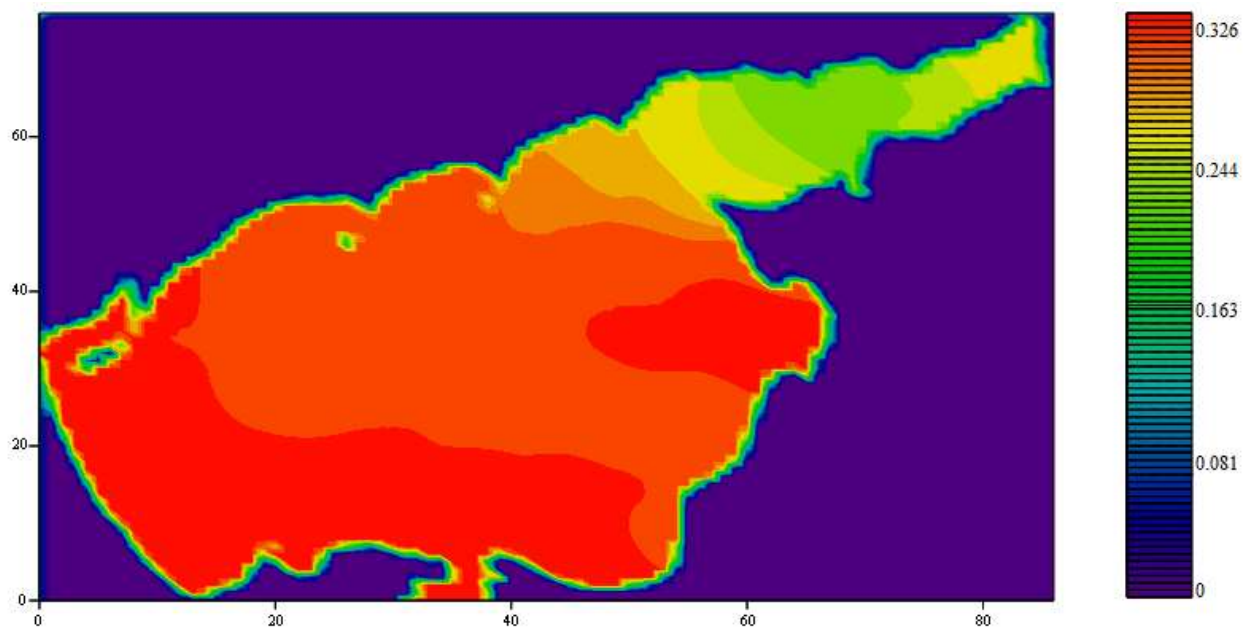


Рисунок 4.11 – Распределение концентрации нитратов

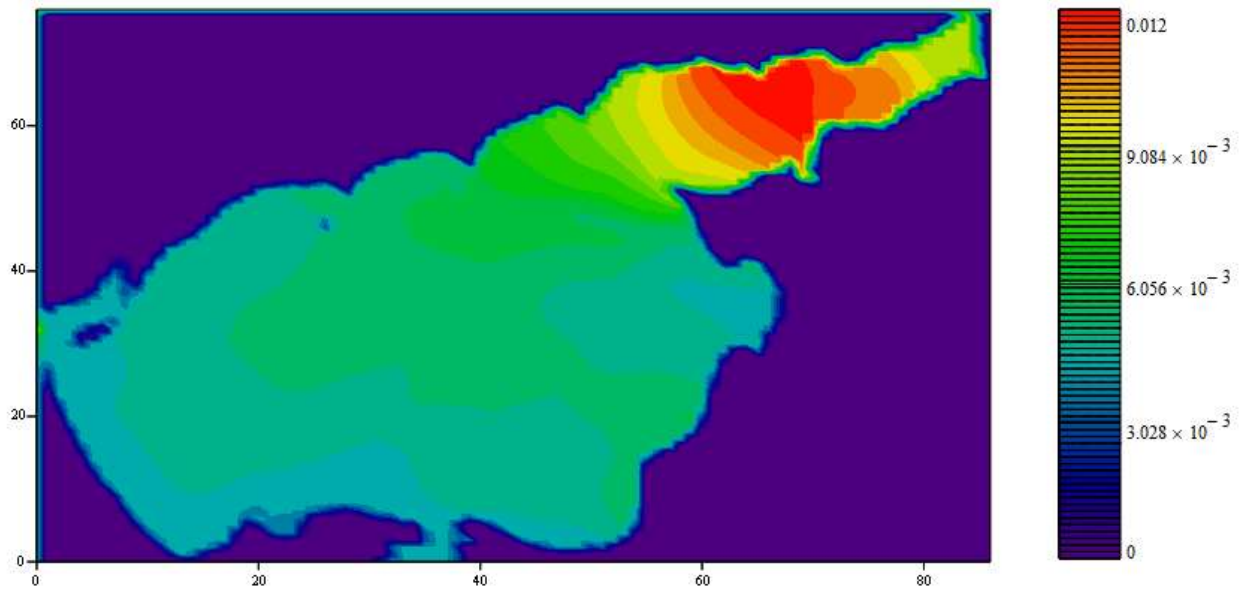


Рисунок 4.12 – Распределение концентрации нитритов

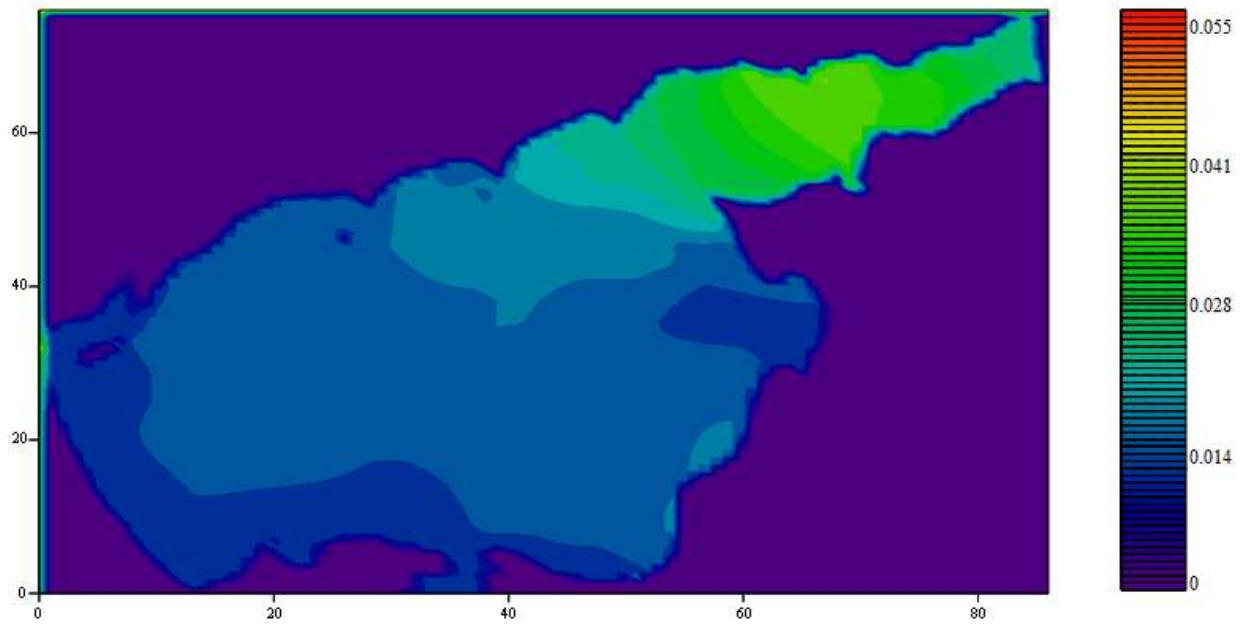


Рисунок 4.13 – Распределение концентрации аммония

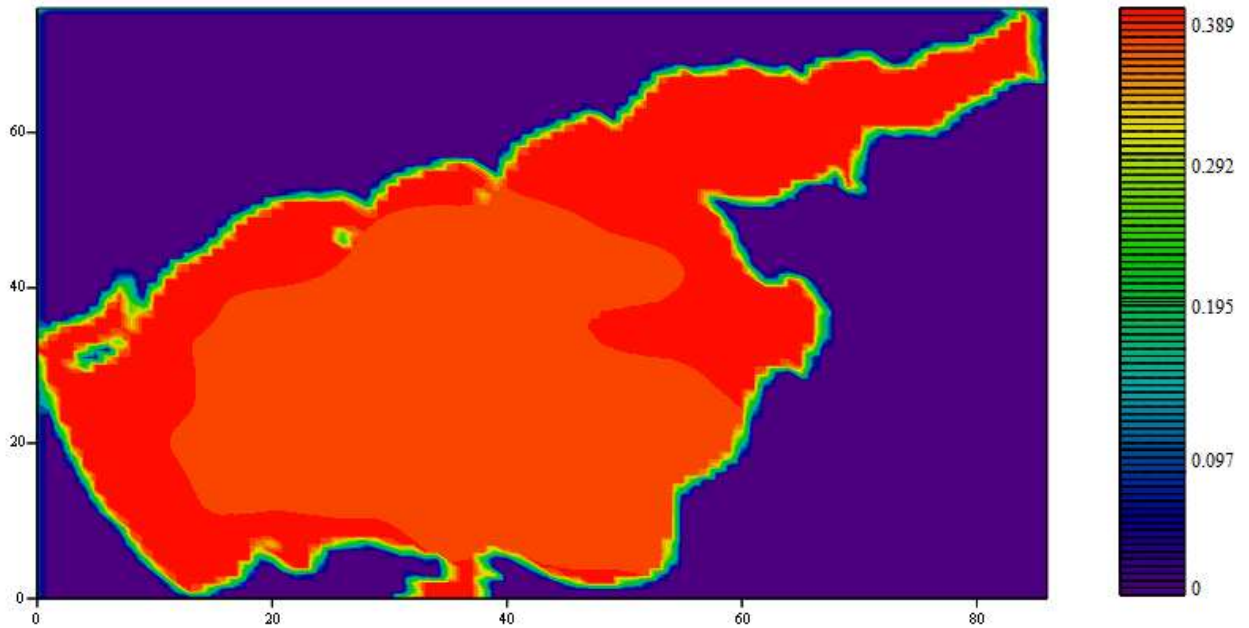


Рисунок 4.14 – Распределение концентрации растворенного неорганического кремния (кремниевых кислот)

На рисунках видно, что при данном уровне солености в Таганрогском заливе преобладают зеленые и синезеленые водоросли (соленость 0-9‰), а на основной части Азовского моря – диатомовые водоросли (соленость 9-12‰), что совпадает с натурными данными.

С 2007 года по настоящее время наблюдается осолонение Азовского моря, что связано с уменьшением стока реки Дон на 35,6% по сравнению с периодом 1998-2006 гг. [112, 108] Снижение