УДК 519.6 DOI: 10.14529/mmp250205

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И МЕТОДЫ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ БИОЛОГИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ С УЧЕТОМ ВЛИЯНИЯ КИСЛОРОДНОГО РЕЖИМА

А.И. Сухинов[1]***, Ю.В. Белова***[1]***, И.Ю. Кузнецова***[1,2]***, А.М. Атаян***[1]***,***
А.Е. Чистяков[1]
[1]Донской государственный технический университет, г. Ростов-на-Дону, Российская Федерация
[2]Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону, Российская Федерация

В данной статье описан комплекс математических моделей, позволяющих строить среднесрочные прогнозы процессов биологической кинетики, протекающих в присутствии кислорода в водной среде. В модели гидродинамики использован регуляризатор по Б.Н. Четверушкину, позволяющий получить волновое уравнение для расчета давления. Исследована устойчивость и погрешность аппроксимации разностной схемы для уравнения расчета давления. Применение данного метода позволило сократить вычислительную трудоемкость задачи расчета давления. Построен программный комплекс, в основе которого лежат скомплексированные модели гидродинамики и гидробиологии, с использованием технологии параллельного программирования MPI. Получены распределения концентраций основных биогенных веществ и популяций фитопланктона в зависимости от метеорологических условий. Применяемые в исследовании параллельные алгоритмы позволяют строить среднесрочные прогнозы биогеохимических процессов в прибрежных системах раз в режиме ускоренного времени.

Ключевые слова: модель биологической кинетики; регуляризатор по Б.Н. Четверушкину; кислородный режим; параллельные алгоритмы; Message Passing Interface (MPI).

Введение

Азовское море, являясь прибрежной системой, обладает значительной стратификацией плотности водной толщи вследствие особых гало- и терморежимов. По причине этого в летний период водоем характеризуется особым кислородным режимом: при определенных погодных условиях, таких как штиль и жаркая погода, могут возникнуть зоны с пониженным содержанием кислорода, что влечет за собой кислородное голодание и гибель ихтиофауны. Также со стоками рек в Азовское море поступает большое количество биогенных веществ, что может вызывать эвтрофикацию эстуарной зоны.

Разработкой математических моделей биологической кинетики занимаются многие российские и зарубежные ученые. В работе [1] приведена одномерная математическая модель баланса кислорода в Черном море и выявлены различные зависимости потребления частиц газа в растворенном состоянии на разных глубинах. В работе [2] приводится обзор различных методов математического моделирования пространственно-временной динамики различных процессов, происходящих в водно среде.

В данной работе приведена четырехмерная математическая модель биологической кинетики и динамики популяций фитопланктона, предназначенная для исследования режимов протекания химико-биологических процессов, возникающих при различных погодных условиях. Описанная модель биологической кинетики скомплексирована с моделью гидродинамики, что позволяет не только моделировать химико-биологические превращения, как это описано во многих аналогичных работах [3], но и рассматривать перемещение субстанций в результате действия процессов конвекции-диффузии. Азовское море характеризуется сложной береговой линией, поэтому течения могут образовывать вихри различных масштабов, которые способны удерживать и накапливать биогенные и загрязняющие вещества, а также биомассу [4]. Использованный в рамках данного исследования комплексный подход актуален, так как позволяет учитывать многие важные процессы, протекающие в прибрежных системах.

При построении математической модели гидродинамики, описывающей движения водной среды в мелководном водоеме, примером которого является Азовское море, учтен относительно малый временной множитель-гиперболизатор. Подобная модификация уравнения неразрывности была предложна Б.Н. Четверушкиным [5]. Данный подход позволяет существенно сократить вычислительную трудоемкость численного решения задачи за счет изменения вида уравнения для расчета давления.

Использование традиционных вычислительных систем с одним или несколькими процессорными ядрами при решении задач моделирования гидродинамических процессов на сетках, содержащих 10^6 до 10^8 вычислительных узлов, приводит к значительным затратам машинного времени, достигающим сотен или даже тысяч минут. Для эффективного расчета подобных задач необходимо учитывать не только объем численных операций, но и многократный обмен данными между узлами вычислительной системы. Обеспечение оперативного прогноза возможно посредством создания высокопроизводительных параллельных алгоритмов и специализированных программ, предназначенных для многопроцессорных вычислительных систем.

Разработка и внедрение таких параллельных алгоритмов, а также соответствующего программного обеспечения для решения гидродинамических задач на многопроцессорных платформах, в настоящее время представляют собой одно из ключевых направлений научных исследований. Эффективность вычислительного процесса существенно возрастает за счёт оптимизации процедур обмена данными между процессами, а также благодаря применению распределённых и гибридных методов параллелизации (MPI – *Message Passing Interface*) [6]. Внедрение современных подходов к выполнению численных расчетов способствует не только существенному ускорению вычислений, но и повышению точности конечных результатов, что особенно важно при анализе сложных гидродинамических явлений.

1. Постановка задачи

Для моделирования биогеохимических процессов в прибрежных системах необходим комплексный подход, основанный на использовании математических моделей гидродинамики и биологической кинетики. Результатом решения задачи гидродинамики является вектор движения водной среды, который включается в набор входных данных для модели динамики фитопланктонных популяций и биогеохимических циклов.

Расчет трехмерного поля движения водной среды в мелководном водоеме проводится на основе математической модели, включающей в себя:
– уравнение движения (Навье – Стокса):

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

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

$$w'_t + uw'_x + vw'_y + ww'_z = -\frac{1}{\rho}P'_z + \left(\mu w'_x\right)'_x + \left(\mu w'_y\right)'_y + \left(\nu w'_z\right)'_z + 2\Omega u\cos\theta + g, \quad (3)$$

– уравнение неразрывности с учетом множителя-гиперболизатора в случае переменной плотности:

$$\rho_t' + \tau^* \rho_{tt}'' + (\rho u)_x' + (\rho v)_y' + (\rho w)_z' = 0, \tag{4}$$

где $\mathbf{V} = \{u, v, w\}$ – компоненты вектора скорости; $\mathbf{P}$ – полное гидродинамическое давление; ρ – плотность водной среды; μ, ν – горизонтальная и вертикальная составляющие коэффициента турбулентного обмена; $\mathbf{\Omega} = \Omega \cdot (\cos\theta \cdot \mathbf{j} + \sin\theta \cdot \mathbf{k})$ – угловая скорость вращения Земли; θ – широта места; g – ускорение свободного падения; $\tau^* \sim h/c$ – параметр регуляризации, где h – шаг расчетной сетки, c – скорость звука.

