

*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

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Воронеж – 2019

Работа выполнена в научно-исследовательском институте «Математическое моделирование и прогнозирование сложных систем» федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Донской государственный технический университет» (ДГТУ)

**Научный руководитель:** член-корреспондент РАН,  
доктор физико-математических наук, профессор  
**Сухинов Александр Иванович**

**Официальные оппоненты:** **Тютюнов Юрий Викторович**  
доктор физико-математических наук,  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
«Федеральный исследовательский центр Южный научный центр Российской Академии наук» (ЮНЦ РАН), главный научный сотрудник

**Жуков Михаил Юрьевич**  
доктор физико-математических наук, профессор,  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южный федеральный университет», кафедра вычислительной математики и математической физики, заведующий

**Ведущая организация:** Институт нефтехимии и катализа – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук

Защита состоится 04 марта 2020 г. в 15:10 часов на заседании диссертационного совета Д 212.038.20 на базе Воронежского государственного университета по адресу: 394018, Россия, г. Воронеж, Университетская площадь, 1, ауд. 333.

С диссертацией и авторефератом можно ознакомиться в библиотеке Воронежского государственного университета, а также на сайте [http://www.science.vsu.ru/dissertations/8306/Диссертация\\_Белова\\_Ю.В..pdf](http://www.science.vsu.ru/dissertations/8306/Диссертация_Белова_Ю.В..pdf)

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения, просьба направлять по адресу: 394018, г. Воронеж, Университетская пл., 1, ученому секретарю диссертационного совета Д 212.038.20.

Автореферат разослан 15 января 2020 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета Д 212.038.20,  
доктор физико-математических наук



С.А. Шабров

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы исследования.** Прибрежные системы являются уникальными водными объектами. Азовское море является наиболее крупной прибрежной системой Юга России и обладает рядом специфических черт, такими как значительный перепад солености, небольшая глубина, почти равномерный прогрев по всей толще, большой относительно объема моря речной сток. Проведение относительно простых натуральных экспериментов и математическое моделирование биогеохимических и гидродинамических процессов является более оптимальным подходом, чем проведение дорогостоящих натуральных исследований для построения прогнозов состояния экосистемы Азовского моря. Поэтому построение пространственно-трехмерных математических моделей биогеохимических циклов, которые определяют биологическую продуктивность прибрежных систем и состояние водной экосистемы в целом, скомплексированных 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.

**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.** 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. Примерами существующих программных комплексов, позволяющих моделировать гидродинамические и биогеохимические процессы, могут быть: SALMO (2006 г.); CHARISMA (2009 г.); «Mars3d» (2009 г.); CHTDM (Climatic Hydro Thermal 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.); PHOENICS (2015 г.); Экоинтегратор (2016 г.) и др.

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 различные схемы, например, «кабаре». Схемы «кабаре» были разработаны для решения задач аэроакустики. В работе Глотова В.Ю., Головизнина В.М. и др. (2014 г.) 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 Сухинова А.И., Чистякова А.Е. (2019 г.). Данный класс схем практически не обладает сеточной вязкостью и на его основе достаточно точно можно моделировать сложные структуры течения, например, вихревые.

**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 **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 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 математической физики, теория разностных схем, разработанная Самарским А.А. и его научной школой, 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 использовался метод поправки к давлению. 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 Visual Studio. 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, получены неравенства, гарантирующие существование и единственность поставленной задачи, сформулирована теорема. В работе предложена 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 предложенной 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. Восстановлены поля солености и температуры Азовского моря по картографической информации с использованием схем повышенного порядка аппроксимации. Построенный программный комплекс позволяет строить прогноз динамики развития экосистемы Азовского моря в условиях современного осолонения.

**Область исследований.** Тема исследований диссертационной работы соответствует специальности 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ». Область исследования соответствует паспорту специальности 05.13.18 в п. 1 Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений; п. 2 Развитие качественных и приближенных аналитических методов исследования математических моделей; п. 5 Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента.

