

С.В. Свищев

*ФГБУН Морской гидрофизический институт РАН, г. Севастополь, Россия*

### **АДАПТИВНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НИТРИФИКАЦИИ В СЕВАСТОПОЛЬСКОЙ БУХТЕ**

Аннотация: В статье приводится оценка применимости метода адаптивного баланса влияний (АВС-метода) для численного моделирования процесса нитрификации в морской среде, на примере Севастопольской бухты. В качестве внешних данных используются ряды натуральных измерений неорганических форм азота (нитратов и аммония), без учета влияния температуры. Итоговое сравнение проводится между результатом адаптивного моделирования и натурными данными по моделируемому параметру (концентрации нитритов).

Ключевые слова: адаптивное моделирование, нитрификация, Севастопольская бухта.

**Введение.** Круговорот биогенных элементов представляет собой один из ключевых механизмов формирования устойчивой экосистемы. Отсюда следует крайняя актуальность достоверного оптимального описания процессов в экосистемах, в том числе, процессов круговорота азота, как одного из основных биогенных элементов, определяющих качество воды и продуктивность водных объектов. Однако многообразие процессов круговорота приводит к созданию сложных многокомпонентных имитационных моделей, которые оказываются недостоверными из-за неопределенности входящих в модели параметров и возможности получения качественно различных прогнозов при практически одних и тех же начальных значениях рассматриваемых параметров.

Выходом может служить использование более простых адаптивных моделей морских экосистем [1-4], в которых реакции преобразования биогенных элементов, органического вещества и биоты представлены коэффициентами влияний, определяемыми по данным натуральных наблюдений. При этом сложная система параметров, описывающая причинно-следственные зависимости между химико-биологическими процессами, может быть заменена более простой системой коэффициентов влияний адаптивной модели экосистемы.

Основной проблемой практического применения адаптивных моделей морских экосистем является определение коэффициентов влияний между отдельными параметрами по данным наблюдений. В данном исследовании применен способ оценки коэффициентов влияний, основанный на гипотезе о сохранении величин коэффициентов влияний при стремлении экосистемы к стационарному состоянию.

Биогеохимические циклы прибрежных экосистем в первую очередь испытывают возрастающую антропогенную нагрузку, особенно от значительного количества органического вещества и биогенных элементов, поступающих с материка вместе с речным и ливневым стоками.

**Материалы и методы.** Севастопольская бухта, выбранная объектом исследования, является ярким примером прибрежной полузамкнутой акватории эстуарного типа, подверженной постоянно усиливающемуся антропогенному воздействию на протяжении двух последних столетий (военный и торговый порт, судостроение, судоремонт, судоходство и рекреационные цели).

Предметом исследований выступает «нитрификация» – двухстадийный процесс окисления микроорганизмами ионов аммония  $\text{NH}_4^+$  до нитрит-ионов  $\text{NO}_2^-$  и далее до нитрат-ионов  $\text{NO}_3^-$ .

Для формирования массива внешних данных для адаптивной модели, проведена первичная обработка натуральных измерений концентрации неорганических растворенных форм азота в водах Севастопольской бухты с мая 1998 г. – по сентябрь 2016 г. За рассматриваемый период сотрудниками отделов биогеохимии моря и гидрофизики шельфа Морского гидрофизического института была проведена 81 гидролого-гидрохимическая съемка. Из дальнейшего анализа были исключены экстремальные значения концентраций неорганических форм азота (обусловленные стоком реки Черная и городскими стоками в кутовой части Южной бухты и вблизи ТЭЦ) и проведена аппроксимация полиномами четвертой степени внутригодового хода рассматриваемых параметров: содержания нитратов, нитритов и ионов аммония.

Среднегодовые значения концентрации неорганических форм азота в поверхностном слое вод западной и центральной частей бухты оценивались равными 34,16 (нитраты, рис.1.а), 1,68 (нитриты, рис.1.б) и 5,46  $\text{мгN/м}^3$  (аммоний, рис.1.в). Максимальные неэкстремальные концентрации, соответственно – 102,2, 4,75 и 16,3  $\text{мгN/м}^3$  (т.е. они не превышали утроенного среднегодового значения). Минимальные неэкстремальные концентрации – 1,4, 0,98 и 1,12  $\text{мгN/м}^3$  (что близко минимальной аналитически определяемой концентрации неорганических форм азота).