В процессе моделирования вместо полного гидродинамического давления $\mathbf{P}$ будем использовать сумму давления столба жидкости, которая зависит только от глубины, и гидродинамической части:

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

где p – превышение давления над гидростатическим приближением, рассчитанным в случае невозмущенной жидкости; ρ_0 – плотность пресной воды при нормальных условиях.

Система уравнений (1) – (4) рассматривается при следующих краевых условиях:
– устье рек Дон и Кубань, озеро Сиваш: $\mathbf{V} = \mathbf{V_0}$, $P_{\mathbf{n}}' = 0$;
– берега и дно Азовского моря: $\rho\mu (\mathbf{V}_\tau)_{\mathbf{n}}' = -\tau$, $V_{\mathbf{n}} = 0$, $P_{\mathbf{n}}' = 0$;
– поверхность Азовского моря: $\rho\mu (\mathbf{V}_\tau)_{\mathbf{n}}' = -\tau$, $w = -\omega - P_t'/\rho g$, $P_{\mathbf{n}}' = 0$;
– выход в Черное море: $P_{\mathbf{n}}' = 0$, $V_{\mathbf{n}}' = 0$,
где ω – интенсивность испарения жидкости; $V_{\mathbf{n}}$, V_τ – нормальная и тангенциальная составляющие вектора скорости; $\tau = \{\tau_x, \tau_y, \tau_z\}$ – вектор тангенциального напряжения [7].

Математическая модель биологической кинетики и динамики популяций фитопланктона основана на работах [1, 8, 9] и строится на системе уравнений конвекции-диффузии-реакции, записанных в симметричной форме, с нелинейными коэффициентами и функциями источников R_{q_i} :

$$(q_i)_t' + \frac{1}{2} \left(\nabla \cdot (\mathbf{V} q_i) + (\mathbf{V} \cdot \nabla) q_i \right) = \operatorname{div} (\mathbf{k} \cdot \nabla q_i) + R_{q_i}, \tag{5}$$

где q_i – концентрация i-й субстанции, $i = \overline{1, 8}$; $\mathbf{V}$ – вектор скорости водного потока; $\mathbf{k} = (\mu, \mu, \nu)$ – коэффициент турбулентного обмена; R_{q_i} – функция-источник биогенных веществ; ∇ – градиент.

Система (5) описывает пространственно-временную динамику популяций основных видов фитопланктона (q_1), потребление ими основных питательных веществ: фосфатов (q_2), нитратов (q_5), нитритов (q_6), аммиака (q_7). Кислород (q_8) присутствует в воде в растворенной форме (гидратированные молекулы O_2), расходуется на окислительные реакции: фосфатофикацию растворенного органического фосфора (q_3) и взвешенного органического фосфора (q_4), а также нитрификацию аммиака до нитритов и нитритов до нитратов.

Здесь K_{FR} – удельная скорость дыхания фитопланктона; K_{FD} – удельная скорость отмирания фитопланктона; K_{FE} – 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 в присутствии кислорода; K_{23} – удельная скорость окисления нитритов до нитратов в процессе нитрификации в присутствии кислорода; s_P, s_N, s_O – нормировочные коэффициенты в соответствии со стехиометрическим соотношением.

Скорость роста фитопланктона определяется выражениями:

$$C_F = K_{NF} f_I(I) f_T(T) f_S(S) \min\{f_P(q_{PO_4}), f_N(q_{NO_3}, q_{NO_2}, q_{NH_4}),\}$$

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

Таблица

Функции правых частей для системы уравнений (5)

Индекс субстации (i)	**Нелинейная функция-источник** R_{q_i}
1	$C_F\,(1 - K_{FR})\, q_1 - K_{FD} q_1 - K_{FE} q_1$
2	$s_p C_F\,(K_{FR} - 1)\, q_1 + K_{DN} q_3 + K_{PN} q_4$
3	$s_p K_{FE} q_1 - K_{DN} q_3 + K_{PD} q_4$
4	$s_p K_{FD} q_1 - K_{PD} q_4 - K_{PN} q_4$
5	$s_N C_F\,(K_{FR} - 1)\, \frac{f_N^{(1)}(q_5,q_6,q_7)}{f_N(q_5,q_6,q_7)} \frac{q_5}{q_5+q_6} q_1 + K_{23} q_6$
6	$s_N C_F\,(K_{FR} - 1)\, \frac{f_N^{(1)}(q_5,q_6,q_7)}{f_N(q_5,q_6,q_7)} \frac{q_6}{q_5+q_6} q_1 - K_{23} q_6 + K42 q_7$
7	$s_N C_F\,(K_{FR} - 1)\, \frac{f_N^{(2)}(q_7)}{f_N(q_5,q_6,q_7)} q_1 - s_N\,(K_{FD} + K_{FE})\, q_1 - K42 q_7$
8	$s_O R_2 + c'_{O_2} K_{42} q_7 - c''_{O_2} K_{23} q_6$

Зависимости от температуры и солености:

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

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.

Зависимость скорости роста фитопланктона от освещенности:

$$f_I(I) = \frac{I}{I_{opt}} exp\left(1 - \frac{I}{I_{opt}}\right),$$

где $I(h) = I_0 exp\,(-\theta h)$, I_0 – суммарная солнечная радиация на водной поверхности, $\theta = k_0 + k_P q_F$ – коэффициент затухания в результате самозатенения при концентрации фитопланктона равной q_F, h – глубина водоема; I_{opt} – оптимальная освещенность. Для пресной воды $\theta = 0,046 + 0,04 q_F$ [10]. Функциональные ависимости содержания биогенов f_P, f_N, $f_N^{(1)}$, $f_N^{(2)}$ определяются в форме Михаэлиса – Ментен, применен закон ограничивающего фактора Либиха [9]. Будем предполагать, что коэффициенты, входящие в выражения для функций источников, положительны и не зависят от времени t.