**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 дискретизация непрерывной модели. Выполнено исследование точности и устойчивости построенной разностной схемы. Устойчивость предложенной схемы исследована методом гармоник, получено ограничение на шаги по времени и пространству. Исследована точность предложенной разностной схемы с использованием разложения в ряд Фурье. Предложенная разностная схема аппроксимирует модель со вторым порядком

относительно временного шага и третьим – относительно нормы шагов по пространству. Результаты численных расчетов согласуются со средне-многолетними натурными данными.

**Научная и практическая значимость работы.** В рамках диссертационной работы построены точные пространственно-трехмерные математические модели биогеохимических циклов и гидродинамики прибрежных систем, проведена линеаризация непрерывной модели, получены условия существования и единственности решений цепочки начально-краевых задач, построены дискретные аналоги этих моделей с использованием схем, обладающих большей точностью при больших значениях сеточного числа Пекле, с учетом метода заполненности ячеек. 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, что является важной практической задачей.

**Основные положения, выносимые на защиту:**

– пространственно-трехмерная математическая модель биогеохимических циклов, учитывающая влияние солёности и температуры на развитие популяций фитопланктона, поглощение фитопланктоном питательных веществ, трансформацию форм биогенов;

– линеаризация нелинейных функций источников для построенной модели на временной сетке и теорема о существовании и единственности решений взаимосвязанных по начальным и конечным условиям цепочек начально-краевых задач;

– модель гидродинамики мелководных водоемов для расчета 3D вектора скорости движения водной среды, температуры и солёности;

– разработанная разностная схема, представляющая собой линейную комбинацию центральной разностной схемы и схемы «кабаре», обладающая большей точностью при больших значениях сеточного числа Пекле ( $2 < Pe \leq 20$ ), исследование свойств предложенной разностной схемы и сравнение со стандартными разностными схемами;

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

– выбор оптимального итерационного метода;

– получение начальных условий и уточнение параметров системы уравнений;

– восстановленные по картографической информации поля солёности и температуры для Азовского моря;

– программный комплекс для моделирования биогеохимических циклов в Азовском море на C++, визуализация результатов.

**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.

**Апробация работы.** Результаты, полученные в рамках диссертационной работы, докладывались и обсуждались на следующих конференциях и научных семинарах: Параллельные вычислительные технологии, ПаВТ'2019 (г. Калининград, 2019); 4th International Conference on Stochastic Methods (п. Дивноморское, г. Геленджик, 2019); International Scientific-Technical Conference "Dynamics of Technical Systems" (г. Ростов-на-Дону, 2019); Young Scientist's Third International Workshop on Trends in Information Processing, YSIP-2019 (п. Архыз, г. Ставрополь, 2019); International Scientific-Technical Conference "Dynamics of Technical Systems" (г. Ростов-на-Дону, 2018); Современные проблемы математического моделирования, обработки изображений и параллельных вычислений 2017 (п. Дивноморское, г. Геленджик, 2017); Научный семинар кафедры высшей математики ТТИ ЮФУ (г. Таганрог, 2010); Научный семинар кафедры высшей математики ТТИ ЮФУ (г. Таганрог, 2009). Работа выполнена при поддержке РФФ (проект № 17-11-01286).

**Публикации.** Основные результаты по теме диссертации изложены в 18 научных работах, 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.

**Объем 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.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**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.

**В первой главе** приводится описание цепочек превращений основных биогенных веществ – фосфора, азота и кремния, особенностей развития зеленых, синезеленых и диатомовых водорослей, проведен обзор и анализ существующих моделей и функций, описывающих зависимости динамики развития фитопланктонных популяций от поглощения питательных веществ, солености и температуры.

