

УДК 574.5.081.001 (261.245)

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПРИМЕНЕНИЯ АЛГОРИТМОВ ПРЯМОГО ПОИСКА ДЛЯ ОЦЕНКИ ЗНАЧЕНИЙ ПАРАМЕТРОВ В МОДЕЛЯХ ЭКОСИСТЕМ НЕВСКОЙ ГУБЫ И ВИСЛИНСКОГО ЗАЛИВА БАЛТИЙСКОГО МОРЯ

К. А. Подгорный^{1*}, О. А. Дмитриева^{1,2}, А. С. Семенова^{1,3}

¹ Атлантический филиал ФГБНУ «ВНИРО» («АтлантНИРО») (ул. Дмитрия Донского, 5, Калининград, Россия, 236022), *kapborok@mail.ru

² Институт океанологии им. П. П. Ширшова РАН (Нахимовский пр-т, 36, Москва, Россия, 117997)

³ Институт биологии внутренних вод им. И. Д. Папанина РАН (п. Борок, 109, Некоузский р-н, Ярославская обл., Россия, 152742)

Проведен сравнительный анализ применения алгоритмов прямого поиска для выполнения автоматической настройки и оценки значений параметров двух моделей нестратифицированных водных экосистем – Невской губы (НГ) и Вислинского залива (ВЗ) Балтийского моря. Обе модели построены на одних и тех же методологических принципах, однако имеют разную структуру, разное количество модельных переменных и эмпирических параметров. Для экосистемы ВЗ биогидрохимический блок состоит из двух частей: «Планктонного блока» и блока «Бентос». Моделирование процессов трансформации биогенных веществ в заливе проведено совместно для водной среды и верхнего (деятельного) слоя донных отложений. В модели экосистемы НГ используется «Планктонный блок», а все процессы описываются только для водной среды. Моделирование позволяет количественно исследовать механизмы процессов биогидрохимической трансформации: соединений С, N, P и Si в экосистеме ВЗ; соединений N и P – в экосистеме НГ. Обе модели позволяют изучать особенности пространственно-временной динамики растворенного в воде кислорода. Модель экосистемы НГ содержит 58 эмпирических параметров, а модель экосистемы ВЗ – 330. В качестве критерия адекватности моделей использован критерий Тейла. Решение оптимизационной задачи основано на компьютерной реализации двухэтапного алгоритма прямого поиска. На первом этапе применяли алгоритм случайного поиска. На втором этапе выполнялся локальный поиск с помощью модифицированного симплексного метода Нелдера – Мида. Показано, что применяемые алгоритмы эффективны. Они обеспечивают надежность и вычислительную сходимость получаемых результатов. Установлено, что для ряда параметров рассмотренных моделей статистически достоверны межгодовые отличия значений. Проведена оценка чувствительности моделей к изменениям значений параметров.

Ключевые слова: экосистема; математическое моделирование; имитационная модель; алгоритмы прямого поиска; параметрическая чувствительность модели

Для цитирования: Подгорный К. А., Дмитриева О. А., Семенова А. С. Сравнительный анализ применения алгоритмов прямого поиска для оценки значений параметров в моделях экосистем Невской губы и Вислинского залива Балтийского моря // Труды Карельского научного центра РАН. 2024. № 2. С. 79–94. doi: 10.17076/lim1860

Финансирование. Финансовое обеспечение исследований осуществлялось в рамках государственного задания ФГБНУ «ВНИРО» № 076-00007-22-00 часть II, раздел 5 и государственного задания ИО РАН им. П. П. Ширшова FMWE-2024-0021.

K. A. Podgornyi^{1*}, O. A. Dmitrieva^{1,2}, A. S. Semenova^{1,3}. COMPARATIVE ANALYSIS OF THE APPLICATION OF DIRECT SEARCH ALGORITHMS FOR ESTIMATING VALUES OF PARAMETERS IN ECOSYSTEMS MODELS FOR THE NEVA BAY AND VISTULA LAGOON OF THE BALTIC SEA

¹ Russian Federal Research Institute of Fisheries and Oceanography “VNIRO”, Atlantic Branch of VNIRO (“AtlantNIRO”) (5 Dm. Donskogo St., 236022 Kaliningrad, Russia), *kapborok@mail.ru

² Shirshov Institute of Oceanology, Russian Academy of Sciences (36 Nakhimovsky Av., 117997 Moscow, Russia)

³ Papanin Institute for Biology of Inland Waters, Russian Academy of Sciences (109 Borok, 152742 Nelouzsky District, Yaroslavl Region, Russia)