Для системы (1) 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 $u_{\mathbf{n}}$ – нормальная по отношению к Σ составляющая вектора скорости водного потока, $\mathbf{n}$ – вектор внешней нормали к Σ. Для концентраций q_i будем предполагать:

– на σ:

$$q_i = 0,\ \text{если}\ u_{\mathbf{n}} < 0;\ \frac{\partial q_i}{\partial \mathbf{n}} = 0,\ \text{если}\ u_{\mathbf{n}} \geq 0; \tag{6}$$

– на Σ_O:

$$\frac{\partial q_i}{\partial z}=0,\ i=\overline{1,7};\ \frac{\partial q_8}{\partial z}=\varphi\left(q_8\right); \tag{7}$$

– на Σ_H:

$$\frac{\partial q_i}{\partial z}=\varepsilon_i q_i,\ i=\overline{1,8}, \tag{8}$$

где ε_i – неотрицательные постоянные, учитывающие опускание планктона на дно и его затопление, поглощение питательных веществ донными отложениями. Поступление кислорода на поверхности водоема в результате абсорбции (растворения в воде) задается функцией вида $\varphi\left(q_8\right)=\alpha\left(Sc/660\right)^{-0,5}\left(\beta-q_8\right)$, где β – коэффициент насыщения кислородом (равен 31 мл/л для кислорода при 20 ѳC) [11]; Sc – число Шмидта (равно отношению кинематической вязкости воды к коэффициенту диффузии газа в воде, для кислорода $Sc=500$); α – эталонная скорость газообмена [12], задается как функция скорости ветра выражением $\alpha(u)=0,365u^2+0,46u$.

Входными данными для системы уравнений (5) являются вектор скоростей водного потока $\mathbf{V}$, рассчитанный на основе модели (1) – (4), значения солености S и температуры T, а также начальные значения функций q_i:

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

$$\mathbf{V}(x,y,z,0)=\mathbf{V}_0(x,y,z),\ T(x,y,z,0)=T_0(x,y,z),\ S(x,y,z,0)=S_0(x,y,z). \tag{9}$$

2. Схемы расщепления по физическим процессам для уравнений гидродинамики

При построении разностных схем для задачи гидродинамики (1) – (4) используем метод расщепления по физическим процессам, что приводит к решению трех взаимосвязанных подзадач [13, 14]. В результате решения первой подзадачи диффузии-конвекции получаем поле вектора скорости водного потока на промежуточном временном слое без учета давления:

$$\frac{\tilde{u}-u}{\tau}+u\bar{u}'_x+v\bar{u}'_y+w\bar{u}'_z=\left(\mu\bar{u}'_x\right)'_x+\left(\mu\bar{u}'_y\right)'_y+\left(\nu\bar{u}'_z\right)'_z+2\Omega\left(v\sin\theta-w\cos\theta\right), \tag{10}$$

$$\frac{\tilde{v}-v}{\tau}+u\bar{v}'_x+v\bar{v}'_y+w\bar{v}'_z=\left(\mu\bar{v}'_x\right)'_x+\left(\mu\bar{v}'_y\right)'_y+\left(\nu\bar{v}'_z\right)'_z-2\Omega u\sin\theta, \tag{11}$$

$$\frac{\tilde{w}-w}{\tau}+u\bar{w}'_x+v\bar{w}'_y+w\bar{w}'_z=\left(\mu\bar{w}'_x\right)'_x+\left(\mu\bar{w}'_y\right)'_y+\left(\nu\bar{w}'_z\right)'_z+2\Omega u\cos\theta+g\left(\frac{\rho_0}{\rho}-1\right), \tag{12}$$

где u, v, w – значения компонент вектора скорости на предыдущем временном слое, $\tilde{u}$, $\tilde{v}$, $\tilde{w}$ – значения компонент вектора скорости на промежуточном временном слое, $\bar{u}=\sigma\tilde{u}+(1-\sigma)\,u$, где $\sigma\in[0,1]$ – вес схемы.

Отметим, что многочисленные вычислительные эксперименты показали малое влияние последнего слагаемого в уравнении (12) при моделировании движения водной среды в прибрежной системе.

Далее рассчитывается поле давления – самая вычислительно трудоемкая из трех подзадач. Отметим, что при использовании параметра-регуляризатора τ^* в уравнении неразрывности расчет давления производится на основе волнового уравнения, а не уравнения Пуассона:

$$-\frac{\widehat{p}-2p+\breve{p}}{(c\tau)^2}+\widehat{p}''_{xx}+\widehat{p}''_{yy}+\widehat{p}''_{zz}=\frac{\widehat{\rho}-\rho}{\tau^2}+\frac{\left(\widehat{\rho}\tilde{u}\right)'_x}{\tau}+\frac{\left(\widehat{\rho}\tilde{v}\right)'_y}{\tau}+\frac{\left(\widehat{\rho}\tilde{w}\right)'_z}{\tau}. \tag{13}$$

На последнем этапе рассчитывается поле вектора скорости водного потока на текущем временном слое:

$$\frac{\widehat{u}-\tilde{u}}{\tau}=-\frac{1}{\widehat{\rho}}\widehat{p}'_x,\ \frac{\widehat{v}-\tilde{v}}{\tau}=-\frac{1}{\widehat{\rho}}\widehat{p}'_y,\ \frac{\widehat{w}-\tilde{w}}{\tau}=-\frac{1}{\widehat{\rho}}\widehat{p}'_z, \tag{14}$$

где $\widehat{u}$, $\widehat{v}$, $\widehat{w}$ – значения компонент вектора скорости на текущем временном слое.

3. Исследование разностной схемы для уравнения расчета давления

Проведем исследования устойчивости и оценим погрешность аппроксимации наиболее вычислительно трудоемкого этапа моделирования гидродинамики мелководного водоема, то есть рассмотрим уравнение (13). Однородный аналог волнового уравнения (13) может быть записан в виде:

$$\frac{\tau^*}{c^2}P''_{tt}=\Delta P \tag{15}$$

с начальными условиями $P|_{t=0}=P_0,\ P'_t|_{t=0}=P_1$.

Проведем аппроксимацию задачи на равномерной расчетной сетке методом Роте. Полученную систему обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка с учетом разложения P по ортонормированному базису, составленному из собственных векторов самосопряженного, положительно определенного оператора Λ, такого что $P''_{tt}=-\Lambda P$ можно записать в виде:

$$\alpha''_i=-\lambda_i\alpha_i,\ \alpha_i|_{t=0}=\gamma_i^0,\ (\alpha_i)'_t|_{t=0}=\gamma_i^1, \tag{16}$$

где λ_i – собственное число оператора Λ.