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

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} + u \frac{\partial q_i}{\partial x} + v \frac{\partial q_i}{\partial y} + w \frac{\partial q_i}{\partial z} = \operatorname{div}(k \operatorname{grad} q_i) + R_{q_i}, \quad (1)$$

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, [м<sup>2</sup>/с];  $R_{q_i}$  - функция-источник биогенных веществ, [мг/(л·с)]. В уравнении (1) индекс  $i$  указывает на вид субстанции:  $F_1$  –

зеленая водоросль *Chlorella vulgaris*,  $F_2$  – синезеленая водоросль *Aphanizomenon flos-aquae*,  $F_3$  – диатомовая водоросль *Skeletonema costatum*,  $PO_4$  – фосфаты,  $POP$  – взвешенный органический фосфор,  $DOP$  – растворенный органический фосфор,  $NO_3$  – нитраты,  $NO_2$  – нитриты,  $NH_4$  – аммоний,  $Si$  – растворенный неорганический кремний (кремниевые кислоты).

Химико-биологические источники описаны следующими уравнениями

$$\begin{aligned}
 R_{F_i} &= C_{F_i} (1 - K_{F_i R}) q_{F_i} - K_{F_i D} q_{F_i} - K_{F_i E} q_{F_i}, \quad i = \overline{1, 3}, \\
 R_{POP} &= \sum_{i=1}^3 s_P K_{F_i D} q_{F_i} - K_{PD} q_{POP} - K_{PN} q_{POP}, \\
 R_{DOP} &= \sum_{i=1}^3 s_P K_{F_i E} q_{F_i} + K_{PD} q_{POP} - K_{DN} q_{DOP}, \\
 R_{PO_4} &= \sum_{i=1}^3 s_P C_{F_i} (K_{F_i R} - 1) q_{F_i} + K_{PN} q_{POP} + K_{DN} q_{DOP}, \quad (2) \\
 R_{NH_4} &= \sum_{i=1}^3 s_N C_{F_i} (K_{F_i R} - 1) \frac{f_N^{(2)}(q_{NH_4})}{f_N(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4})} q_{F_i} + \sum_{i=1}^3 s_N (K_{F_i D} + K_{F_i E}) q_{F_i} - K_{42} q_{NH_4}, \\
 R_{NO_2} &= \sum_{i=1}^3 s_N C_{F_i} (K_{F_i R} - 1) \frac{f_N^{(1)}(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4})}{f_N(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4})} \cdot \frac{q_{NO_2}}{q_{NO_2} + q_{NO_3}} q_{F_i} + K_{42} q_{NH_4} - K_{23} q_{NO_2}, \\
 R_{NO_3} &= \sum_{i=1}^3 s_N C_{F_i} (K_{F_i R} - 1) \frac{f_N^{(1)}(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4})}{f_N(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4})} \cdot \frac{q_{NO_3}}{q_{NO_2} + q_{NO_3}} q_{F_i} + K_{23} q_{NO_2}, \\
 R_{Si} &= s_{Si} C_{F_3} (K_{F_3 R} - 1) q_{F_3} + s_{Si} K_{F_3 D} q_{F_3}.
 \end{aligned}$$

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.

Скорость роста фитопланктона определяется выражениями

$$\begin{aligned}
 C_{F_{1,2}} &= K_{NF_{1,2}} f_T(T) f_S(S) \min \left\{ f_P(q_{PO_4}), f_N(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4}) \right\}, \\
 C_{F_3} &= K_{NF_3} f_T(T) f_S(S) \min \left\{ f_P(q_{PO_4}), f_N(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4}), f_{Si}(q_{Si}) \right\},
 \end{aligned}$$

где  $K_{NF}$  – максимальная удельная скорость роста фитопланктона.

Зависимости температуры и солености

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

где  $T_{opt}$ ,  $S_{opt}$  – температура и соленость, оптимальные для данного вида фитопланктона;  $\alpha > 0$ ,  $\beta > 0$  – коэффициенты ширины интервала толерантности фитопланктона к температуре и солености соответственно.