стока напрямую влияет на концентрацию биогенных элементов, от чего, в свою очередь, зависит развитие фитопланктона в Азовском море и особенно в Таганрогском заливе. Также осолонение моря влияет на изменение видового состава биоты, пресноводные виды вытесняются морскими.

На рисунках 4.15-4.24 представлена картина динамики изменения концентрации фитопланктонных популяций и биогенных веществ в Азовском море с течением времени, которое может произойти при осолонении моря (увеличение солености на 3‰ в районе Керченского пролива).

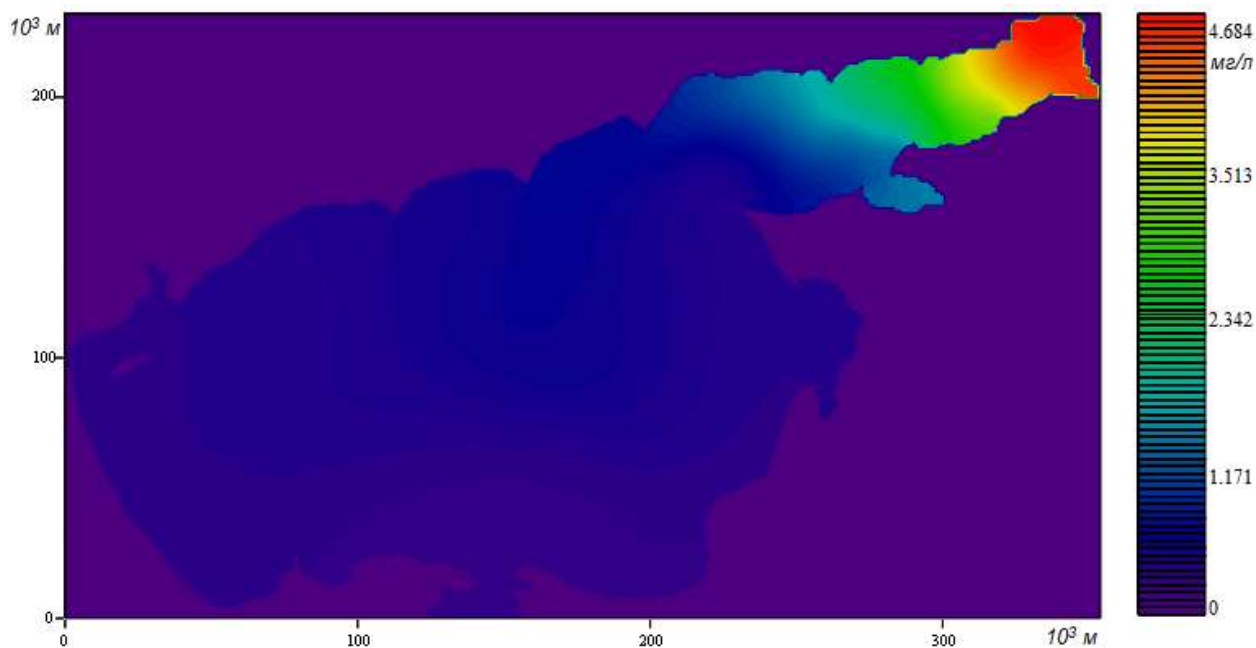


Рисунок 4.15 – Распределение концентрации зеленой водоросли *Chlorella vulgaris* (повышенный уровень солености)

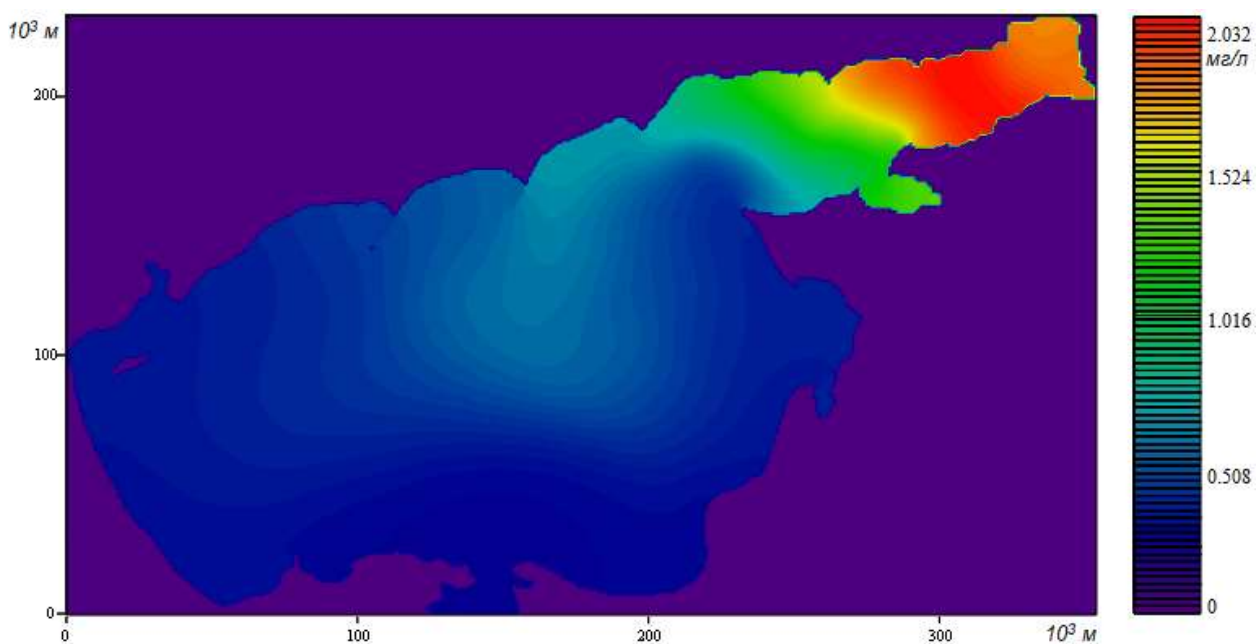


Рисунок 4.16 – Распределение концентрации синезеленой водоросли *Aphanizomenon flos-aquae* (повышенный уровень солености)