Для восстановления внутригодового хода концентрации нитритов методом адаптивного баланса влияний [1] принимается ряд допущений:

- существует стационарное состояние равновесия, в котором при отсутствии внешних влияний переменные модели экосистемы принимают свои средние значения (например –  $[\overline{\text{NO}_2}]$ );
- когда внешние влияния вызывают отклонения переменных от их средних значений, уравнения модели экосистемы сохраняют динамические балансы масс моделируемых субстанций с учетом возможных пределов их изменчивости:  $[\text{NO}_2]_{\text{MIN}} \leq [\text{NO}_2] \leq [\text{NO}_2]_{\text{MAX}}$ ;
- внешние влияния, имеющие нулевые средние значения, не изменяют стационарное состояние системы уравнений модели;
- отклонения переменных модели от стационарного состояния оказывают внутрисистемные влияния друг на друга в соответствии с причинно-следственными связями (рис. 2). Эти связи формируют материальные балансы отклонений переменных от их средних значений:

$$([\text{NO}_2] - [\overline{\text{NO}_2}]) = K_{[\text{NO}_2]/[\text{NO}_3]} \cdot ([\text{NO}_3] - [\overline{\text{NO}_3}]) - K_{[\text{NO}_2]/[\text{NH}_4]} \cdot ([\text{NH}_4] - [\overline{\text{NH}_4}]); \quad (1)$$