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

Для концентраций  $q_i$  будем предполагать

на боковой границе

$$- q_i = 0, \text{ на } \sigma, \text{ если } u_n < 0, i \in M; \quad (3)$$

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

$$- \frac{\partial q_i}{\partial z} = 0, \text{ на } \Sigma_o - \text{ поверхность водоема, } i \in M; \quad (4)$$

$$- \frac{\partial q_i}{\partial z} = \varepsilon_{1,i} q_i, i \in \{F_1, F_2, F_3\}, \frac{\partial q_i}{\partial z} = \varepsilon_{2,i} q_i, \\ i \in \{PO_4, POP, DOP, NO_3, NO_2, NH_4, Si\} \text{ на дне } \Sigma_H, \quad (5)$$

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 солёности и температуры, а также начальные значения функций  $q_i$

$$q_i(x, y, z, 0) = q_{0i}(x, y, z), \quad (x, y, z) \in \bar{G}, t = 0, i \in M, \quad (6)$$

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

Для построенной непрерывной модели проведена линеаризация функций правых частей в интервале  $0 < t < T$  на равномерной временной сетке  $\omega_\tau = \{t_n = n\tau, n = 0, 1, \dots, N; N\tau = T\}$ . Для линеаризованной по правым частям системы

уравнений получены условия существования и единственности решения. Сформулирована

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

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

где  $R_{q_i}^{n-1}(q_i)$  – линеаризованные химико-биологические источники, соответствующие уравнениям (2), с дополнительными начальными условиями

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

$q_i^n(x, y, z, t_{n-1}) = q_i^{n-1}(x, y, z, t_{n-1}), (x, y, z) \in \bar{G}, n = 2, \dots, N, i \in M$  – для каждого временного слоя и граничными условиями (3)-(5).

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  $\Sigma$  является кусочно-гладкой, и для каждого  $n = \overline{1, N}$  выполняются неравенства

$$\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} + K_{F_1D} + K_{F_1E} > K_{NF_1} \max \left\{ f_P^{n-1}(q_{PO_4}), f_N^{n-1}(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4}) \right\} (1 - K_{F_1R})$$

$$\frac{4k_h}{H_x^2} + \frac{4k_h}{H_y^2} + \frac{4k_v^0}{H_z^2} + K_{F_2D} + K_{F_2E} > K_{NF_2} \max \left\{ f_P^{n-1}(q_{PO_4}), f_N^{n-1}(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4}) \right\} (1 - K_{F_2R})$$

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

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

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

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

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  $t_{n-1} \leq t \leq t_n, n = \overline{2, N}$ .

Для расчета 3D полей вектора скорости движения водной среды, температуры и солёности использована математическая модель гидродинамики мелководных водоемов, для описания которой используются уравнения движения (Навье-Стокса), уравнение неразрывности для жидкости с изменяющейся плотностью, уравнения транспорта тепла и солей, задается уравнение состояния для плотности.

Решение задач переноса веществ, основанных на уравнениях адвекции-диффузии, требует отдельной разработки качественных аппроксимаций адвективных членов, так как использование стандартных схем при больших значениях сеточных чисел Пекле ведет к потере точности. Для решения подобных задач **во второй главе** разработана разностная схема, представляющая собой линейную комбинацию центральной разностной схемы и схемы «кабаре», исследованы устойчивость и точность полученной разностной схемы. Построен дискретный аналог модели биогеохимических циклов в мелководных водоемах на основе предложенной разностной схемы с учетом заполненности ячеек.