The article presents a comparative analysis of the use of direct search algorithms to perform automatic tuning and assessment of parameter values for two models of non-stratified aquatic ecosystems: the Neva Bay (NB) and the Vistula Lagoon (VL) of the Baltic Sea. Both models are built on the same methodological principles, but they have different structures, different numbers of model variables and empirical parameters. For the VL ecosystem, the biohydrochemical block consists of two parts: the «Plankton block» and the «Benthos» block. Modeling of the nutrients transformation processes in the lagoon was carried out jointly for the aquatic environment and the upper (active) layer of bottom sediments. The NB ecosystem model uses the «Plankton block», and all processes are described only for the aquatic environment. Modeling enables to quantitatively investigate the mechanisms of biohydrochemical transformation processes: compounds of C, N, P and Si in the ecosystem of the VL; N and P compounds in the NB ecosystem. Both models provide the means to study the features of spatiotemporal dynamics of oxygen dissolved in water. The NB ecosystem model contains 58 empirical parameters, while the VL ecosystem model contains 330 ones. The Theil criterion was used as a criterion for the models adequacy. The optimization problem is solved due to the two-stage computer-aided direct search algorithm. A random search algorithm was used at the first stage. At the second stage, a local search is performed using the modified Nelder-Mead simplex method. The used algorithms proved to be effective. They ensure reliability and computational convergence of the obtained calculation results. The article shows that interannual differences in parameter values are statistically significant for a number of parameters of the models under consideration. The models sensitivity to changes in parameters values was assessed.

Keywords: ecosystem; mathematical modeling; simulation model; direct search algorithms; parametric sensitivity of the model

For citation: Podgornyi K. A., Dmitrieva O. A., Semenova A. S. Comparative analysis of the application of direct search algorithms for estimating values of parameters in ecosystems models for the Neva Bay and Vistula Lagoon of the Baltic Sea. *Trudy Karel'skogo nauchnogo tsentra RAN = Transactions of the Karelian Research Centre RAS*. 2024. No. 2. P. 79–94. doi: 10.17076/lim1860

Funding. Financial support for the study was carried out within the framework of the state assignment of the Federal State Budgetary Scientific Institution «VNIRO» No. 076-00007-22-00 part II, section 5 and under state assignment to the Shirshov Institute of Oceanology of the Russian Academy of Sciences No. FMWE-2024-0021.

Введение

При разработке и использовании математических моделей природных экосистем исследователи сталкиваются с целым рядом неопределенностей разного типа [Model..., 2005; Podgornyj, Leonov, 2015; Hipsey et al., 2020; Steenbeek et al., 2021]. В той или иной степени проблема неопределенности по объективным причинам существует всегда.

Изучение важнейших механизмов функционирования природных экосистем невозможно осуществить без совместного использования мониторинговых наблюдений, проведения систематических междисциплинарных исследований, использования методологии системного анализа и аппарата математического моделирования. При этом необходимо учитывать неопределенности имеющихся знаний и представлений об особенностях функционирования водных экосистем разного типа, недостаток данных непосредственных наблюдений. Все это приводит к возникновению неопределенностей на этапах формирования структуры моделей и количественной оценки значений их эмпирических параметров [Subbey, 2018; Hipsey et al., 2020; Steenbeek et al., 2021].

Одной из наиболее трудных и принципиальных проблем математического моделирования является проблема количественной оценки значений эмпирических параметров моделей [Podgornyj, Leonov, 2015; Hipsey et al., 2020]. В большинстве случаев при разработке математических моделей водных экосистем исследователи располагают более или менее достаточной и надежной информацией о значениях и степени пространственно-временной изменчивости переменных состояния экосистем – биомасс гидробионтов, концентраций соединений биогенных элементов и растворенного в водной среде кислорода. В то же время сведений о значениях большого числа эмпирических параметров, которые необходимо использовать в модели при математическом описании физико-химических и биологических процессов, по-прежнему крайне мало [Hipsey et al., 2020].

С формальной точки зрения суть задачи параметризации имитационной модели водной экосистемы состоит в том, чтобы найти наиболее оптимальные значения эмпирических параметров модели с целью обеспечить экстремальное значение некоторого количественного критерия – целевой функции. Параметры модели подбирают таким образом, чтобы найти наилучшее соответствие между модельными и наблюдаемыми данными.

Этого можно добиться либо путем корректировки набора параметров модели методом проб и ошибок (ручная калибровка), либо с помощью тех или иных алгоритмов оптимизации. В современных моделях водных экосистем количество эмпирических параметров может достигать нескольких сотен. Поэтому решение задачи поиска оптимальных значений эмпирических параметров возможно только с помощью разных методов и алгоритмов оптимизации. Важное преимущество методов оптимизации заключается в том, что они являются объективными и повторяемыми методологиями, которые с большой долей вероятности приведут к оптимальному набору параметров [Hipsey et al., 2020].