Решение системы независимых дифференциальных уравнений (16) дает решение однородного уравнения (15). Аппроксимация волнового уравнения (13) может быть записана в виде [15]:

$$\frac{\alpha_i^{n+1}-2\alpha_i^n+\alpha_i^{n-1}}{\tau^2}=-\lambda_i\alpha_i^{n+1},\ n\geq 1; \tag{17}$$

$$\frac{\alpha_i^1-\gamma_i^0}{\tau^2}-\frac{\gamma_i^1}{\tau}=-\frac{\lambda_i\alpha_i^1}{2},\ n=0. \tag{18}$$

Решение (17) может быть записано в виде:

$$\alpha_i^n=\left(\frac{1}{\sqrt{1+k}}\right)^n\left(\gamma_i^0\cos(n\varphi)+\left(\frac{\gamma_i^0\sqrt{k}}{2+k}+2\frac{\gamma_i^1}{\sqrt{\lambda_i}}\frac{1+k}{2+k}\right)\sin(n\varphi)\right), \tag{19}$$

где $\varphi=\arccos\left(1/\sqrt{1+k}\right)$, $k=\lambda_i\tau^2$. Из (19) следует устойчивость схемы (17).

Оценим погрешность аппроксимации уравнения для расчета давления (16). Пусть α_i^n – численное решение, найденное на основе (17), $\alpha_i\left(t^n\right)$ – аналитическое решение (16), тогда имеет место равенство:

$$\alpha_i^n=\alpha_i(t_n)+\Psi^n, \tag{20}$$

где Ψ^n – погрешность аппроксимации на n-м шаге уравнения (16) на основе схемы (17).

Из (17) следует, что $\alpha_i^{n+1} = \left(2\alpha_i^n - \alpha_i^{n-1}\right) / (1+k)$. Тогда с учётом (20) получаем:

$$\Psi^{n+1} = \frac{2\Psi^n - \Psi^{n-1}}{1+k} + \beta_i^n,\ \beta_i^n = -\alpha_i\left(t^{n+1}\right) + \frac{2\alpha_i\left(t^n\right) - \alpha_i\left(t^{n-1}\right)}{1+k}. \tag{21}$$

Согласно [15] аналитическое решение волновой задачи (16) может быть представлено в виде:

$$\alpha_i(t) = \gamma_i^0 \cos\left(\sqrt{\lambda_i} t\right) + \frac{\gamma_i^1}{\sqrt{\lambda_i}} \sin\left(\sqrt{\lambda_i} t\right). \tag{22}$$

Так как $t^{n+1} = t^n + \tau$, $t^{n-1} = t^n - \tau$, то с учетом (22) выражение для β_i^n можно переписать в виде:

$$\begin{aligned} \beta_i^n = {} & \cos(\sqrt{\lambda_i} t^n)\left(\tfrac{2-(2+k)\cos(\sqrt{\lambda_i}\tau)}{1+k}\gamma_i^0 - \tfrac{k}{1+k}\sin(\sqrt{\lambda_i}\tau)\tfrac{\gamma_i^1}{\sqrt{\lambda_i}}\right) + \\ & + \sin(\sqrt{\lambda_i} t^n)\left(\tfrac{2-(2+k)\cos(\sqrt{\lambda_i}\tau)}{1+k}\tfrac{\gamma_i^1}{\sqrt{\lambda_i}} + \tfrac{k}{1+k}\sin(\sqrt{\lambda_i}\tau)\gamma_i^0\right). \end{aligned} \tag{23}$$

Выражение для расчета погрешности может быть записано в виде:

$$\Psi_i^{n+1} = C^{m+1}\Psi_i^{n-m} - C^m \Psi_i^{n-m-1} + \sum_{r=0}^{m} C^r \beta_i^{n-r},\ m = \overline{0, n-1},$$

или

$$\Psi_i^{n+1} = C^n \Psi_i^1 + \sum_{r=0}^{n-1} C^r \beta_i^{n-r}, \tag{24}$$

где коэффициенты $C^n = (1+k)^{-n/2}\left(\cos(n\varphi_i) + \sin(n\varphi_i)/\sqrt{k}\right)$, $\cos(\varphi_i) = 1/\sqrt{1+k}$ найдены из решения задачи: $C^{m+1} = \left(2C^m - C^{m-1}\right)/(1+k)$, $C^0 = 1$, $C^1 = 2/(1+k)$.

Из (24) следует, что точность решения задачи зависит от погрешности аппроксимации начальных условий и погрешности, накопленной при переходах между временными слоями, на основе разностной схемы (17).

Оценим выражение (24). Для имеет место неравенство:

$$C^n = \left(\frac{1}{\sqrt{1+k}}\right)^n \left(\cos(n\varphi_i) + \frac{1}{\sqrt{k}}\sin(n\varphi_i)\right) \leq \sqrt{\frac{(1+k)^{1-n}}{k}}. \tag{25}$$

Оценка значения аппроксимации начальных условий Ψ_i^1 запишется:

$$\Psi_i^1 = \alpha_i^1 - \alpha_i(\tau) = \gamma_i^0\left(\frac{5k^2}{24} + O\left(k^3\right)\right) - \frac{\gamma_i^1}{\sqrt{\lambda_i}}\left(\frac{k\sqrt{k}}{3} + O\left(k^{5/2}\right)\right). \tag{26}$$

Оценим сумму $\sum\limits_{r=0}^{n-1} C^r$:

$$\sum_{r=0}^{n-1} C^r \leq \frac{\sqrt{1+k}}{\sqrt{k}} \sum_{r=0}^{n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{1+k}}\right)^r \leq \frac{\sqrt{1+k}}{\sqrt{k}} \frac{\sqrt{1+k}}{\sqrt{1+k}-1} = 2k^{-3/2}\left(1 + O(k)\right). \tag{27}$$

Для оценки β_i^n введем замену $r = k\sin\left(\sqrt{k}\right)/(1+k)$, $p = \left(2 - (2+k)\cos\sqrt{k}\right)/(1+k)$, тогда имеет место равенство:

$$\left|\beta_i^n\right|^2 = \left(p^2 + r^2\right)\left(\left(\gamma_i^0\right)^2 + \left(\frac{\gamma_i^1}{\sqrt{\lambda_i}}\right)^2\right). \tag{28}$$

Выражение $p^2 + r^2$ может быть преобразовано следующим образом:

$$p^2 + r^2 = \frac{4\left(1-(1+k)\cos(\sqrt{k})\right)\left(1-\cos(\sqrt{k})\right)+k^2}{(1+k)^2} = k^3 + O\left(k^4\right). \tag{29}$$