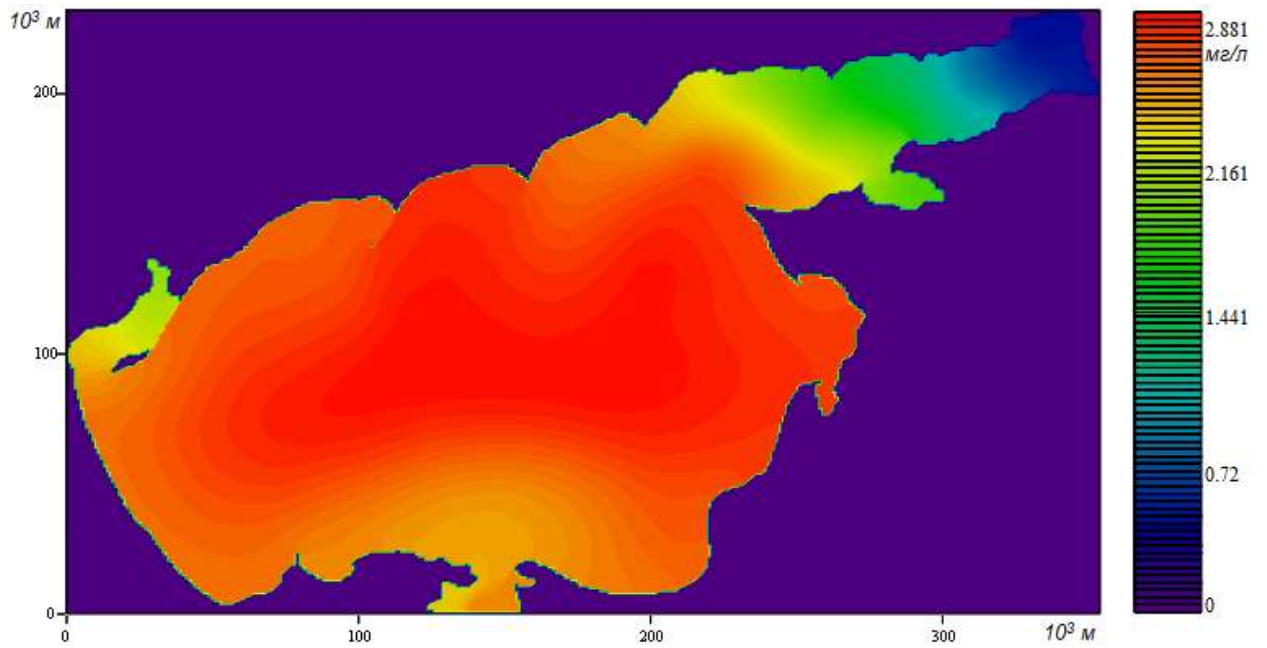


Рисунок 4.17 – Распределение концентрации диатомовой водоросли *Skeletonema costatum* (повышенный уровень солености)

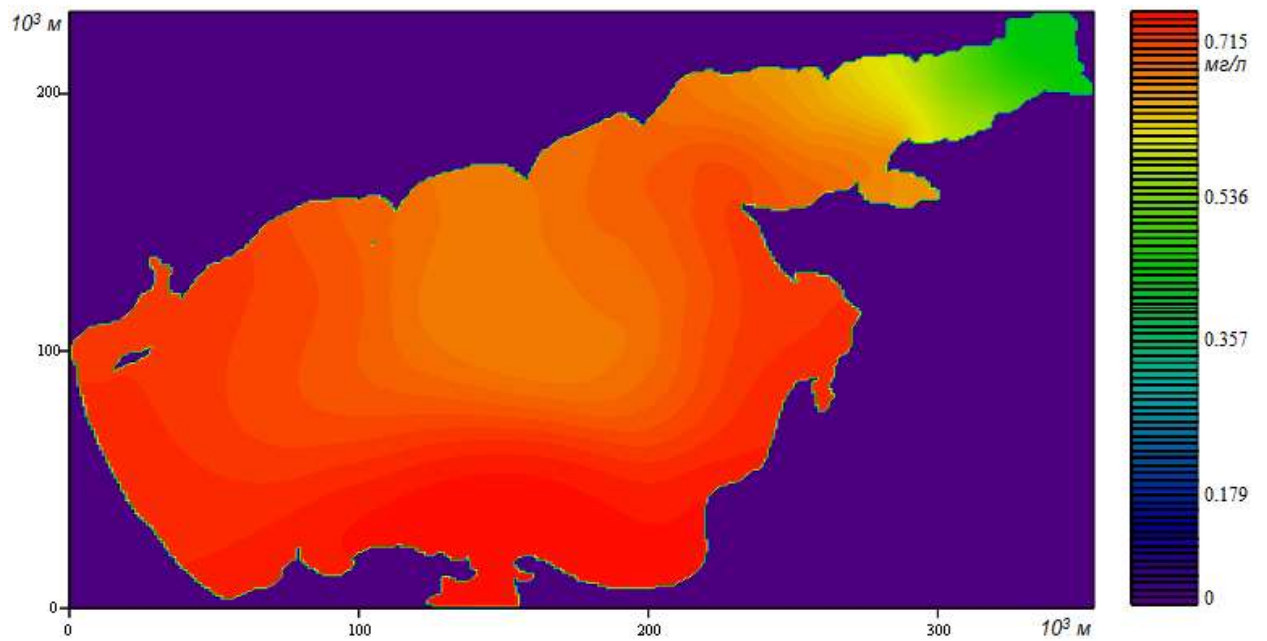


Рисунок 4.18 – Распределение концентрации фосфатов (повышенный уровень солености)

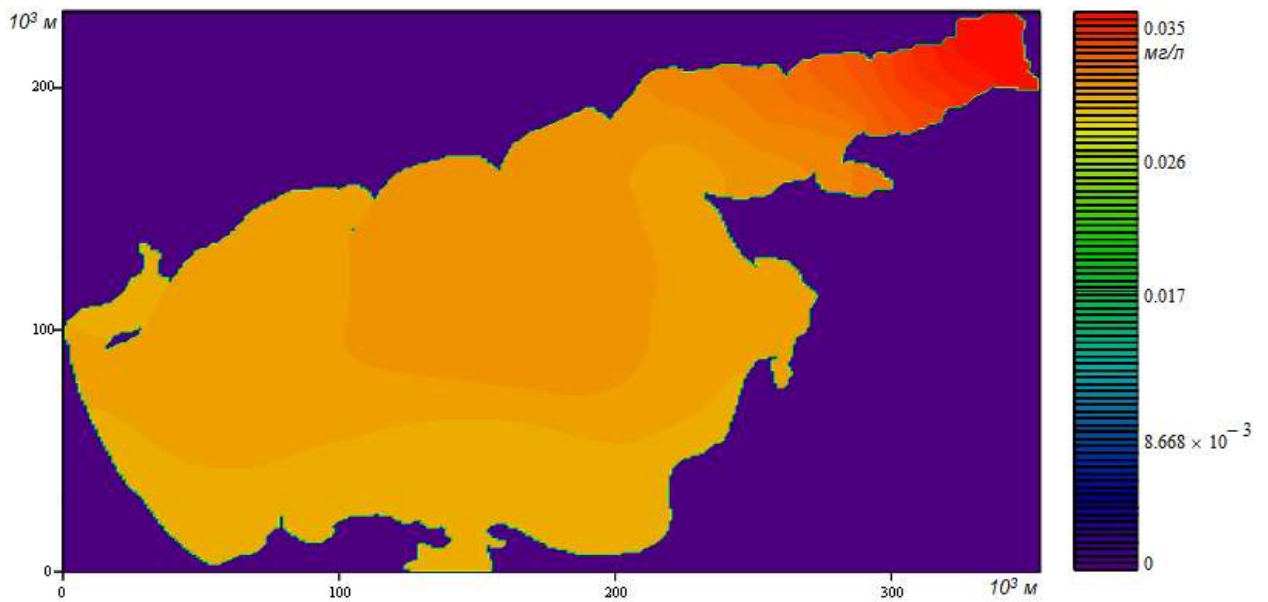


Рисунок 4.19 – Распределение концентрации взвешенного органического фосфора (повышенный уровень солености)