Разностная схема, представляющая собой линейную комбинацию центральной разностной схемы и схемы «кабаре», для аппроксимации нестационарного одномерного уравнения конвекции имеет вид

$$\frac{q_i^{n+1} - q_i^n}{\tau} + \frac{q_{i-1}^n - q_i^{n-1}}{2\tau} + u \frac{q_{i+1}^n + 4q_i^n - 5q_{i-1}^n}{4h} = 0. \quad (7)$$

На рисунке 1 продемонстрированы результаты численного решения задачи распространения возмущения типа «ступенька» – уравнения адвективного переноса стандартными разностными схемами и схемой (7) и показано, что при аппроксимации левой разностной схемой происходит «размытие» фронта на несколько шагов по пространству, при аппроксимации схемой «кабаре» возникают осцилляции (энтропийные возмущения). Схема (7) дает наиболее точное приближение функции, описывающей движение фронта возмущения.

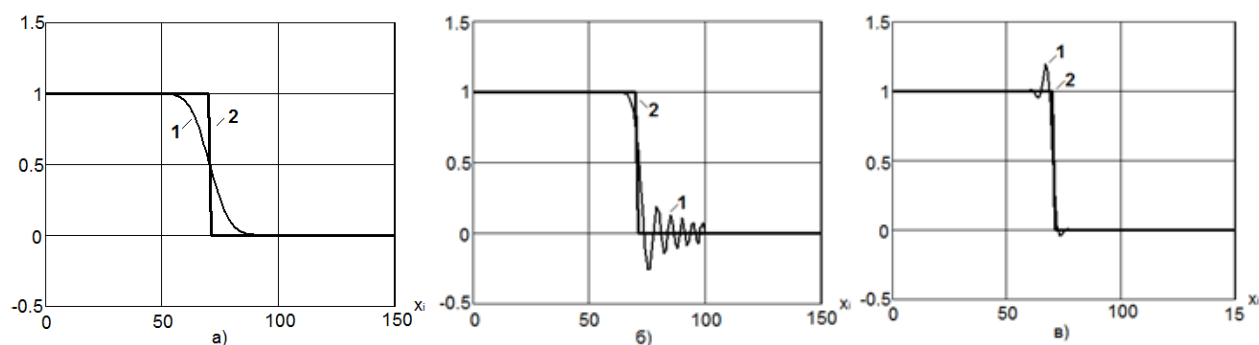


Рисунок 1 – Решение задачи движения фронта частиц, а) левой разностной схемой; б) схемой «кабаре»; в) схемой (7). Здесь 1 – численное решение, 2 – точное решение.

**Устойчивость** разностной схемы (7) исследована методом гармоник. Схема устойчива при числах Куранта, находящихся в интервале  $[0, 0.75]$ .

Предложенная разностная схема, представляющая собой линейную комбинацию центральной разностной схемы и схемы «кабаре», для аппроксимации нестационарного одномерного уравнения конвекции-диффузии имеет вид

$$\frac{q_i^{n+1} - q_i^n}{\tau} + \frac{q_{i-1}^n - q_i^{n-1}}{2\tau} + u \frac{q_{i+1}^n + 4q_i^n - 5q_{i-1}^n}{4h} - 3\mu \frac{q_{i+1}^n - 2q_i^n + q_{i-1}^n}{2h^2} = 0. \quad (8)$$

На рисунке 2 продемонстрированы результаты численного решения задачи распространения возмущения типа «ступенька» – уравнения конвекции-диффузии, схемой (8) при различных значениях сеточного числа Пекле ( $Pe=2$ ,  $Pe=25$ ,  $Pe \rightarrow \infty$ ) и показано, что схема (8) обеспечивает более точную аппроксимацию по сравнению с левой разностной схемой при больших значениях сеточного числа Пекле ( $Pe > 2$ ). Исследование **погрешности аппроксимации** предложенной разностной схемы проведена с помощью рядов Фурье. Показано, что данная схема аппроксимирует оператор конвективного переноса с третьим порядком точности относительно нормы шагов по пространству. Можно сделать вывод, что схема (8), 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  $2 < Pe \leq 20$ .