В качестве критерия адекватности модели можно использовать самые разные по своей структуре критерии (метрики) [Bennett et al., 2013; Harmel et al., 2014; Мотовилов, Гельфан, 2018; Jackson et al., 2019; Hipsey et al., 2020]. Вопрос о выборе конкретного критерия адекватности модели и структуры целевой функции решают по-разному [Marsili-Libelli, 1992; Finley et al., 1998; Marsili-Libelli et al., 2003; Podgornyj, Leonov, 2015; Subbey, 2018]. Во всех таких критериях значение целевой функции оценивают в зависимости от некоторого множества параметров модели. Многие из предложенных критериев требуют для своего применения соблюдения ряда статистических требований (например, требование о законе распределения величин и т. п.). Однако обеспечить выполнение таких требований для гидробиологических данных возможно далеко не всегда. Поэтому строгие статистические критерии оценки адекватности моделей во многих случаях не подходят, и нужно использовать более гибкие подходы и другие метрики.

Основная цель данной работы состоит в том, чтобы на примере имитационных моделей двух водных экосистем – Невской губы и Вислинского залива Балтийского моря – провести сравнительный анализ применения, эффективности и ряда статистических свойств алгоритмов прямого поиска для оценки значений модельных параметров. Обе экосистемы имеют сходные морфометрические и гидрологические условия, близкое географическое положение. Модели построены на одних и тех же методологических принципах и подходах. Сравнительный анализ позволит ответить на важные методические вопросы, которые связаны с процедурами калибровки моделей, оценками чувствительности моделей к изменениям значений параметров.

Материалы и методы

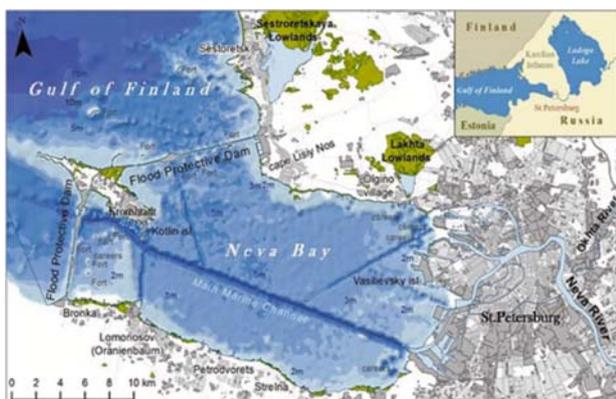
Характерные особенности экосистем Невской губы, Вислинского залива Балтийского моря и структуры имитационных моделей

Невская губа (НГ) Финского залива Балтийского моря – предустьевая зона р. Невы (рис. 1, а). С востока границей НГ служит устье Невы, на западе граница проходит по линии Лисий Нос – Кронштадт – Ломоносов. Длина губы 21 км, наибольшая ширина 15 км, площадь водного зеркала 329 км², преобладающая глубина 3–5 м. Объем водной массы при среднем стоянии уровня составляет 1,2 км³. С Финским заливом НГ сообщается через два пролива у о. Котлин – Северные и Южные ворота.

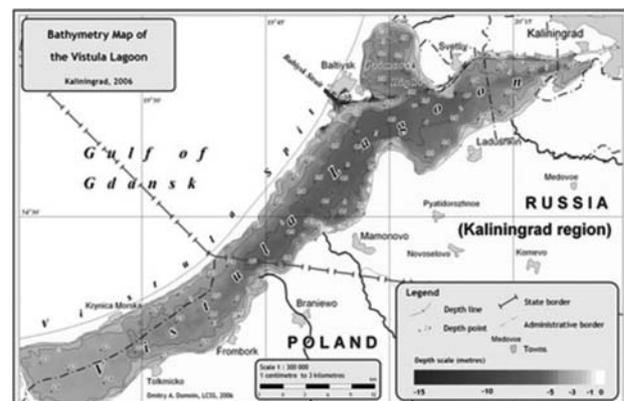
Невская губа – сложная водная экосистема. Она сложна и для проведения полевых экологических исследований, и для разработки математических моделей. Вместе с восточной частью Финского залива НГ является нижним звеном одной из наиболее крупных водных систем Европы, которая включает в себя р. Неву, а также такие большие озера, как Ладожское, Онежское, Сайма и Ильмень. Своеобразие НГ обусловлено целым рядом причин: на формирование ее водной массы значительное влияние оказывает Ладожское озеро, воды которого со стоком р. Невы поступают в НГ в объеме ~ 2400–2500 м³/с; кратность годового водообмена за счет притока речных вод равна 66, что обеспечивает обновление воды в ней в среднем за 5–6 суток, а в центральной транзитной зоне почти вдвое быстрее; НГ – мелководный

водоем с интенсивным ветровым перемешиванием водных масс, разнообразными внутриводоемными процессами биогидрохимической трансформации; велико влияние Балтийского моря, которое сказывается на изменении солености и температуры воды, изменениях уровня воды и структуры биологических сообществ; НГ – район с высоким уровнем техногенной нагрузки на окружающую среду; в периоды штормовых нагонов на экосистему НГ оказывает краткосрочное влияние комплекс водозащитных сооружений г. Санкт-Петербурга от наводнений. Вследствие совместного действия перечисленных факторов Невской губе свойственна чрезвычайно высокая пространственно-временная изменчивость гидрохимических и гидробиологических характеристик и показателей качества воды.