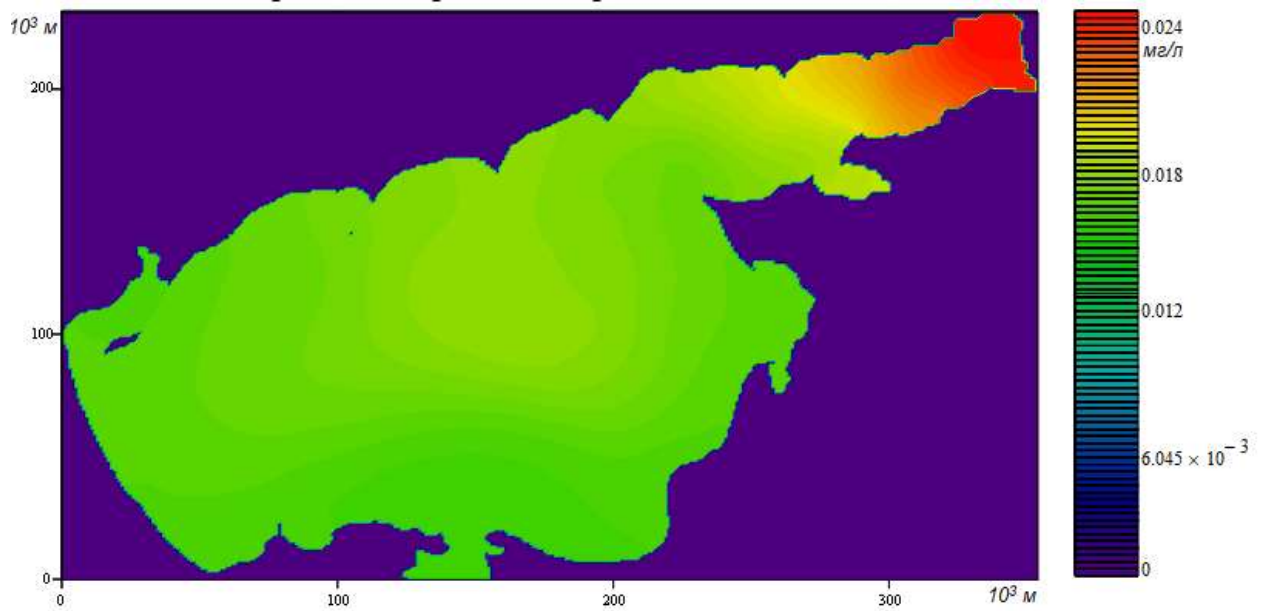


Рисунок 4.20 – Распределение концентрации растворенного органического фосфора (повышенный уровень солености)

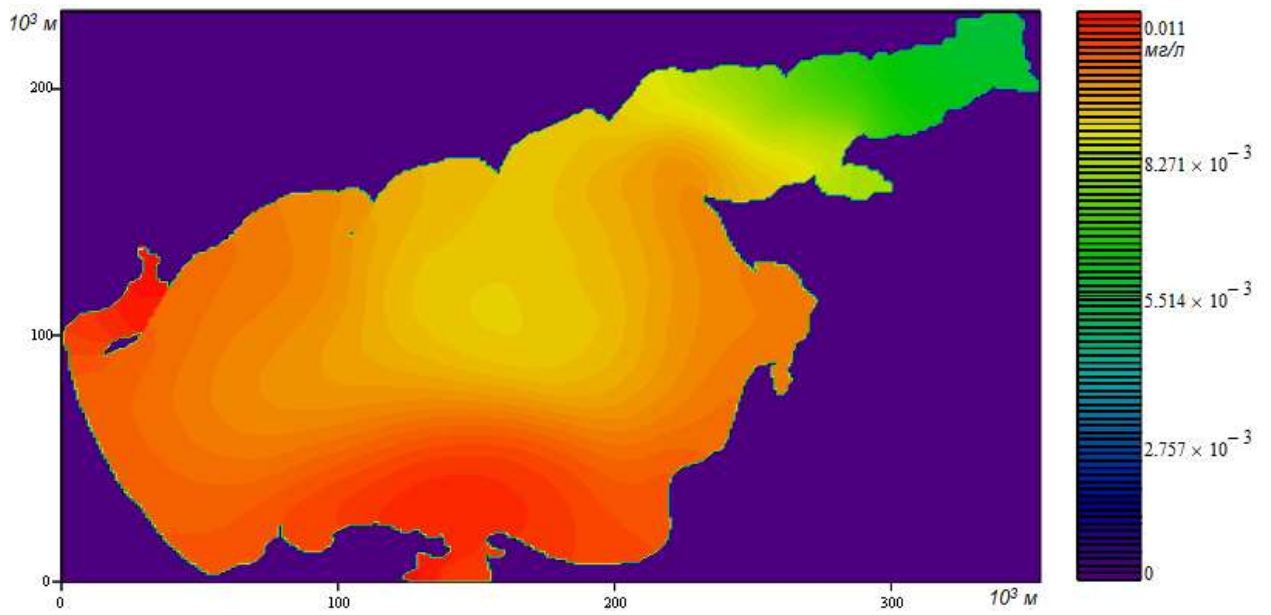


Рисунок 4.21 – Распределение концентрации нитратов (повышенный уровень солености)

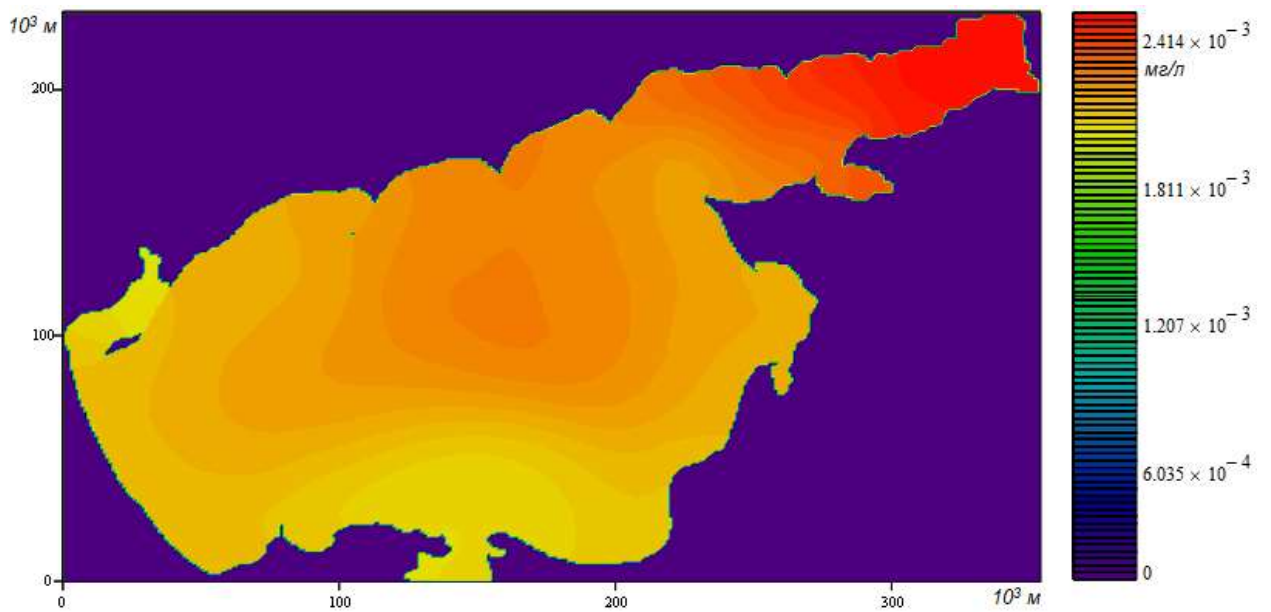


Рисунок 4.22 – Распределение концентрации нитритов (повышенный уровень солености)

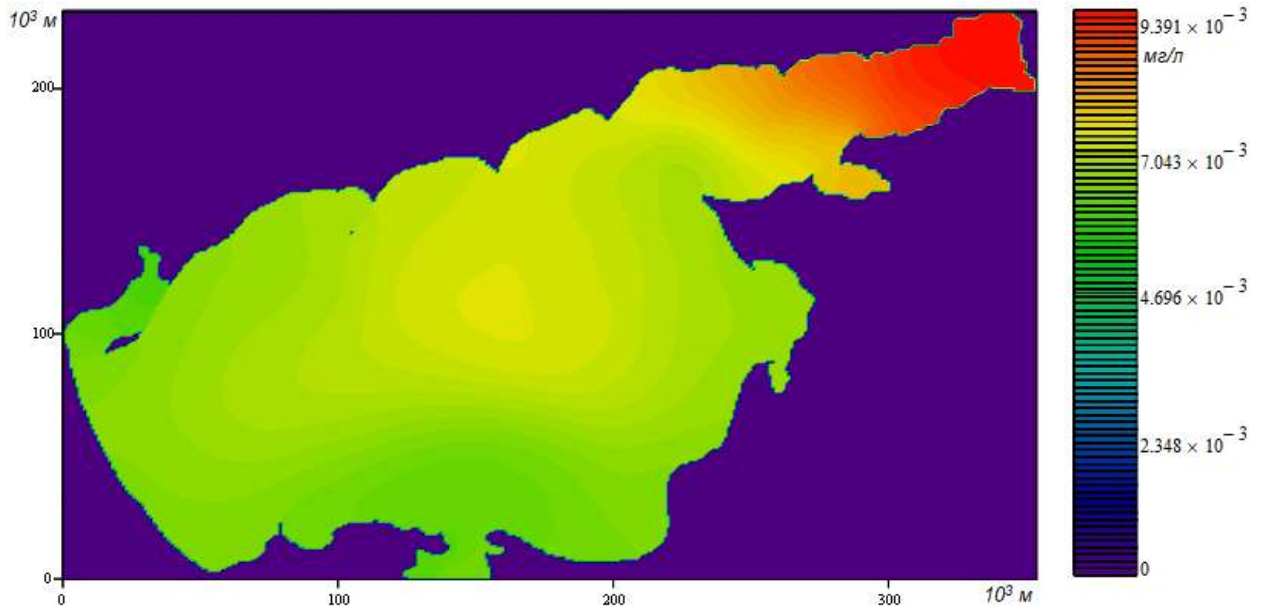


Рисунок 4.23 – Распределение концентрации аммония (повышенный уровень солености)