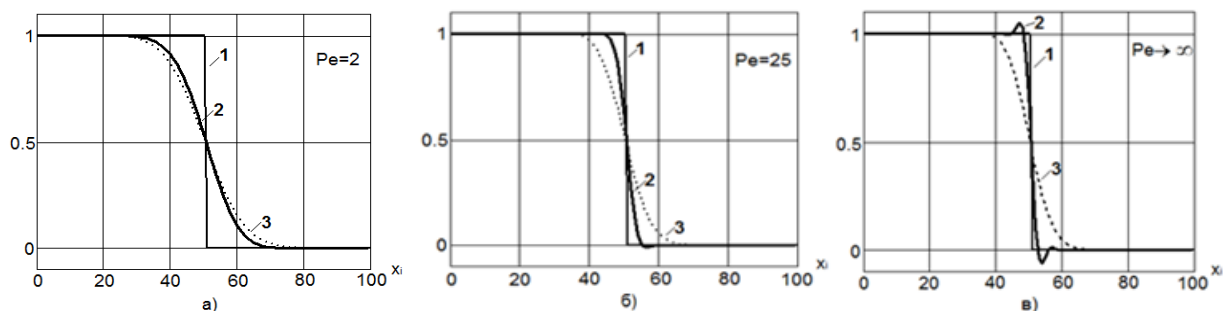


Рисунок 2 - Графики 1- функция, описывающая движение фронта частиц, 2 – приближенное решение с использованием предложенной разностной схемы, 3 – приближенное решение с использованием левой разностной схемы при значениях сеточных чисел Пекле а)  $Pe=2$ , б)  $Pe=25$ , в)  $Pe \rightarrow \infty$

На примере решения модельной нестационарной двумерной задачи конвекции-диффузии 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».

**Третья глава** посвящена выбору оптимального итерационного метода решения систем сеточных уравнений, а также подбору значений параметров системы и начальных условий для решения задачи биогеохимических циклов в мелководных водоемах. В результате проведенного анализа итерационных методов для решения поставленной задачи применен адаптивный модифицированный попеременно-треугольный итерационный метод, так как он требует наименьшего числа итераций для заданной точности при решении задач с кососимметричным оператором в условиях ограниченности сеточного числа Пекле. Также восстановлены поля солености и температуры (рисунок 3) по картографической информации и спутниковым снимкам с использованием схем повышенного порядка аппроксимации.

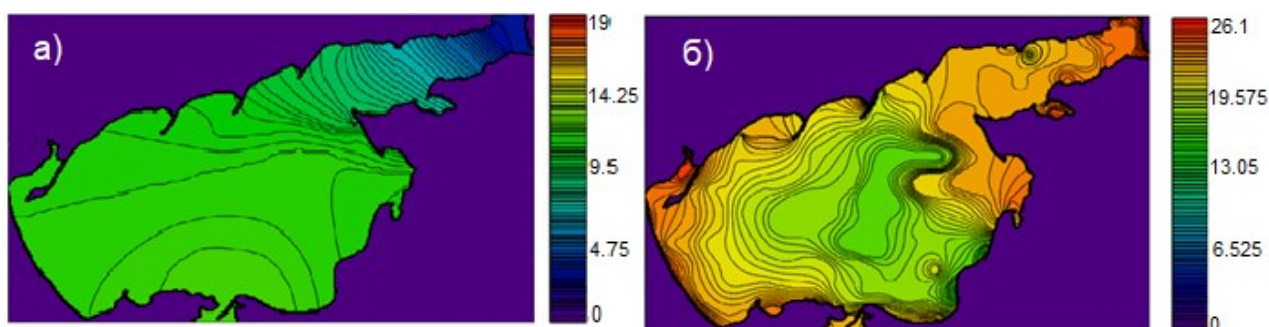


Рисунок 3 – а) восстановленное поле солености Азовского моря; б) восстановленное поле температуры Азовского моря.

**Четвертая глава** посвящена разработке программного комплекса и проведению вычислительного эксперимента по моделированию биогеохимических циклов в Азовском море.