Вислинский залив (ВЗ) расположен в юго-восточной части побережья Балтийского моря в глубине Гданьского залива (рис. 1, б). Залив представляет собой узкую, вытянутую вдоль берега лагуну. По геоморфологическим и гидрологическим признакам ВЗ можно отнести к лагунным экосистемам «полукрытого» типа (по другой классификации – к эстуариям морского типа). Площадь водного зеркала российской части акватории залива составляет около 473 км² (~ 56 %), а суммарная площадь – 838 км². Объем котловины ВЗ – около 2,3 км³, максимальная глубина – 5,2 м, средняя – 2,7 м. От Гданьского залива Балтийского моря ВЗ отделен песчаной косой и соединяется с ним узким Балтийским проливом шириной 400 м и глубиной 8–12 м. Несмотря на свои небольшие размеры, пролив играет существенную роль в



а)



б)

Рис. 1. Географическое положение Невской губы (а) и Вислинского залива (б) Балтийского моря [The Diversity..., 2017]

Fig. 1. Geographical location of the Neva Bay (а) and the Vistula Lagoon (б) of the Baltic Sea [The Diversity..., 2017]

формировании структуры течений, водного и солевого баланса ВЗ, процессах обмена биогенными веществами между Вислинским и Гданьским заливами.

Гидрологический режим ВЗ формируется в результате совместного влияния нескольких факторов. Наиболее важными из них являются метеорологические условия, водообмен с Балтийским морем, поступление речных вод и мелководность залива. Отнесение ВЗ к лагунным системам «полуоткрытого» типа (морским эстуариям) обусловлено интенсивным притоком морских вод на фоне относительно слабого речного стока. Нагонные явления и активное поступление морских вод в залив связаны с фронтальным положением Балтийского пролива относительно преобладающих ветров западных направлений.

Материковый сток в ВЗ составляет около $3,6 \text{ км}^3/\text{год}$. Показатель водообмена для ВЗ по общему стоку – 8,9. Это примерно в 7–7,5 раза меньше, чем в НГ.

Ежегодно в ВЗ поступают большие объемы различных форм соединений азота и фосфора [Witek et al., 2010]. Залив является аккумулятором значительного количества осадочных, растворенных и взвешенных веществ, в том числе и загрязняющих. Поэтому его экосистема очень уязвима и чувствительна к процессам эвтрофикации.

Модели экосистем НГ и ВЗ построены на одних и тех же методологических принципах, однако имеют разную структуру, разное количество модельных переменных и эмпирических параметров. Вопросы разработки структуры моделей, подготовки исходных данных для выполнения расчетов и всесторонней проверки имитационных математических моделей для исследования процессов в экосистемах НГ и ВЗ подробно рассмотрены ранее в ряде работ [Подгорный, 2003, 2018; Podgorny, Leonov, 2013a, b, 2015; Подгорный, Дмитриева, 2022]. Настройка модели НГ и последующие модельные расчеты осуществлены для периода 1984–1987, а модели ВЗ – для периода 1998–2000 гг.

Имитационные модели экосистем НГ и ВЗ включают в себя несколько базовых блоков [Подгорный, 2003, 2018; Podgorny, Leonov, 2013a]. Основным структурным компонентом моделей является биогидрохимический блок. Для экосистемы ВЗ он состоит из двух частей: «Планктонного блока» и блока «Бентос». При выполнении модельных расчетов планктонный и бентосный блоки модели используют одновременно. Моделирование процессов трансформации биогенных веществ в заливе прове-

дено совместно для водной среды и верхнего (деятельного) слоя донных отложений. В модели экосистемы НГ используется «Планктонный блок», а все процессы описываются только для водной среды. Моделирование позволяет количественно исследовать механизмы процессов биогидрохимической трансформации: соединений С, N, P и Si в экосистеме ВЗ; соединений N и P в экосистеме НГ. Обе модели позволяют изучать особенности пространственно-временной динамики растворенного в воде кислорода. Моделирование дает возможность учесть взаимодействие компонентов экосистемы при совместном воздействии как природных, так и антропогенных факторов. Модель экосистемы НГ содержит 17 переменных состояния и 58 настраиваемых эмпирических параметров, а модель экосистемы ВЗ – 60 переменных и 330 параметров.