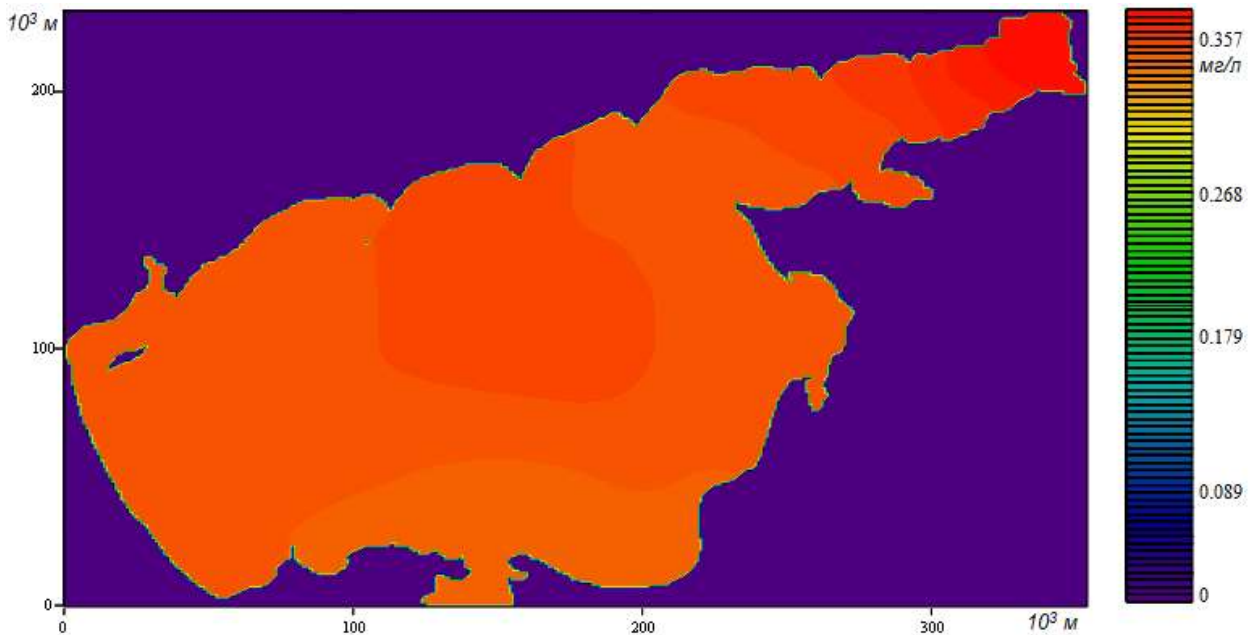


Рисунок 4.24 – Распределение концентрации растворенного неорганического кремния (повышенный уровень солености)

Показано, что при увеличении уровня солености популяции зеленых и синезеленых водорослей развиваются в области ближе к устью Дона, на основной части Азовского моря увеличивается концентрация диатомовых водорослей и они проникли в Таганрогский залив.

4.3. Краткие выводы по главе 4

В данной главе приведено подробное описание программного комплекса для моделирования биогеохимических процессов в Азовском море: общие сведения, функциональное назначение, описание логической структуры программного комплекса, используемые технические средства, вызов и загрузка, входные и выходные данные. Приведен алгоритм работы программного комплекса для расчета модели гидродинамики мелководных водоемов с учетом транспорта тепла и солей. Приведены результаты численных экспериментов, в том числе и для наблюдаемого в последние годы повышения уровня солености в Азовском море. Разработанный комплекс взаимосвязанных моделей, позволяющих более точно по сравнению с известными аналогами описывать гидродинамические процессы, транспорт солей и тепла, распределение концентраций биогенных, загрязняющих веществ, динамику планктонных популяций в мелководных водоемах, подобных Азовскому морю, со сложными пространственными структурами течений, в условиях изменения (уменьшения) пресноводного стока р. Дон ввиду строительства Багаевского гидроузла; увеличения стока высокосоленых вод озера Сиваш и фильтрации вод соленых озер на северо-востоке Крыма (в западную и северо-западная часть Азовского моря) вследствие прекращения деятельности Северо-Крымского канала; влияния Крымского моста на структуры течений на водообмен Черного и Азовского морей (уменьшение потока распресненной азовской воды в Черное море). Результаты моделирования биогеохимических процессов показывают, что при повышении уровня солености происходит вытеснение пресноводных видов фитопланктона морскими.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Работа посвящена разработке и исследованию комплекса взаимосвязанных моделей, позволяющих более точно по сравнению с известными моделями описывать биогеохимические процессы, распределение концентраций биогенных веществ в мелководных водоемах, в условиях существенно изменяющейся солености и плотности водной среды. Благодаря учету ряда гидродинамических и гидрофизических факторов, данная модель позволяет повысить точность моделирования процессов транспорта биогенных веществ в прибрежных системах, подобных Азовскому морю, при наличии сложных пространственно-неоднородных структур течений, сложной береговой линии и рельефа дна. К новым результатам следует отнести:

1. Построены нестационарные пространственно-неоднородные модели биогеохимических циклов, описывающих изменение концентраций основных биогенных веществ (фосфора, азота и кремния), фитопланктонных популяций (синезеленых (*Aphanizomenon flos-aquae*), зеленых (*Chlorella Vulgaris*) и диатомовых (*Skeletonema costatum*) водорослей) с учетом адвективного и микротурбулентного движения водной среды, стоков и источников на границе, неравномерного распределения температуры и солености.

2. Для построенной модели, представляющей собой начально-краевую задачу для десяти уравнений диффузии-конвекции-реакции на временной сетке выполнена линеаризация нелинейных функций источников и получены достаточные условия единственности решения взаимосвязанных по начальным и конечным условиям цепочек начально-краевых задач.

3. Построены разностные схемы, базирующиеся на усовершенствованной дискретизации адвективных членов линеаризованных начально-краевых задач на пространственной сетке, на основе линейных комбинаций схем типа «кабаре» и центрально-разностных. Данные схемы имеют лучшую точность и повышенный запас устойчивости (применимы в большем диапазоне сеточных чисел Пекле) по сравнению с традиционными разностными схемами.

4. Разработан программный комплекс, численно реализующий нестационарные пространственно-неоднородные модели биогеохимических циклов, описывающих изменение концентраций основных биогенных веществ (фосфора, азота и кремния), фитопланктонных популяций (синезеленые (*Aphanizomenon flos-aquae*), зеленые (*Chlorella Vulgaris*) и диатомовые (*Skeletonema costatum*) водоросли) с учетом адвективного и микротурбулентного движения водной среды, стоков и источников на границе, неравномерного распределения температуры и солености.

5. Выполнены прогностические расчеты основных фитопланктонных популяций и концентраций биогенных веществ, применительно к Азовскому морю с учетом изменения солености (осолонения). В качестве входных данных использовались результаты спутникового зондирования, а также средне-многолетние данные о распределении концентраций основных субстанций, температур и соленостей по сезонам. Результаты моделирования согласуются с имеющимися данными наблюдений.