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.

Программный блок «Биогеохимические циклы» 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» представлена на рисунке 4.

Расчетная область соответствует физическим размерам Азовского моря: длина

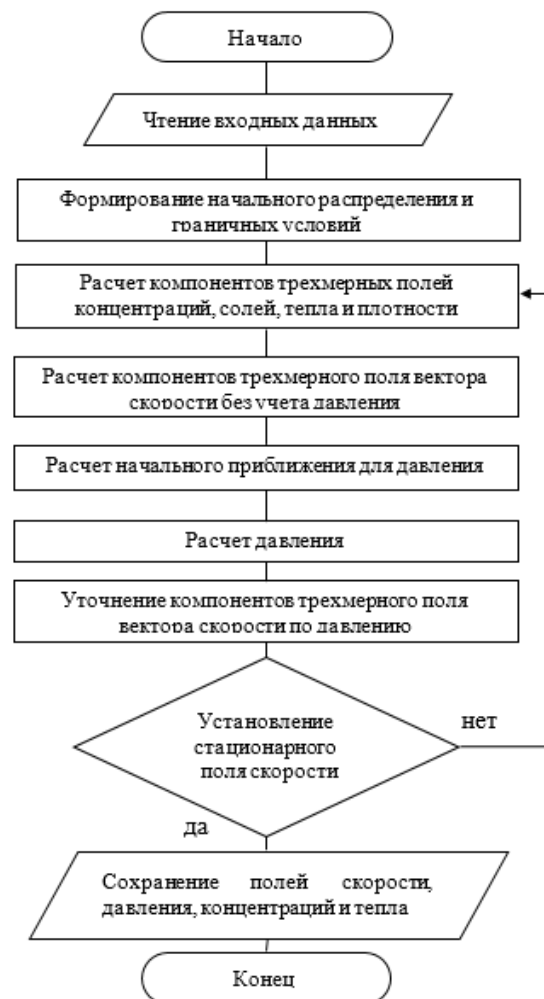


Рисунок 4 – Схема алгоритма программы

равна 355 км, ширина равна 233 км, шаг по пространству в горизонтальном направлении 500 м. Временной интервал - 30 суток. В результате численного эксперимента получили картину распределения концентраций трех видов фитопланктона (зеленых, синезеленых и диатомовых водорослей), соединений фосфора, азота и кремния. Рисунки 5-10 отражают влияние солености и температуры на развитие трех видов фитопланктона, поглощение фитопланктоном фосфатов и форм азота, а также поглощение кремния диатомовыми водорослями. Результаты моделирования совпадают со средне-многолетними натурными данными.

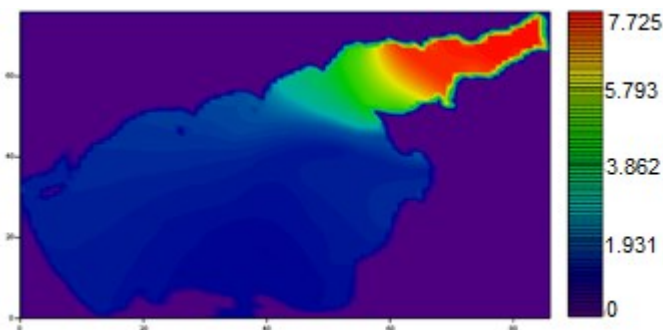


Рисунок 5 – Распределение концентрации зеленой водоросли *Chlorella vulgaris*

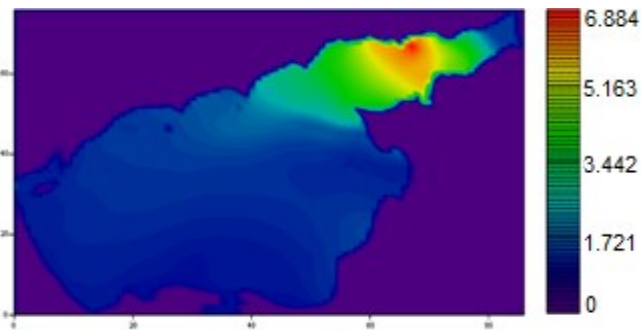


Рисунок 6 – Распределение концентрации синезеленой водоросли *Aphanizomenon flos-aquae*