При моделировании экосистемы НГ для каждого года все модельные расчеты проводили с момента (даты) полного очищения губы ото льда и до 31 октября, а для ВЗ – для периода с 1 января по 31 декабря. Шаг вычислений по времени составлял 0,1 сут. Начальные значения переменных планктонного и бентосного блоков имитационной модели ВЗ при проведении процедур оптимизации (поиска параметров) задавали или по данным многолетних наблюдений, или путем экспертных оценок. Если использовали второй вариант задания начальных условий, то для поиска их уточненных значений, так же как и для других эмпирических параметров модели, выполняли все процедуры оптимизации.

Кроме начальных значений модельных переменных в моделях экосистем НГ и ВЗ необходимо задать начальные значения ряда других переменных: концентрации хлорофилла a Chl_a и глубины видимости белого диска Z_{White} . Во-первых, эти значения необходимы для расчета коэффициента $\mathcal{E}_{ShortWave}$ – экстинкции коротковолновой солнечной радиации. Во-вторых, они служат дополнительными переменными, по которым имеются данные непосредственных наблюдений. Эти данные использованы при построении и расчете значений целевой функции в процедурах оптимизации (калибровки) модели. Для расчетов $\mathcal{E}_{ShortWave}$ в моделях используется оптический блок, который имеет одинаковую структуру для обеих моделей, но разные наборы настраиваемых эмпирических параметров.

Диапазоны изменения всех эмпирических параметров имитационной модели в процедурах оптимизации для всех рассматриваемых лет заданы одинаковыми. Начальные значения

параметров во всех калибровочных расчетах взяты в середине соответствующего диапазона изменения каждого параметра. Таким образом, начальные (стартовые) значения параметров во всех численных экспериментах были одинаковыми.

Математическая формулировка задачи оптимизации

Имитационные модели экосистем Невской губы и Вислинского залива Балтийского моря использованы в локальном приближении (т. е. при отсутствии адвекции и диффузионного переноса). В общем виде такие модели могут быть записаны в виде систем нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений [Подгорный, 2003]:

$$dC_n/dt = F_n(\vec{p}, t, C_1, \dots, C_n), (n = \overline{1, N}), \quad (1)$$

которые описывают процессы трансформации веществ и динамику биотических компонентов экосистемы. Здесь C_n – значения концентраций/биомасс компонентов экосистемы, F_n – оператор, описывающий функциональные выражения связей между компонентами экосистемы, N – число переменных в модели, t – время, \vec{p} – множество эмпирических параметров модели. Численное решение системы (1) выполняли методом Рунге – Кутты 4-го порядка точности в модификации Гилла [Подгорный, 2003]. Вычисленные значения модельных переменных использовали для расчета значений целевой функции в процессе решения оптимизационной задачи.

Математическая формулировка задачи оптимизации состоит в следующем. Допустим, что на данном множестве P k -мерного евклидова пространства E^k существует некоторая точка \vec{p}_m (некоторый оптимальный набор k параметров), в которой целевая функция $f(\vec{p})$ достигает своего минимального значения на множестве P , то есть

$$f(\vec{p}_m) = \min_{\vec{p} \in P} (f(\vec{p})).$$

Решение задачи определения неизвестных параметров имитационной модели состоит в том, чтобы только на основе вычисления значений целевой функции найти оценку \vec{p}_c точки \vec{p}_m с некоторой наперед заданной точностью ε так, чтобы обеспечить выполнение условия сходимости: $|f(\vec{p}_c) - f(\vec{p}_m)| \leq \varepsilon$. Целевая функция обычно не может быть выражена аналитически. Ее свойства исследователю заранее неизвестны.

Множество значений векторной переменной \vec{p} ограничено множеством допустимых значений $P \subset E^k$. Оно образовано ограничениями. В практике экологического моделирования обычно рассматривают оптимизационные задачи минимизации с простыми ограничениями в виде неравенств. В таком случае множество P имеет следующий вид: $P = \{\vec{p} \in E^k : a_j \leq p_j \leq b_j, j = \overline{1, k}\}$, где a_j и b_j – заданные величины, которые определяют нижнюю и верхнюю границы изменения каждого параметра модели $p_j, j = \overline{1, k}$. В некоторых случаях дополнительно необходимо обеспечить соблюдение определенных соотношений между значениями параметров.

Решение оптимизационной задачи проведено в рамках класса методов «нулевого порядка» (или методов прямого поиска) [Рыков, 1993; Finley et al., 1998]. Их применение не требует дифференцируемости целевой функции и/или аналитического ее задания. Нужно только иметь возможность вычислять значения целевой функции $f(\vec{p})$ в произвольных точках параметрического пространства.