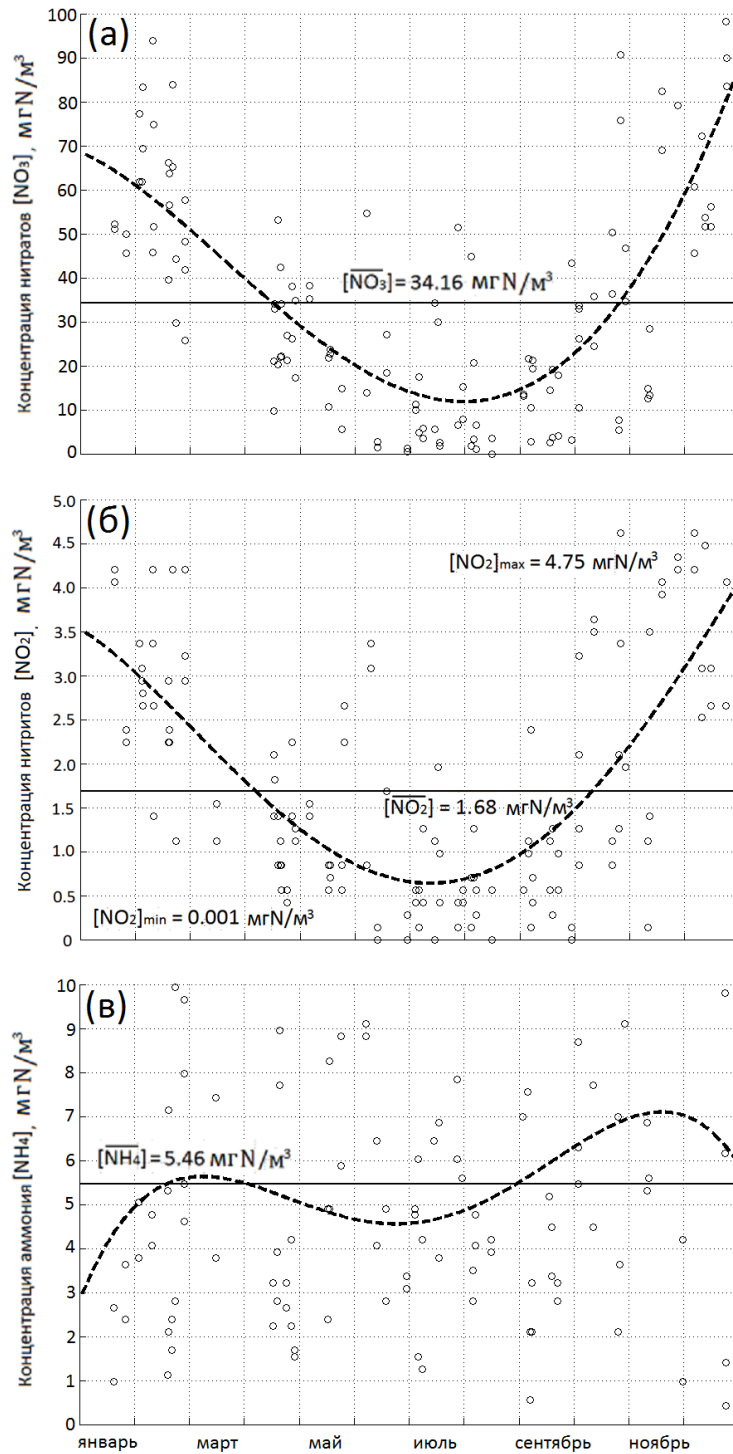


Рисунок 1. Натурные данные о концентрации нитратов (а), нитритов (б) и ионов аммония (в). Сплошная прямая линия – среднегодовое значение концентрации неорганической формы азота, пунктирная линия – кривая полиномиальной аппроксимации натурных данных.

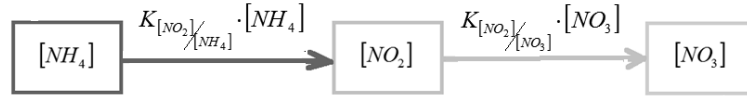


Рисунок 2 – Схема материальных балансов в адаптивной модели процесса нитрификации.

- при стремлении экосистемы к стационарному состоянию, величины коэффициентов влияния между отдельными параметрами сохраняются:

$$K_{[NO_2]/[NH_4]} = const \text{ и } K_{[NO_2]/[NO_3]} = const;$$

- из приведенного выше баланса реакций взаимодействия переменных модели следует, что величины коэффициентов влияния между переменными пропорциональны отношениям их средних значений:

$$[NO_2] = [\overline{NO_2}] + K'_{[NO_3]} \cdot \frac{[\overline{NO_2}]}{[\overline{NO_3}]} \cdot ([NO_3] - [\overline{NO_3}]) - K'_{[NH_4]} \cdot \frac{[\overline{NO_2}]}{[\overline{NH_4}]} \cdot ([NH_4] - [\overline{NH_4}])$$

Появляющиеся при этом преобразовании безразмерные множители  $K'_{[NO_3]}$  и  $K'_{[NH_4]}$  из соображений устойчивости вычислений были приняты равными 0,5. Отношения средних значений для первой и второй стадий нитрификации соответственно имели следующие значения:

$$\frac{[\overline{NO_2}]}{[\overline{NH_4}]} = \frac{1,68}{5,46} = 0,308, \quad \frac{[\overline{NO_2}]}{[\overline{NO_3}]} = \frac{1,68}{34,16} = 0,049$$

С учетом допущений, схема материальных балансов в адаптивной модели процесса нитрификации (рис. 2) может быть представлена в виде логистического уравнения метода адаптивного баланса влияний:

$$\frac{d[NO_2]}{dt} = 2 \cdot r \cdot [NO_2] \cdot \left\{ [NO_2] - \left( [NO_2] - K_{[NO_2]/[NO_3]} \cdot ([NO_3] - [\overline{NO_3}]) + K_{[NO_2]/[NH_4]} \cdot ([NH_4] - [\overline{NH_4}]) \right) \right\} \quad (2)$$

Если рассматривать временные сценарии рассматриваемых переменных экосистемы Севастопольской бухты в дискретные моменты времени  $t_k$ , разделенные интервалами  $\Delta t = t_{k+1} - t_k$  равными 1 суткам, уравнение АВС-модели процесса нитрификации (2), при дополнительном условии  $2\Delta t \cdot r \cdot [\overline{NO_2}] = 1$  можно представить в конечных разностях в следующем виде:

$$[NO_2]_{k+1} = 2[NO_2]_k \cdot \left\{ 1 - \frac{1}{2[\overline{NO_2}]} \cdot \left( [NO_2]_k - K_{[NO_2]/[NO_3]} \cdot ([NO_3] - [\overline{NO_3}]) + K_{[NO_2]/[NH_4]} \cdot ([NH_4] - [\overline{NH_4}]) \right) \right\} \quad (3)$$

**Результаты.** Итоги численных экспериментов по восстановлению внутригодового хода концентрации нитритов (без ассимиляции натуральных данных о их концентрации) представлены на рисунке 3 и показывают состоятельность выбранной адаптивной модели в сравнении с полиномиальной аппроксимацией натуральных данных о концентрации нитритов.