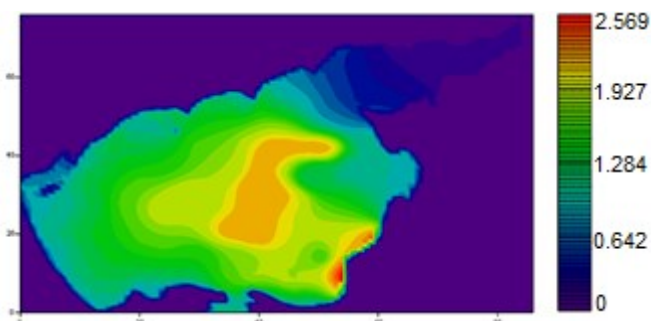


Рисунок 7 – Распределение концентрации диатомовой водоросли *Skeletonema costatum*

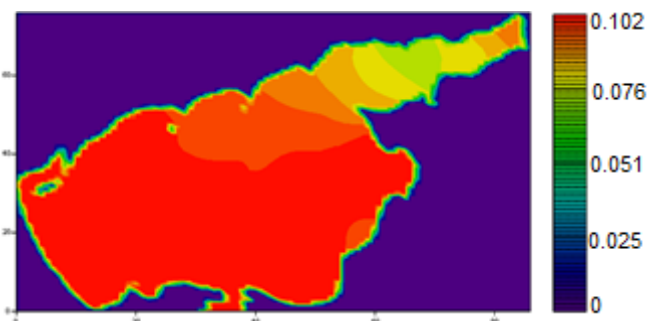


Рисунок 8 – Распределение концентрации фосфатов

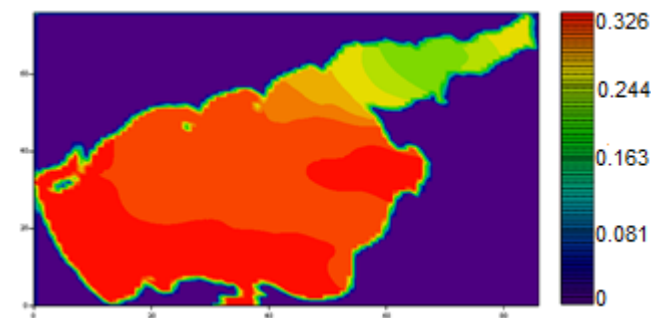


Рисунок 9 – Распределение концентрации нитратов



Рисунок 10 – Распределение концентрации растворенного неорганического кремния

С 2007 года по настоящее время наблюдается осолонение Азовского моря, что влияет на изменение видового состава биоты, пресноводные виды вытесняются морскими. На основе разработанного программного комплекса проведено прогнозное моделирование динамики изменения концентрации фитопланктонных популяций и биогенных веществ в Азовском море с течением времени при повышении уровня солености моря.

**В заключении** приведены основные результаты, полученные в диссертационной работе.

1. Построены нестационарные пространственно-неоднородные модели биогеохимических циклов, описывающих изменение концентраций основных биогенных веществ (фосфора, азота и кремния), фитопланктонных популяций (синезеленых, зеленых и диатомовых 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 решений 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 с учетом адвективного и



микротурбулентного движения водной среды, стоков и источников на границе, неравномерного распределения температуры и солености.

5. Выполнены прогностические расчеты распределения 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 солености 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 и других факторов выполнен прогноз эволюции изменения видового состава планктонных популяций. Получен пространственно-временной прогноз вытеснения пресноводных видов фитопланктона морскими.

### **ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ**

#### **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. 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.