В качестве целевой функции и показателя адекватности модели использовали критерий Тейла [Theil, 1971]. Его значение зависит от множества параметров модели и меняется от нуля до единицы (или от 0 до 100 %) [Подгорный, 2003; Podgornyi, Leonov, 2015; Подгорный, Дмитриева, 2022].

Описание алгоритмов прямого поиска

Для решения оптимизационной задачи оценивания значений параметров имитационной модели в данной работе использовали двухэтапный алгоритм прямого поиска [Подгорный, 2003; Podgornyi, Leonov, 2015]. На первом этапе применяли алгоритм случайного поиска [Törn, Zilinskas, 1989; Лесин, Лисовец, 1998]. Его реализацию осуществляли в пределах всего предварительно заданного пространства параметров. Основная задача этого этапа – поиск возможной области существования глобального минимума целевой функции в заданном параметрическом пространстве. В данной работе использовали процедуру случайного поиска с возвратом при неудачном шаге [Подгорный, 2003]. На втором этапе выполняли локальный поиск. Для этого использовали модифицированный симплексный метод Нелдера – Мида [Nelder, Mead, 1965; Химмельблау, 1975; Рыков, 1993; Лесин, Лисовец, 1998]. Задача локального поиска – уточнить положение минимума целевой функции, которое было найдено на первом этапе работы алгоритма.

Форма начального симплекса мало влияет на стратегию поиска и скорость сходимости итерационного процесса и может быть выбрана произвольным образом. Подробное описание и вычислительные особенности применения алгоритма для второго этапа приведены в работе [Подгорный, 2003].

Описание метода оценки чувствительности моделей к изменениям значений эмпирических параметров

Исследование чувствительности моделей к изменению значений тех или иных параметров для НГ и ВЗ проводили по одной и той же методике [Podgornyi, Leonov, 2015; Подгорный, Дмитриева, 2022]. Для каждого модельного года (1998–2000 гг. – для модели ВЗ; 1984–1987 гг. – для модели НГ) проводили по 25 вычислительных экспериментов. В качестве меры чувствительности модели рассматривали отношение суммы средних значений коэффициентов временной вариации по всем переменным модели к коэффициенту вариации каждого параметра модели. Таким образом, мера чувствительности модели к изменению значения того или иного параметра представляет собой относительную величину.

Результаты и обсуждение

Характеристики алгоритмов поиска параметров. Оценка степени трудоемкости использованных методов оптимизации

Для имитационной модели НГ суммарное число итераций в процедуре случайного поиска менялось от 19 360 до 97 848. В среднем для этапа случайного поиска требовалось от 30 838 до 58 014 итераций. Для этапа уточняющего локального поиска с использованием симплексного метода Нелдера – Мида требовалось от 121 до 8357 итераций (в среднем от 3835 до 4645). Таким образом, для решения поставленной

оптимизационной задачи в общей сложности требовалось от 19 726 до 106 205 итераций (в среднем от 35 044 до 62 659).

Для имитационной модели ВЗ на этапе реализации алгоритма случайного поиска число итераций изменялось от 46 694 до 146 483. В среднем на этом этапе требовалось от 87 819 до 99 127 итераций. Для второго этапа – локального поиска – число итераций менялось от 2 до 21 (в среднем 6–7 итераций). Таким образом, в общей сложности требовалось от 46 697 до 146 494 итераций (в среднем от 87 825 до 99 133).

Приведенные данные показывают, что даже в том случае, когда для выполнения процедур оценки параметров модели используется одномерный вариант имитационной модели – только биогидрохимический ее блок, решение поставленной оптимизационной задачи требует проведения интенсивных вычислений с большим количеством итераций и затрат машинного времени. Повышение качества и увеличение количества данных наблюдений, их взаимная согласованность, соблюдение требования синхронности проведения съемок существенно снижает неопределенности в оценках значений целевой функции и, следовательно, напрямую влияет на эффективность реализации вычислительных алгоритмов.

Статистические характеристики для критериев Тейла

В табл. 1 и 2 приведены статистические характеристики для критериев Тейла, которые получены в результате осреднения по отдельным переменным модели экосистемы НГ и ВЗ. Внутригодовая динамика компонентов моделей, которые соответствовали наилучшим решениям оптимизационной задачи, рассмотрена ранее в работах [Podgornyi, Leonov, 2013b; Подгорный, Дмитриева, 2022].