Оценка погрешности Ψ_i^{n+1} с учетом (24) – (29) имеет вид:

$$\begin{gathered}\Psi_i^{n+1} \le \sqrt{(1+k)^{1-n}}\left(\tfrac{5\gamma_i^0}{24}k^{3/2} - \tfrac{\gamma_i^1}{\sqrt{\lambda_i}}\left(\tfrac{k}{3}+O(k^2)\right)\right)+ \\ +2\left(\left(\gamma_i^0\right)^2+\left(\tfrac{\gamma_i^1}{\sqrt{\lambda_i}}\right)^2\right)k^{3/2}+O(k^{5/2}).\end{gathered} \tag{30}$$

4. Метод и программная реализация

Рассмотрим организацию вычислений в области $\overline{G}$ с использованием связной сетки $\overline{\omega}_h$, которая представляет собой декартово произведение двух одномерных сеток по координатным направлениям Ox и Oy. Определим шаги вдоль координатных направлений h_x, h_y, количество шагов N_x, N_y и размеры расчетной области L_x, L_y. Внутренние узлы сеток $\overline{\omega}_h$, $\overline{\omega}_x$, $\overline{\omega}_y$ обозначим как ω_h, ω_x, ω_y, и выполним декомпозицию двумерной расчетной области по двум пространственным переменным x и y:

$$\overline{\omega}_h = \overline{\omega}_x \times \overline{\omega}_y,\ \overline{\omega}_x = \left\{x_i:\ x_i = ih_x;\ i = 0,1,\ldots,N_x;\ N_xh_x \equiv L_x\right\},$$
$$\overline{\omega}_y = \left\{y_j:\ y_j = jh_y;\ j = 0,1,\ldots,N_y;\ N_yh_y \equiv L_y\right\}.$$

Область разбивается на p частей и каждая подобласть σ^l имеет номер l, $0 \le l \le p-1$. Для каждой σ^l рассчитывается начальный индекс $j = N_1^l$ и ширина фрагмента вдоль оси Oy N_2^l:

$$N_1^l = \left\lfloor \frac{l\left(N_y-2\right)}{p} \right\rfloor,\ N_2^l = \left\lfloor \frac{(l+1)\left(N_y-2\right)}{p} \right\rfloor - N_1^l + 2,$$

где $\lfloor x \rfloor$ – функция «пол» определяется как наибольшее целое, меньшее или равное x, $\lceil x \rceil$ – функция «потолок» определяется как наименьшее целое, большее или равное x.

Внутренние узлы сетки содержат значения сеточных концентраций $q_{i,j}$, которые зависят от индексов и ширины фрагментов – при $i \in \overline{1, N_x-2}$, $j \in \overline{1, N_y-2}$. Область разбивается на фрагменты так, чтобы смежные фрагменты σ^l и σ^{l+1} пересекались в двух узлах вдоль направления перпендикулярного линиям разбиения и имели место равенства $u^l_{i,N_2^l-2} = u^{l+1}_{i,0}$, $u^l_{i,N_2^l-1} = u^{l+1}_{i,1}$, где u – искомое значение функции.

Для оценки работы вычислительных систем вводятся параметры, такие как время выполнения арифметических операций t_a и время передачи данных t_{lat}. Временные затраты на один шаг рассчитываются на основе одномерной схемы, а для параллельного алгоритма учитываются дополнительные параметры, такие как латентность и объем передаваемых данных. Временные затраты на один шаг по времени на основе одномерной схемы (17) в случае последовательного варианта алгоритма составят: $t = 21t_a\left(N_x-2\right)\left(N_y-2\right)$.

В случае использования параллельного алгоритма для схемы (17) время расчета составит:

$$t = 21t_a\left(N_x-2\right)\max_l\left(N_2^l-2\right)+2\left(t_{lat}\left(p, N_x-2\right)+\left(N_x-2\right)t_x\right),$$

$$\left\lfloor \frac{N_y-2}{p} \right\rfloor \le \max_l \left(N_2^l - 2\right) \le \left\lceil \frac{N_y-2}{p} \right\rceil, \ \max_l N_2^l \approx \frac{N_y-2}{p}.$$

Ускорение параллельного алгоритма равно:

$$S_p = \frac{21pt_a\left(N_x-2\right)\left(N_y-2\right)}{21t_a\left(N_x-2\right)\left(N_y-2\right) + 2p\left(t_{lat}\left(p, \left\lceil \frac{N_x-2}{k} \right\rceil\right) k + \left(N_x-2\right)t_x\right)}.$$

Ускорение параллельного алгоритма определяется через соотношение временных затрат. Результаты работы параллельного алгоритма представлены в виде графиков (рис. 1), показывающих ускорение в зависимости от числа процессоров и декомпозиции расчетной области. Максимальное ускорение составило 30 раз при использовании 24 вычислительных узлов, размер расчетной сетки составил $1000 \times 1000 \times 60$ узлов. Вычисления производились на кластере К-60 на базе ИПМ им. М. В. Келдыша РАН.

Рис. 1. Ускорение параллельного алгоритма с различным количеством процессоров

5. Вычислительный эксперимент

Проведен вычислительный эксперимент на основе комплекса предложенных моделей с использованием разработанных параллельных алгоритмов. На рис. 2 изображен вектор скоростей водного потока $\mathbf{V} = \{u, v, w\}$, который подается на вход для модели биологической кинетики вместе с распределениями солености и температуры, полученными в результате обработки картографической информации и спутниковых данных [16].

На рис. 3 приведены изображения концентраций моделируемых веществ в летний период в Азовском море. Интервал моделирования – 30 суток, начальные распределения – равномерные. В качестве основного вида фитопланктона рассматриваются синезеленые водоросли (*Aphanizomenon flos-aquae*).

При проведении вычислительного эксперимента учитывалась зависимость скорости роста фитопланктонных популяций от температуры, солености, освещенности, наличия питательных веществ. Уровень кислорода при скорости ветра 5 м/с предполагался достаточным для протекания химических реакций. Кислородный баланс моря зависит от поступления газа с поверхности водной среды и расхода на окислительные реакции.