Уровень точности прогноза оценивался с помощью величины коэффициента детерминации. Для полиномиальной аппроксимации натуральных данных он составил 65,7 %, а для данных восстановленных методом адаптив-

ного моделирования без ассимиляции натуральных данных – 54,3 %. Что характеризует модель как грубую, но приемлемого качества.

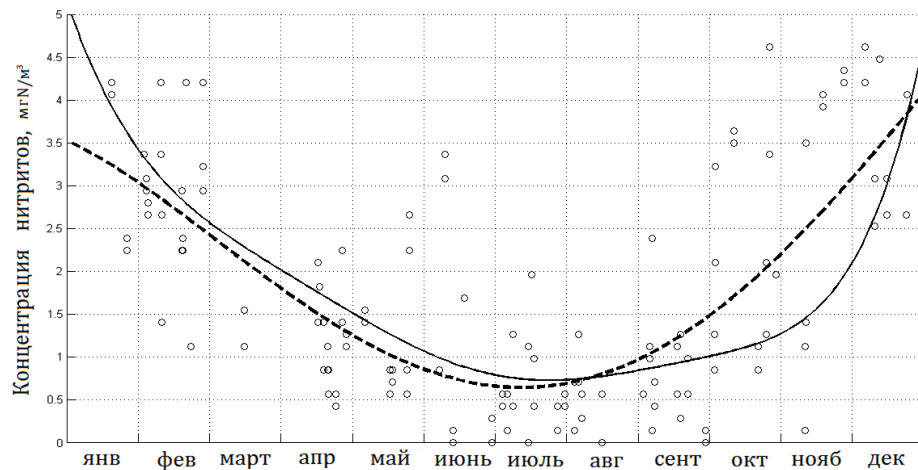


Рисунок 3. – Сравнение натуральных данных о концентрации нитритов (круглые маркеры), кривой полиномиальной аппроксимации натуральных данных (пунктирная линия) и модельных данных восстановленных без ассимиляции натуральных данных (сплошная линия).

**Выводы.** Свойства адаптивных моделей морских экосистем позволяют при ограниченном количестве натуральных данных о внешних параметрах (концентрации нитратов и ионов аммония), используя информацию о средних значениях параметров и знаках причинно-следственных связей между ними, проводить оценку коэффициентов влияний между параметрами с последующим восстановлением данных о рассматриваемом параметре (концентрации нитритов) без ассимиляции натуральных данных.

Проведенные вычислительные эксперименты подтвердили возможность представления коэффициентов влияний в форме отношений средних значений продуктов и ресурсов биохимических реакций. Представление материальных балансов в единицах их средних значений позволяет ввести их нормировку, обеспечивающую устойчивость решений уравнений модели.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тимченко И.Е., Игумнова Е.М., Тимченко И.И. Системный менеджмент и АВС-технологии устойчивого развития. – Севастополь: «ЭКОСИ-Гидрофизика», 2000. – 225 с.
2. Тимченко И.Е., Игумнова Е.М., Лазарчук И.П., Солодова С.М. Обратные связи в адаптивных моделях морских экосистем // Морской гидрофизический журнал. – 2014. – № 2. – С. 3 – 21.
3. Timchenko I.E., Igumnova E.M., Timchenko I.I. Adaptive balance models for environmental-economic systems. – CreateSpace Independent Publishing Platform. – 2016. – 486 p.
4. Ivavov V.A., Igumnova E.M., and Timchenko I.E. Coastal Zone Resources Management. – Kyiv: Akadempriodika, 2012, – 304 pp.

S.V. Svishchev

**NITRIFICATION IN THE SEVASTOPOL BAY ADAPTIVE MODELING**

The article estimates the method of adaptive balance of causes (ABC-method) applicability for numerical simulation of the nitrification process in the marine environment, on the example of the Sevastopol bay. As external data, series of full-scale measurements of nitrogen inorganic form (nitrate and ammonium) are used, without considering temperature effect. The final comparison between the result of adaptive modeling and full-scale data on the model parameter (nitrite concentration) is made.