Приведенные статистические характеристики критериев Тейла $f(\bar{p})$ для моделей экосистем НГ и ВЗ позволяют сделать общий вывод

Таблица 1. Статистические характеристики для критериев Тейла $f(\bar{p})$, осредненных по отдельным переменным имитационной модели Невской губы

Table 1. Statistical characteristics for Theil criteria $f(\bar{p})$ averaged over individual variables of the Neva Bay simulation model

Год Year	$f(\bar{p})_{min}$	$f(\bar{p})_{max}$	$f(\bar{p})_{max} - f(\bar{p})_{min}$	$\overline{f(\bar{p})}$	CV, %
1984	21,585	24,564	2,979	23,837	3,428
1985	21,996	23,655	1,659	22,481	1,983
1986	25,783	29,278	3,495	27,514	3,979
1987	26,294	28,413	2,119	27,445	2,133

Таблица 2. Статистические характеристики для критериев Тейла $f(\bar{p})$, осредненных по отдельным переменным имитационной модели Вислинского залива

Table 2. Statistical characteristics for Theil criteria $f(\bar{p})$ averaged over individual variables of the Vistula Lagoon simulation model

Год Year	$f(\bar{p})_{min}$	$f(\bar{p})_{max}$	$f(\bar{p})_{max} - f(\bar{p})_{min}$	$\overline{f(\bar{p})} \pm \sigma_{f(\bar{p})}$	CV, %
1998	16,855	17,831	0,976	17,405 ± 0,189	1,084
1999	18,186	19,008	0,822	18,539 ± 0,195	1,051
2000	16,272	17,346	1,074	16,764 ± 0,269	1,602

о том, что в основном по всем переменным имитационных моделей получены достаточно хорошие соответствия результатов моделирования данным непосредственных наблюдений. Это следует из рассмотрения средних значений критериев $f(\bar{p})$ для модельных переменных и диапазонов их изменения, а также величин коэффициентов вариации.

Расчеты критериев Тейла по отдельным переменным модели НГ для периода с 1984 по 1987 г. позволили оценить, по каким именно переменным модели и почему процедуры поиска параметров дают худшие результаты. Анализ полученных данных показал, что это относится в основном к биомассам фитопланктона, простейших организмов и зоопланктона, выраженным в единицах азота и фосфора – B_{Algae}^N , B_{Algae}^P , $B_{Protozoa}^N$, $B_{Protozoa}^P$, B_{Zoopl}^N , B_{Zoopl}^P ; в отдельных случаях – к концентрациям соединений биогенных элементов C_{DIP} , C_{DOP} , $C_{NO_2^-}$ (табл. 3).

По другим переменным имитационной модели соответствие результатов моделирования данным непосредственных наблюдений находилось в пределах 20–25 %. Это как раз и указывает на то, что основные процессы трансформации соединений N и P, динамики растворенного в воде O_2 воспроизводятся имитационной моделью НГ вполне корректно.

Дальнейший анализ данных наблюдений, результатов моделирования и исследование балансов соединений биогенных элементов показали, что основная причина интенсивного развития гетеротрофных микроорганизмов в водах НГ – значительное поступление аллохтонного органического вещества из внешних источников. Таким образом, роль бактериопланктона в трансформации биогенных веществ в НГ велика, а роль фито- и зоопланктона в этих процессах существенно ниже. По-видимому, именно с этим могут быть связаны ос-

Таблица 3. Статистические характеристики для критериев Тейла $f(\bar{p})$ по отдельным переменным имитационной модели Невской губы

Table 3. Statistical characteristics for Theil criteria $f(\bar{p})$ for individual variables of the Neva Bay simulation model

Переменная модели Model variable	$f(\bar{p})_{min}$	$f(\bar{p})_{max}$	$\overline{f(\bar{p})}$
B_{Algae}^N	28,3–47,9	33,0–50,0	30,8–49,3
B_{Algae}^P	30,4–43,9	35,3–49,9	32,6–48,5
$B_{Protozoa}^N$	21,4–28,7	26,2–39,3	22,6–37,1
$B_{Protozoa}^P$	21,2–28,6	26,4–39,1	22,6–37,4
B_{Zoopl}^N	27,2–60,6	39,2–63,4	35,4–63,0
B_{Zoopl}^P	25,8–54,1	39,1–63,5	35,3–62,6
$C_{NO_2^-}$	15,5–17,3	19,3–28,5	16,6–20,6
C_{DOP}	13,8–17,2	18,0–29,5	15,7–21,6
C_{DIP}	12,6–31,5	21,5–35,1	18,3–32,6

новые причины достаточно высоких ошибок в воспроизведении сезонного хода таких переменных модели, как B_{Algae}^N , B_{Algae}^P , $B_{Protozoa}^N$, $B_{Protozoa}^P$, B_{Zoopl}^N , B_{Zoopl}^P . Их динамика, в отличие от динамики $B_{Bacteria}^N$, $B_{Bacteria}^P$, в большей степени связана с пассивным переносом водой. Она слабо зависит от циклов биогенных элементов, их интенсивности и именно поэтому недостаточно хорошо воспроизводится с помощью имитационной модели.