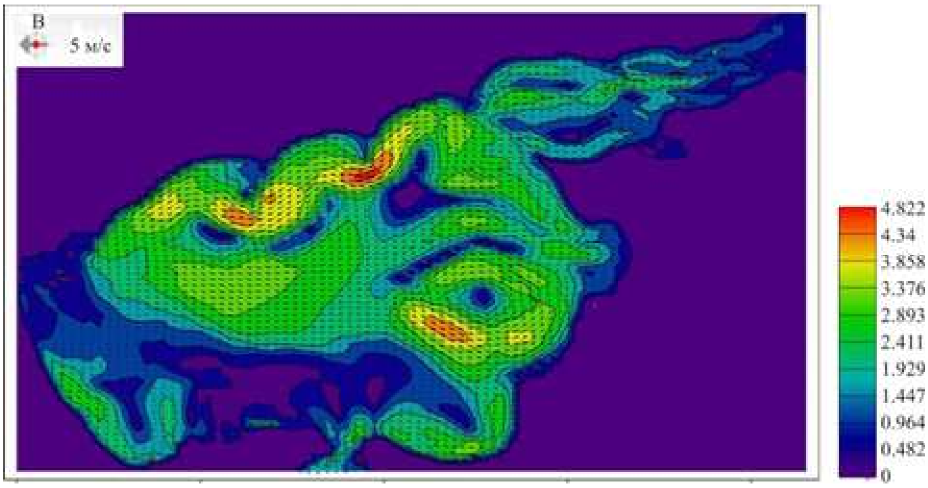
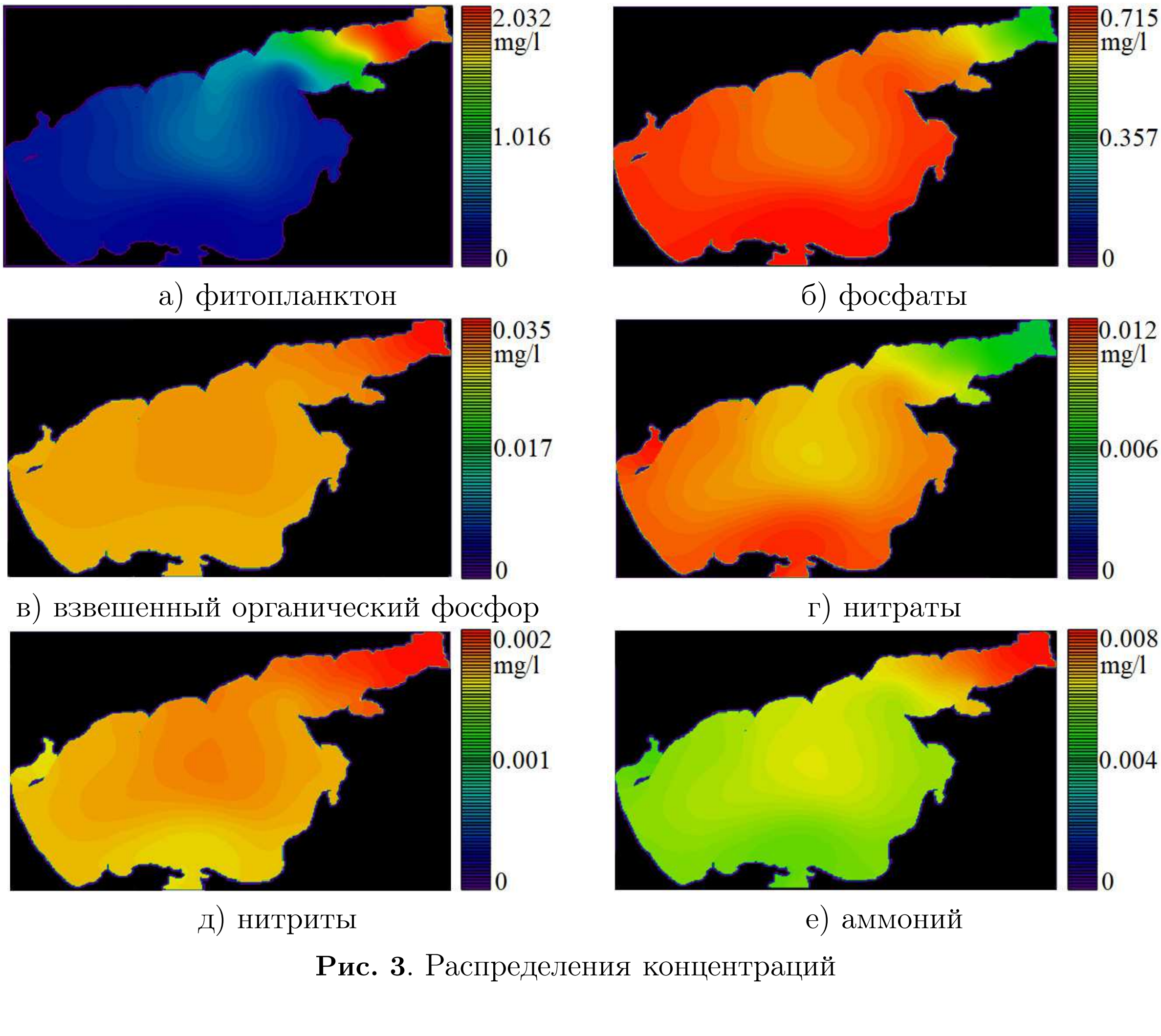


Рис. 2. Картина течений в Азовском море при восточном ветре 5 м/с



а) фитопланктон

б) фосфаты

в) взвешенный органический фосфор

г) нитраты

д) нитриты

е) аммоний

Рис. 3. Распределения концентраций

Заключение

В данном исследовании разработана математическая модель биологической кинетики и динамики основных видов фитопланктонных популяций. Среди значимых факторов, которые были учтены при построении модели, можно выделить влияние освещенности и эффекта самозатенения, температуры и солености, достаточности питательных веществ на скорость роста фитопланктонных популяций. Приведенная модель включает моделирование процесса потребления кислорода на окислительные реакции в аэробных условиях, при этом основным источником считается поступление с поверхности водоема в процессе перемешивания вод.

Рассмотренная модель биогеохимических циклов рассматривается в комплексе с математической моделью гидродинамики, позволяющей получать входные данные о конвективном переносе. Модель гидродинамики мелководного водоема простроена с использованием относительно малого временного множителя-гиперболизатора (регуляризация по Б.Н. Четверушкину). Для построения дискретного аналога модели использован метод расщепления по физическим процессам. Показана устойчивость численного решения однородного аналога уравнения для расчета давления, а также зависимость погрешности аппроксимации задачи от входных данных и вычислительной погрешности, накапливаемой при переходе между временными слоями в процессе численного решения задачи. Известно, что на скорость сходимости итерационного метода влияет диагональное преобладание дискретного аналога оператора задачи. Используемый в данном исследовании регуляризатор по Б.Н. Четверушкину позволяет получить волновое уравнение для расчета давления, дискретный аналог которого обладает свойством диагонального преобладания, в отличие от используемого ранее уравнения Пуассона.