6. В условиях осолонения Азовского моря вследствие ожидаемого уменьшения стока реки Дон из-за строительства Багаевского гидроузла выполнен прогноз эволюции изменения видового состава планктонных популяций. Получен пространственно-временной прогноз вытеснения пресноводных видов фитопланктона морскими.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ahlgren G. Temperature functions in biology and their application to algal growth constants // *Oikos*. - 1987. - Vol. 49. - pp. 177-190.
2. Arrhenius S. Uber die Reaktionsgeschwindigkeit bei der Inversion von Rohrzucker durch Sauren // *Z. physik. Chem.* - 1889. - №4. – pp. 226-234.
3. Background papers and supporting data on the International Equation of State of Seawater 1980 [Электронный ресурс] URL: <https://unesdoc.unesco.org/ark:/48223/pf0000047363> (дата обращения: 15.09.2019).
4. Belehradek J. Influence of temperature on biological processes // *Nature*. - 1926. - Vol. 118. - pp. 117-118.
5. Benitez-Nelson C.R. The biogeochemical cycling of phosphorus in marine systems // *Earth-Science Reviews*. - 2000. - №51(1-4). - pp. 109-135.
6. Bierman V.J., Verhoff F.H., Poulson T.C., Tenney M.W. Multinutrient dynamic models of algal growth and species competition in eutrophic lakes // *Modeling the eutrophication process*. - Ann Arbor: Ann Arbor Science, 1974.
7. Borovec J., Hejzlar J. Phosphorus fractions and phosphorus sorption characteristics of freshwater sediments and their relationship to sediment composition // *Archiv fur Hydrobiologie*. - 2001. - №151(4). - pp. 687-703.
8. Bowie G.L., Mills W.B., Porcella D.B., Campbell C.L., Pagenkopf J.R., Rupp G.L., Johnson K.M., Chan P.W.H., Gherini S.A., Chamberlin C.E. Rates, constants, and kinetic formulations in surface water quality modeling // EPA/600/3-85/040. U.S. Environmental Protection Authority: Athens, Georgia. 1985.
9. Cerco C.F., Cole T.M. User's guide to the CE-QUAL-ICM three-dimensional eutrophication model // EL-95-15. U/S/Army Corps of Engineers: Washington, DC. 1995.
10. Chelysheva M.V., Vinogradova E.L., Yakushev E.V., Chasovnikov V.K. Biogeochemical peculiarities of the vertical distributions of nutrients in the Black Sea // *The Handbook of Environmental Chemistry*. - 2013. - T. 22. - С. 13-26.
11. Chen C.W. Concepts and utilities of ecologic models // *Journal of Sanitary Engineering Division, ASCE*. - 1970. - №96(5). - pp. 1085-1097.

12. Curnow P., Senior L., Knight M.J., Thamatrakoln K., Hildebrand M., Booth P.J. Expression, purification, and reconstitution of a diatom silicon transporter // *Biochemistry*. - 2012. - №51(18). - pp. 3776–3785.
13. Currie D.J., Kalff J. A comparison of the abilities of freshwater algae and bacteria to acquire and retain phosphorous // *Limnology and Oceanography*. - 1984. - №29. - pp. 298-310.
14. Davidson K., Cunnigam A. Accounting for nutrient processing time in mathematical models of phytoplankton growth // *Limnology and Oceanography*. - 1996. - №41(4). - pp. 779-783.
15. Davidson R.S., Clymer A.B. The desirability and applicability of simulating ecosystems // *Annals of the New York Academy of Sciences*. - 1966. - №128. - pp. 790-794.
16. Day J.W., Hall C.A.S., Kemp W.M., Yanez-Arancibia A. *Estuarine ecology*. - New York: Wiley, 1989.
17. De Groot W.T. Modelling the multiple nutrient limitation of algal growth // *Ecological Modelling*. - 1983. - №18. - pp. 99-119.
18. DeAngelis D.L. *Dynamics of nutrient cycling and food webs*. - London: Chapman and Hall, 1992.
19. DeAngelis D.L., Milholland P.J., Palumbo A.V., Steinman A.D., Huston M.A., Elwood J.W. Nutrient dynamics and food web stability // *Annual Reviews of Ecology and Systematics*. - 1989. - №20. - pp. 71-95.
20. Debolskaya E.I., Yakushev E.V., Sukhinov A.I. Formation of fish kills and anaerobic conditions in the Sea of Azov // *Water Resources*. – 2005. – T. 32. – № 2. – pp. 151-162.
21. DiToro D.M., O'Connor D.J., Thomann R.V. A dynamic model of the phytoplankton population in the Sacramento-San Joaquin delta // *Advances in Chemistry Series*. - 1971. - №106. - pp. 131-180.
22. DiToro D.M., O'Connor D.J., Thomann R.V., Mancini J.L. Phytoplankton-zooplankton-nutrient interaction model for western Lake Erie // *Systems analysis and Simulation in Ecology*. - 1975. - pp. 424-474.

23. Doods W.K. The role of periphyton in phosphorous retention in shallow freshwater aquatic systems // *Journal of Phycology*. - 2003. - №39(5). - pp. 840-849.
24. Doptch Q. The interaction between ammonium and nitrate uptake in phytoplankton // *Marine Ecology Progress Series*. - 1990. - №61. - pp. 183-201.
25. Droop M.R. 25 years of algal growth kinetics // *Botanica Marina*. - 1983. - №XXVI. - pp. 99-112.
26. Droop M.R. Some thoughts on nutrient limitation in algae // *Journal of Phycology*. - 1973. - №9. - pp. 264-272.
27. Droop M.R. The nutrient status of algal cells in batch culture // *Journal of the Marine Biological Association, UK*. - 1975. - №55. - pp. 541-555.
28. Droop M.R. The nutrient status of algal cells in continuous culture // *Journal of the Marine Biological Association, UK*. - 1974. - №54. - pp. 825-855.
29. Dugdale R.C. Nutrient limitation in the sea: dynamics, identification and significance // *Limnology and Oceanography*. - 1967. - №12. - pp. 685-695.
30. Eppley R.W., Rogers J.N., McCarthy J.J. Half-saturation constants for uptake of nitrate and ammonium by marine phytoplankton // *Limnology and Oceanography*. - 1969. - №14. - pp. 912-920.
31. Epply R.W. Temperature and phytoplankton growth in the sea // *Fishery Bulletin*. 1972. Vol. 70(4). PP. 1063-1085.
32. Fasham M. J. R., Ducklow H. W., McKelvie S. M. A nitrogen-based model of plankton dynamics in the oceanic mixed layer // *Journal of Marine Research*. - 1990. - №48. - pp. 591-639.
33. Fleming R.H. The control of diatom populations by grazing // *Journal du Conseil International pour l'Exploration de la Mer*. - 1939. - №14. - pp. 210-227.
34. Flynn K.J., Fasham M.J.R. A short version of the ammonium-nitrate interaction model // *Journal of Plankton Research*. - 1997. - №19. - pp. 1881-1897.
35. Flynn K.J., Fasham M.J.R., Hipkin C.R. Modelling the interactions between ammonium and nitrate uptake in marine phytoplankton // *Philosophical Transactions of the Royal Society of London Series B*. - 1997. - №352. - pp. 1625-1645.

36. Follmi K.B. The phosphorus cycle, phosphogenesis and marine phosphate-rich deposits // *Earth-Science Reviews*. - 1996. - №40(1-2). - pp. 55-124.
37. Fryxell G.A., Hasle G.R. Taxonomy of harmful diatoms // *Manual on harmful marine algae*. - Paris: UNESCO Publishing, 2003. - pp. 465-509.
38. Gachter R., Meyer J.S. The role of microorganisms in mobilization and fixation of phosphorous in sediments // *Hydrobiologia*. - 1993. - №253. - pp. 103-121.
39. Goldman J.C., McCarthy J.J. Steady-state growth and ammonium uptake of a fast growing marine diatom // *Limnology and Oceanography*. - 1978. - №23. - pp. 695-703.
40. Graham L., Wilcox L. *Algae*. - Upper Saddle River, NJ.: Prentice Hall, 1999.
41. Groover J.P. Resource competition in a variable environment: phytoplankton growing according to the variable-internal-stores model // *The American Naturalist*. - 1991. - №138(4). - pp. 811-835.
42. Gushchin, V.A., Sukhinov, A.I., Nikitina, A.V., Chistyakov, A.E., Semenyakina, A.A. A model of transport and transformation of biogenic elements in the coastal system and its numerical implementation // *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. – 2018. - №58(8). - C. 1316-1333.
43. Hecky R.E., Kilham P. Nutrient limitation of phytoplankton in freshwater and marine environments: a review of recent evidence on the effects of enrichment // *Limnology and Oceanography*. - 1988. - №33. - pp. 796-822.
44. Herbert R.A. Nitrogen cycling in coastal marine ecosystems // *FEMS Microbiology Reviews*. -1999. - №23(5). - pp. 563-590.
45. Jorgensen S.E. An eutrophication model for a lake // *Ecological Modelling*. - 1976. - №2(2). - pp. 147-165.
46. Jorgensen S.E. *Fundamentals of ecological modelling*. - Amsterdam: Elsevier, 1994.
47. Jorgensen S.E., Mejer H., Friis M. Examination of a lake model // *Ecological Modelling*. - 1978. - №4(2-3). - pp. 253-278.
48. Kemp P.F., Sherr B.F., Sherr E.B., Cole J.J. *Handbook of methods in aquatic microbial ecology*. - CRC Lewis: Boca Ration, 1993.