Приведены результаты численных экспериментов. Экспериментальные исследования построенных параллельных алгоритмов, реализованных в виде комплекса программ, подтвердили приемлемые значения ускорения и эффективности (более 70 %) для относительно умеренного числа вычислителей – до 24. Достигнутый уровень эффективности позволяет говорить о возможности использования этого комплекса программ в ускоренном времени, что особенно актуально для оперативного прогнозирования биогеохимических процессов в прибрежных морских системах.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках научного проекта 22–71–10102, https://www.rscf.ru/project/22-71-10102/.

Литература

1. Novikov, M. Model-Based Analysis of the Oxygen Budget in the Black Sea Water Column / M. Novikov, S. Pakhomova, A. Berezina, E. Yakushev // Water. – 2024. – V. 16, № 17. – Article ID: 2380. – 16 p.

2. Berdnikov, S.V. Modeling of Marine Ecosystems: Experience, Modern Approaches. Directions of Development (Review). Part 2. Population and Trophodynamic Models / S.V. Berdnikov, V.V. Selyutin, F.A. Surkov, Yu.V. Tyutyunov // Journal of Physical Oceanography. – 2022. – V. 29, № 2. – P. 182–203.

3. Chen Lifan. Effects of Random Environmental Perturbation on the Dynamics of a Nutrient–Phytoplankton–Zooplankton Model with Nutrient Recycling / Lifan Chen, Xingwang Yu, Sanling Yuan // Mathematics. – 2022. – V. 10, № 20. – Article ID: 3783. – 23 p.

4. Сухинов, А.И. Аналитическое и численное исследование задачи динамики планктонных популяций при наличии микропластика / А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков, Ю.В. Белова, И.Ю. Кузнецова // Математическое моделирование. – 2024. – Т. 36, № 3. – С. 95–114.

5. Четверушкин, Б.Н. Кинетические модели для решения задач механики сплошной среды на суперкомпьютерах // Математическое моделирование. – 2015. – Т. 27, № 5. – С. 65–79.

6. Капорин, И.Е. MPI+OpenMP параллельная реализация метода сопряженных градиентов с некоторыми явными предобусловливателями / И.Е. Капорин, О.Ю. Милюкова // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. – 2018. – 29 с.
7. Sukhinov, A.I. Mathematical Model of Suspended Particles Transport in the Estuary Area, Taking into Account the Aquatic Environment Movement / A.I. Sukhinov, A. Chistyakov, I. Kuznetsova, Yu. Belova, A. Nikitina // Mathematics. – 2022. – V. 10, № 16. – Article ID: 2866. – 17 p.
8. Yakushev, E.V. Analysis of the Water Column Oxic/Anoxic Interface in the Black and Baltic Seas with a Numerical Model / E.V. Yakushev, F. Pollehne, G. Jost, I. Kuznetsov, B. Schneider, L. Umlauf // Marine Chemistry. – 2007. – V. 107, № 3. – P. 388–410.
9. Sukhinov, A. Mathematical Modeling of the Phytoplankton Populations Geographic Dynamics for Possible Scenarios of Changes in the Azov Sea Hydrological Regime / A. Sukhinov, Yu. Belova, A. Chistyakov, A Beskopylny, B. Meskhi // Mathematics. – 2021. – V. 9. – Article ID: 3025. – 16 p.
10. Small, L.F. The Relative Contribution of Particulate Chlorophyll and River Tription to the Extinction of Light off the Coast of Oregon / L.F. Small, Jr.H. Cur // Lymnology and Oceanography. – 1968. – V. 13, № 1. – P. 84–91.
11. UNESCO Progress on Oceanographic Tables and Standards 1983–1986: Work and Recommendations of the UNESCO/SCOR/ICES/IAPSO Joint Panel // Unesco Technical Papers in Marine Science. – Paris: Unesco's workshops, 1986. – 64 p.
12. Schneider, B. Accumulation of Total CO_2 During Stagnation in the Baltic Deep Water and its Relationship to Nutrient and Oxygen Concentrations / B. Schneider, G. Nausch, H. Kubsch, I. Peterson // Marine Chemistry. – 2002. – V. 77. – P. 277–291.
13. Сухинов, А.И. Регуляризованная разностная схема для решения задач гидродинамики / А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков, И.Ю. Кузнецова, и др. // Математическое моделирование. – 2022. – Т. 34, № 2. – С. 85–100.
14. Жуков, В.Т. Явно-итерационная схема для интегрирования по времени системы уравнений Навье – Стокса / В.Т. Жуков, О.Б. Феодоритова, Н.Д. Новикова, А.П. Дубень /// Математическое моделирование. – 2020. – Т. 32, № 4. – С. 57–74.
15. Chistyakov, A.E. Investigation of the Approximation Error of the Difference Scheme for the Mathematical Model of Hydrodynamics / A.E. Chistyakov, A.V. Nikitina, I.Yu. Kuznetsova, et al // Lobachevskii Journal of Mathematics. – 2023. – V. 44, № 5. – P. 1839–1846.
16. Сухинов, А.И. Моделирование биогеохимических процессов в Азовском море с использованием статистически обработанных данных о речном стоке / А.И. Сухинов, Ю.В. Белова, А.В. Никитина, А.М. Атаян // Advanced Engineering Research (Rostov-on-Don). – 2020. – Т. 20, № 4. – С. 437–445.

Александр Иванович Сухинов, член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, кафедра «Математика и информатика», Донской государственный технический университет (г. Ростов-на-Дону, Российская Федерация), sukhinov@gmail.com.

Юлия Валериевна Белова, кандидат физико-математических наук, кафедра «Математика и информатика», Донской государственный технический университет (г. Ростов-на-Дону, Российская Федерация), yvbelova@yandex.ru.

Инна Юрьевна Кузнецова , кафедра «Математика и информатика», Донской государственный технический университет (г. Ростов-на-Дону, Российская Федерация); кафедра интеллектуальных и многопроцессорных систем, Южный федеральный университет (г. Ростов-на-Дону, Российская Федерация), ikuznecova@sfedu.ru.

Ася Михайловна Атаян, кафедра «Программное обеспечение вычислительной техники и автоматизированных систем», Донской государственный технический университет (г. Ростов-на-Дону, Российская Федерация), atayan24@mail.ru.

Александр Евгеньевич Чистяков, доктор физико-математических наук, кафедра «Программное обеспечение вычислительной техники и автоматизированных систем», Донской государственный технический университет (г. Ростов-на-Дону, Российская Федерация), cheese_05@mail.ru.

Поступила в редакцию 28 января 2025 г.

MSC 92B05 **DOI: 10.14529/mmp250205**

MATHEMATICAL MODELS AND METHODS OF FORECASTING BIOLOGICAL KINETICS PROCESSES CONSIDERING THE OXYGEN REGIME

A.I. Sukhinov[1]***, Yu.V. Belova***[1]***, I.Yu. Kuznetsova***[1,2]***, A.M. Atayan***[1]***, A.E. Chistyakov***[1]
[1]Don State Technical University, Rostov-on-Don, Russian Federation
[2]Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russian Federation
E-mail: sukhinov@gmail.com, yvbelova@yandex.ru, ikuznecova@sfedu.ru, atayan24@mail.ru, cheese_05@mail.ru

This article describes a set of mathematical models that allow building medium-term forecasts of biological kinetics processes occurring in the presence of oxygen in an aquatic environment. The hydrodynamic model uses a regularizer according to B.N. Chetverushkin, which allows obtaining a wave equation for calculating pressure. The stability and approximation error of the difference scheme for the pressure calculation equation are studied. The use of this method made it possible to reduce the computational complexity of the pressure calculation problem. A software package based on integrated models of hydrodynamics and hydrobiology is built using MPI parallel programming technology. Distributions of concentrations of the main biogenic substances and phytoplankton populations are obtained depending on meteorological conditions. The parallel algorithms used in the study allow building medium-term forecasts of biogeochemical processes in coastal systems once in the accelerated time mode.

Keywords: model of biological kinetics; regularizer according to B.N. Chetverushkin; oxygen regime; parallel algorithms; Message Passing Interface.

References

1. Novikov M., Pakhomova S., Berezina A., Yakushev E. Model-Based Analysis of the Oxygen Budget in the Black Sea Water Column. *Water*, 2024, vol. 16, no. 17, article ID: 2380, 16 p. DOI: 10.3390/w16172380

2. Berdnikov S.V., Selyutin V.V. Surkov F.A., Tyutyunov Yu.V. Modeling of Marine Ecosystems: Experience, Modern Approaches, Directions of Development (Review). Part 2. Population and Trophodynamic Models. *Journal of Physical Oceanography*, 2022, vol. 29, no. 2, pp. 182–203. DOI: 10.22449/1573-160X-2022-2-182-203

3. Chen Lifan, Xingwang Yu, Sanling Yuan. Effects of Random Environmental Perturbation on the Dynamics of a Nutrient–Phytoplankton–Zooplankton Model with Nutrient Recycling. *Mathematics*, 2022, vol. 10, no. 20, article ID. 3783, 23 p. DOI: 10.3390/math10203783

4. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Belova Yu.V., Kuznetsova I.Yu. Analytical and Numerical Study of the Problem of the Plankton Population Dynamics in the Presence of Microplastics. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2024, vol. 16, no. 5, pp. 717–729. DOI: 10.20948/mm-2024-03-07

5. Chetverushkin B.N. Kinetic Models for Solving Continuum Mechanics Problems on Supercomputers. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2015, vol. 7, no. 6, pp. 531–539. DOI: 10.1134/S2070048215060034
6. Kaporin I.E., Milyukova O.Yu. MPI+OpenMP Parallel Implementation of the Conjugate Gradient Method with Some Explicit Preconditioners. *Preprints of the Keldysh Institute of Applied Mathematics*, 2018, 29 p. (in Russian)
7. Sukhinov A.I., Chistyakov A., Kuznetsova I., Belova Yu., Nikitina A. Mathematical Model of Suspended Particles Transport in the Estuary Area, Taking into Account the Aquatic Environment Movement. *Mathematics*, 2022, vol. 10, no. 16, article ID: 2866, 17 p. DOI: 10.3390/math10162866
8. 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, vol. 107, no. 3, pp. 388–410. DOI: 10.1016/j.marchem.2007.06.003
9. Sukhinov A., Belova Yu., Chistyakov A., Beskopylny A., Meskhi B. Mathematical Modeling of the Phytoplankton Populations Geographic Dynamics for Possible Scenarios of Changes in the Azov Sea Hydrological Regime. *Mathematics*, 2021, vol. 9, article ID: 3025, 16 p. DOI: 10.3390/math9233025
10. Small L.F., Cur Jr.H. The Relative Contribution of Particulate Chlorophyll and River Tription to the Extinction of Light off the Coast of Oregon. *Lymnology and Oceanography*, 1968, vol. 13, no. 1, pp. 84–91.
11. UNESCO Progress on Oceanographic Tables and Standards 1983–1986: Work and Recommendations of the UNESCO/SCOR/ICES/IAPSO Joint Panel. *Unesco Technical Papers in Marine Science*, 1986, 64 p.
12. Schneider B., Nausch G., Kubsch H., Peterson I. Accumulation of Total CO_2 During Stagnation in the Baltic Deep Water and its Relationship to Nutrient and Oxygen Concentrations. *Marine Chemistry*, 2002, vol. 77, pp. 277–291.
13. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Kuznetsova I.Yu., et al. Regularized Difference Scheme for Solving Hydrodynamic Problems. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2022, vol. 14, no. 5, pp. 745–754. DOI: 10.1134/S2070048222050155
14. Zhukov V.T., Feodoritova O.B., Novikova N.D., Duben A.P. Explicit-Iterative Scheme for the Time Integration of a System of Navier–Stokes Equations. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2020, vol. 12, no. 6, pp. 958–968. DOI: 10.1134/S2070048220060174
15. Chistyakov A.E., Nikitina A.V., Kuznetsova I.Yu., et al. Investigation of the Approximation Error of the Difference Scheme for the Mathematical Model of Hydrodynamics. *Lobachevskii Journal of Mathematics*, 2023, vol. 44, no. 5, pp. 1839–1846. DOI: 10.1134/s1995080223050128
16. Sukhinov A.I., Belova Y.V., Nikitina A.V., Atayan A.M. Modeling Biogeochemical Processes in the Azov Sea Using Statistically Processed Data on River Flow. *Advanced Engineering Research (Rostov-on-Don)*, 2020, vol. 20, no. 4, pp. 437–445. DOI: 10.23947/2687-1653-2020-20-4-437-445

Received January 28, 2025