49. Kooi B.W., Dutta P.S., Feudel U., Morozov A., Tyutyunov Y.V. Resource competition: a bifurcation theory approach // *Mathematical Modelling of Natural Phenomena*. – 2013. – T. 8. – № 6. – C. 165-185.
50. Kowalchuk G.A., Stephen J.R. Ammonia oxidising bacteria: A model for molecular microbial ecology // *Annual Review of Microbiology*. - 2001. - №55. - pp. 485-529.
51. Lee R.E. *Phycology*. - Cambridge: Cambridge University Press, 1989.
52. Legovic T., Cruzado A. A model of phytoplankton growth on multiple nutrients based on Michaelis-Menten-Monod uptake, Droop's growth and Liebig's law // *Ecological Modelling*. - 1997. - №99. - pp. 19-31.
53. Lehtoranta J., Pitkanen H. Binding of phosphate in sediment accumulation areas of the eastern Gulf of Finland, Baltic Sea // *Hydrobiologia*. - 2003. - №492. - pp. 55-67.
54. Lewis N.D., Breckels M.N., Steinke M., Codling E.A., Morozov A., Tyutyunov Y.V. Multitrophic interactions in the sea: assessing the effect of infochemical-mediated foraging in a 1-D spatial model // *Mathematical Modelling of Natural Phenomena*. 2013. T. 8. № 6. C. 25-44.
55. McCarthy J.J., Taylor W.R., Taft J.L. Nitrogenous nutrition of the plankton in the Chesapeake Bay. 1. Nutrient availability and phytoplankton preferences // *Limnology and Oceanography*. - 1977. - №22(6). - pp. 996-1011.
56. Michaelis L., Menten M.L. Die Kinetik der Invertinwirkung // *Biochemische Zeitschrift*. - 1913. - №49. - pp. 333-369. [59]
57. Monod J. *Recherches sur la Croissance des Cultures Bacteriennes*. - Paris: Hermann et Cie, 1942.
58. Monod J. The growth of bacterial cultures // *Annual Review of Microbiology*. - 1949. - №3. - pp. 971-394.
59. Nikitina A.V., Sukhinov A.I., Ugolnitsky G.A., Usov A.B., Chistyakov A.E., Puchkin M.V., Semenov I.S. Optimal control of sustainable development in the biological rehabilitation of the Azov Sea // *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2017, 9(1), c. 101-107.

60. Nyholm N. A simulation model for phytoplankton growth and nutrient cycling in eutrophic shallow lakes // *Ecological Modelling*. - 1978. - №4. - pp. 279-310.
61. O'Connor D.J., DiToro D.M., Photosynthesis and oxygen balance in streams // *Journal of Sanitary Engineering, ASCE*. - 1970. - №95(2). - pp. 547-571.
62. O'Connor D.J., Thomann R.V., DiToro D.M. Dynamic water quality forecasting and management. - Washington, D.C.: US Environmental Protection Authority, 1973.
63. O'Neill R.V., De Angelis D.L., Pastor J.J., Jackson B.J. Post W.M. Multiple nutrient limitations in ecological models // *Ecological Modelling*. - 1989. - №46. - pp. 147-163.
64. Paloheimo J.E., Zimmerman A.P. Factors influencing phosphorous-phytoplankton relationships // *Canadian Journal of Fisheries and Aquatic Science*. - 1983. - №40. - pp. 1804-1812.
65. Park R.A. A generalized model for simulating lake ecosystems // *Simulation*. - 1974. - №23(2). - pp. 33-50.
66. Parker R.A. Simulation of an aquatic ecosystem // *Biometrics*. - 1968. - №24(4). - pp. 803-821.
67. Rates, constanta, and kinetic formulations in surface water quality modelling / Bowie G.L., Mills W.B., Porcella D.B., Capbell C.L., Pagenkopf J.R., Rupp G.L., Johnson K.M., Chan P.W.H., Gherini S.A., Chamberlin C.E., - Athens, Georgia: U.S. Environmental Protection Authority, 1985.
68. Redfield A.C. The biological control of chemical factors in the environment // *American Scientist*. - 1958. - №46. - pp. 205-222.
69. Reynolds C.S. The ecology of freshwater phytoplankton. - Cambridge: Cambridge University Press, 1984.
70. Rheinheimer G. Aquatic microbiology. - New York: Wiley, 1994.
71. Riley G.A. Factors controlling phytoplankton populations on Georges Bank // *Journal of Marine Research*. - 1946. - №6. - pp. 54-73.

72. Rozan T.F., Taillefert M., Trouwborst R.E., Glazer B.T., Ma S. Iron-sulfur-phosphorous cycling in the sediments of a shallow coastal bay: implications for sediment nutrient release // *Limnology and Oceanography*. - 2002. - №47(5). - pp. 1346-1354.
73. Silkin V.A., Lifanchuk A.V., Chasovnikov V.K., Pautova L.A., Pakhomova S.V., Yakushev E.V. Environmental control on phytoplankton community structure in the ne Black Sea // *Journal of Experimental Marine Biology and Ecology*. – 2014. – T. 461. – C. 267-274.
74. Smil V. Phosphorous in the environment: natural flows and human interferences // *Annual Review of Energy and the Environment*. - 2000. - №25(1). - pp. 53-88.
75. Smith V.H. Predictive models for the biomass of blue-green algae in lakes // *Water Resources Bulletin*. - 1985. - №21(3). - pp. 433-439.
76. Sommer U. A comparison of the Droop and the Monod models of nutrient limited growth applied to natural populatios of phytoplankton // *Functional Ecology*. - 1991. - №5. - pp. 535-544.
77. South G.R., Whittick A. *Introduction to phycology*. - Blackwell, 1987.
78. Sterner R.W., Elser J.J. *Ecological stoichiometry*. - Princeton, NJ: Princeton University Press, 2002.
79. Stolte W., Riegman R. A model approach for size-selective competition of marine phytoplankton for fluctuating nitrate and ammonium // *Journal of Phycology*. - 1996. - №32(3). - C. 732-740.
80. Stumm W., Morgan J.J. *Aquatic chemistry*. - New York: Wiley, 1996.
81. Sukhinov A.I., Belova Y.V., Filina A.A. Parallel implementation of substance transport problems for restoration the salinity field based on schemes of high order of accuracy // *CEUR Workshop Proceedings*. – 2019. – Vol. 2500.
82. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E. Adaptive modified alternating triangular iterative method for solving grid equations with a non-self-adjoint operator // *Mathematical Models and Computer Simulations*. – 2012. – T. 4, № 4. – C. 398-409.
83. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Alekseenko E.V. Numerical realization of the three-dimensional model of hydrodynamics for shallow water basins on a high-

performance system // *Mathematical Models and Computer Simulations*. – 2011. – Т. 3, № 5. – С. 562-574.

84. Sukhinov A.I., Nikitina A.V., Chistyakov A.E., Semenov I.S., Semenyakina A.A., Khachunts D.S. Mathematical modeling of eutrophication processes in shallow waters on multiprocessor computer system // *CEUR Workshop Proceedings*. – 2016. – Vol. 1576. – pp. 320-333.

85. Sundby B., Silverberg N. The phosphorus cycle in coastal marine sediments // *Limnology and Oceanography*. - 1992. - №37(6). - pp. 1129-1145.

86. Thomann R.V. *Systems analysis and water quality management*. - New York: McGraw-Hill, 1972.

87. Thomann R.V., DiToro D.M., O'Connor D.J. Preliminary model of Potomac estuary phytoplankton // *Journal of the Environmental Engineering Division*. - 1974. - №100. - pp. 699-715.

88. Thomas J.P., Roe P.L. Development of Non-Dissipative Numerical Schemes for Computational Aeroacoustics. AIAA paper 93-3382-CP, presented at the 11th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, Orlando, Florida, July 6 - 9.- 1993.

89. Touchette B.W., Burkholder J.M. Review of nitrogen and phosphorus metabolism in seagrasses // *Journal of Experimental Marine Biology and Ecology*. - 2000. - №250(1-2). - pp. 133-167.

90. Van Straten G., Keesman K.J. Uncertainty propagation and speculation in projective forecasts of environmental change: a lake eutrophication example // *Journal of Forecasting*. - 1991. - №10. - pp. 163-190.

91. Visible Earth. A catalog of NASA images and animations of our home planet. [Электронный ресурс] URL: <https://visibleearth.nasa.gov/images/71786/phytoplankton-bloom-in-the-sea-of-azov> (дата обращения: 28.10.2019).

92. Vollenweider R.A. Advances in defining critical loading levels for phosphorous in lake eutrophication // *Memorie dell'Instituto italiano di Idrobiologia*. - 1976. - №33. - pp. 53-83.

93. Vollenweider R.A., Kerekes J. The loading concept as a basis for controlling eutrophication. Philosophy and preliminary results of the OECD programme on eutrophication // Progress in Water Technology. - 1976. - №12(2). - pp. 5-38.
94. Vollenweider, R.A. The scientific basis of lake and stream eutrophication, with particular reference to phosphorous and nitrogen as eutrophication factors. - DAS/DSI/68.27 изд. - Paris: Organization for Economic Cooperation and Development, 1968.
95. Williams B.J. Hydrobiological modelling. - University of Newcastle, NSW. – Australia: www.lulu.com, 2006. – 680 с.
96. Wojciechowska W. Correlation between biomass, chlorophyll-a, photosynthesis and phytoplankton structure in a lake // Ekologia Polska. – 1989. – №37(1-2). – pp. 59-82.
97. Yakushev E., Pakhomova S., Sorenson K., Skei J. Importance of the different manganese species in the formation of water column redox zones: Observations and modeling // Marine Chemistry. – 2009. – №117. – pp. 59-70.
98. Yakushev E.V., Mikhailovsky G.E. Mathematical modelling of the influence of marine biota on the carbon dioxide ocean-atmosphere exchange in high latitudes // Air-Water Gas Transfer, selected papers from the Third International Symposium on Air-Water Gas Transfer. - Hanau : AEON Verlag & Studio, 1995. – pp. 37-48.
99. Yakushev E.V., Pollehne F., Jost G. Kuznetsov I., Schneider B., Umlauf L. Analysis of the water column oxic/anoxic interface in the Black and Baltic seas with a numerical model // Marine Chemistry. – 2007. – №107. – pp. 388-410.
100. Белова Ю.В., Атаян А.М., Чистяков А.Е., Стражко А.В. Исследование стационарных решений задачи динамики фитопланктона с учетом трансформации соединений фосфора, азота и кремния // Вестник Донского государственного технического университета. – 2019. – Т. 19. – № 1. – С. 4-12.
101. Белова Ю.В., Чистяков А.Е., Проценко Е.А. О четырехслойной итерационной схеме // Вестник Донского государственного технического университета. – 2016. – Т. 16. – № 4 (87). – С. 146-149.

102. Бродский А.К. Краткий курс общей экологии: учебное пособие для ВУЗов / А.К. Бродский. – СПб: Деан, 2000. – 224 с.

103. Гидрологический режим Азовского моря. База данных «Единая система информации об обстановке в Мировом океане» (ЕСИМО) [Электронный ресурс] URL: http://esimo.oceanography.ru/esp1/index.php?sea_code=11§ion=6&menu_code=1015 (дата обращения: 15.10.2019).

104. Глотов В.Ю., Головизнин В.М., Карабасов С.А., Маркештейн А.П. Новая схема «двухслойный крест» для моделирования стохастических уравнений Ландау–Лифшица // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2014. – Т. 54, № 2. – С. 298–317.

105. Головизнин В.М., Самарский А.А. Разностная аппроксимация конвективного переноса с пространственным расщеплением временной производной // Математическое моделирование. – 1998. – Т. 10, №1. – С. 86-100.

106. Домбровский Ю.А. Теоретические и прикладные аспекты моделирования первичной продуктивности водоемов / Ю.А. Домбровский [и др.]. – Ростов н/Д: Издательство Ростовского университета, 1990. – 176 с.

107. Дроздов В.В. Особенности многолетней динамики экосистемы Азовского моря под влиянием климатических и антропогенных факторов // Ученые записки Российского государственного гидрометеорологического университета. Экология. - 2010. - №15. - С. 155-176.

108. Дубинина В.Г., Жукова С.В. Оценка возможных последствий строительства Багаевского гидроузла для экосистемы Нижнего Дона // Рыбное хозяйство. – 2016. – № 4. – С. 20–30.

109. Единая государственная система информации об обстановке в Мировом океане [Электронный ресурс] // URL: <http://portal.esimo.ru> (дата обращения: 07.05.2019).

110. Загребнева А.Д., Тютюнов Ю.В., Сурков Ф.А., Азовский А.И. Численная реализация модели таксис - реакция - диффузия, описывающей динамику системы хищник – жертва // Известия высших учебных заведений. Северо-Кавказский регион. Серия: Естественные науки. – 2010. – № 2 (156). – С. 12-16.

111. Крыленко, М.В. Научное обеспечение сбалансированного планирования хозяйственной деятельности на уникальных морских береговых ландшафтах и предложения по его использованию на примере азово-черноморского побережья. Том 7. Азовское море: отчет о НИР / М.В. Крыленко, В.В. Крыленко – Геленджик: Южное отделение Института океанологии им. П.П. Ширшова РАН, 2013. – 1861 с.

112. Куропаткин А.П., Шишкин В.М., Бурлачко Д.С., Карманов В.Г., Жукова С.В., Подмарева Т.И., Фоменко И.Ф., Лутынская Л.А. Современные и перспективные изменения солености Азовского моря // Защита окружающей среды в нефтегазовом комплексе. – 2015. – № 11. – С. 7–16.

113. Ладонкина М.Е., Неклюдова О.А., Тишкин В.Ф. Использование разрывного метода Галеркина при решении задач газовой динамики // Матем. Моделирование. – 2014. – 26:1. – С. 17–32.

114. Левич А.П., Булгаков Н.Г. Потребности планктонных водорослей в субстратных и энергетических ресурсах среды: концепция и измерение [Электронный ресурс] / А.П. Левич, Н.Г. Булгаков // chronos.msu.ru URL: http://www.chronos.msu.ru/RREPORTS/levich_optimiz_structury_korm/3/Mon3.htm (дата обращения: 8.10.2009).

115. Матишов Г.Г. Закономерности экосистемных процессов в Азовском море / Г.Г. Матишов [и др.]. – Южн. науч. центр РАН. - М.: Наука, 2006. - 304 с.

116. Никитина А.В., Третьякова М.В. Моделирование процесса альголизации мелководного водоема путем вселения в него штамма зеленой водоросли *Chlorella vulgaris* bin // Известия ЮФУ. Технические науки. - 2012. - №1. - С. 128-133.

117. Растворенные и взвешенные неорганические вещества в водных системах / О.В. Яровая [и др.]; под ред. Яровой О.В. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2014. – 64 с.

118. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем / А.А. Самарский. – М.: Наука, 1989. – 550 с.

119. Самарский А.А. Методы решения сеточных уравнений / А.А. Самарский, Е.С. Николаев. – М.: Наука, 1978. – 592 с.

120. Самарский А.А. Устойчивость разностных схем / А.А. Самарский, А.В. Гулин. – Москва: Наука, 1973. – 415 с.
121. Самарский А.А. Численные методы / А.А. Самарский, А.В. Гулин. – М.: Наука, 1989. – 432 с.
122. Самарский А.А. Численные методы решения задач конвекции-диффузии / А.А. Самарский, П.Н. Вабищевич. – М.: Эдиториал УРСС, 1999.
123. Сухинов А.И. Моделирование сложных систем. Часть 1 / А.И. Сухинов [и др.]. – Ростов-на Дону: ООО «ДГТУ принт», 2019. – 241 с.
124. Сухинов А.И., Белова Ю.В. Математическая модель трансформации форм фосфора, азота и кремния в движущейся турбулентной водной среде в задачах динамики планктонных популяций // Инженерный вестник Дона. - 2015. - № 3 (37). - С. 50.
125. Сухинов А.И., Белова Ю.В., Чистяков А.Е. Решение задачи переноса веществ при больших числах Пекле // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. – 2017. – Т. 18. – № 4. – С. 371-380.
126. Сухинов А.И., Никитина А.В. Математическое моделирование и экспедиционные исследования качества вод в Азовском море. // Известия ЮФУ. Технические науки. - 2011. - №8. - С. 62-73.
127. Сухинов А.И., Чистяков А.Е. Параллельная реализация трехмерной модели гидродинамики мелководных водоемов на супервычислительной системе // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. – 2012. – Т. 13. – С. 290-297.
128. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А. О разностных схемах кабре и крест // Вычислительные методы и программирование. – 2019. - Т. 20. - С. 170-181.
129. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А., Сидорякина В.В., Проценко С.В., Метод учета заполненности ячеек для решения задач гидродинамики со сложной геометрией расчетной области // Математическое моделирование. – 2019. – № 38(8). – С. 79-100.

130. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Якобовский М.В. Точность численного решения уравнения диффузии-конвекции на основе разностных схем второго и четвертого порядков погрешности аппроксимации// Вестн. ЮУрГУ. Сер. Выч. матем. информ. – 2016. – Т. 5. – № 1. – С. 47–62.

131. Темам Р. Уравнения Навье-Стокса. Теория и численный анализ / Р. Темам. - М.: Мир, 1981. – 408 с.

132. Чистяков А.Е. Теоретические оценки ускорения и эффективности параллельной реализации ПТМ скорейшего спуска // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2010. – № 6 (107). – С. 237-249.

133. Чистяков А.Е., Семенякина А.А. Применение методов интерполяции для восстановления донной поверхности // Известия ЮФУ. Технические науки. –2013. – № 4 (141). – С. 21-28.

134. Чистяков А.Е., Фоменко Н.А. Построение и исследование разностных схем, учитывающих степень заполненности контрольного объема для задачи диффузии-конвекции-реакции // Грамота. – 2013. – №1(68). – С. 174-178.