Средние значения критерия $f(\bar{p})$ для переменных модели ВЗ обычно были менее 20 % и только в отдельных случаях находились в пределах 20–25 %. Вместе с тем следует обратить внимание на более сильные расхождения между модельными расчетами и данными наблюдений для концентраций $C_{NH_4^+}$, $C_{NO_2^-}$, $C_{NO_3^-}$. По этим компонентам критерий $f(\bar{p})$ может достигать значений 27–32 %. Скорее всего, это связано с качеством исходных данных наблюдений, которые были использованы для проверки адекватности модели.

Полученные данные свидетельствуют о том, что предлагаемые алгоритмы поиска параметров для биогидрохимического блока имитационных моделей НГ и ВЗ в обоих случаях позволили в целом успешно решить поставленную оптимизационную задачу. Выполненные расчеты показали, что предлагаемые алгоритмы оптимизации достаточно эффективны, надежны и обеспечивают статистическую сходимость получаемых результатов.

Результаты выполнения процедур по оценке параметров имитационных моделей. Статистические характеристики изменчивости найденных значений параметров

После проведения ряда предварительных вычислительных экспериментов было установлено, что значения коэффициентов смертности, которые в модели позволяют регулировать смертность гидробионтов в зависимости от условий питания, могут быть приняты равными нулю. Концентрации пищевых субстратов для питания планктонных и бентосных организмов в НГ и ВЗ достаточно велики. Поэтому значимого пищевого лимитирования роста организмов нет. Следовательно, условия питания не являются существенным регулятором процессов отмирания гидробионтов. Полученный результат позволяет не только уменьшить количество настраиваемых эмпирических параметров, но также оптимизировать структуру моделей и в определенной степени уменьшить их структурную неопределенность.

Данные моделирования для НГ показали, что в подавляющем числе случаев коэффициенты вариации для рядов разных параметров не превышают 35 %. Однако для коэффициентов температурных функций, а в ряде случаев также и для коэффициентов смертности и экскреции коэффициенты вариации могут превышать 40–50 %.

Значения для отдельных параметров биогидрохимического блока имитационных моделей ВЗ и НГ, полученные в результате выполнения процедур оптимизации, приведены в табл. 4 и 5. Дать всестороннюю оценку согласованности модельных параметров с оценками скоростей биогеохимических процессов, основанных на экспериментальных данных, на данном этапе не представляется возможным. В полевых условиях такие экспериментальные измерения (измерения параметров «под конкретную модель») ни в ВЗ, ни в НГ не проводятся.

В результате проведения вычислительных экспериментов установлено также, что в значительном количестве случаев (~20 %) существуют статистически достоверные межгодовые различия между средними и/или дисперсиями значений тех или иных параметров, причем в разные годы могут достоверно отличаться статистические характеристики разных параметров. Таким образом, для модели экосистемы НГ использовать одни и те же значения модельных параметров для разных лет при проведении вычислительных экспериментов нельзя.

Данные моделирования для ВЗ свидетельствуют о том, что в подавляющем числе случаев коэффициенты вариации для рядов разных параметров не превышают 15 %. Однако для коэффициентов $\delta_{N_{detr \rightarrow DON}}$, $\delta_{Si_{detr \rightarrow DOSi}}$, которые характеризуют порядок ферментативной реакции при описании процесса нелинейного разложения детрита и превращения детрита в растворенное органическое вещество (DON, DOSi), коэффициенты вариации могут быть существенно выше. Так, для коэффициента $\delta_{N_{detr \rightarrow DON}}$ коэффициенты вариации для периода 1998–2000 гг. менялись от 31 до 39 %, а для коэффициента $\delta_{Si_{detr \rightarrow DOSi}}$ – от 51 до 75 %. Значительной может быть изменчивость и для коэффициентов, которые используются при расчете скорости изменения концентрации растворенного в воде органического азота, фосфора и кремния, обусловленного процессами экскреции. Коэффициенты вариации для указанных эмпирических параметров модели могут меняться в пределах от 30 до 65 %. Высокая изменчивость параметров связана с постоянно высоким уровнем содержания растворенных органических веществ (POB) в воде ВЗ.

Таблица 4. Наилучшие наборы некоторых значений оцениваемых параметров для биогидрохимического блока имитационной модели Вислинского залива Балтийского моря (период 1998–2000 гг.)

Table 4. The best sets of some values of the estimated parameters for the biogeochemical block of the simulation model of the Vistula Lagoon of the Baltic Sea (period 1998–2000)

№ параметра Parameter No.	Название параметра Parameter name	Единицы измерения Units	Годы Years		
			1998	1999	2000
1	$(Uptake_{max})_{Bacteria}$	сут ⁻¹	6,36456E-01	4,92814E-01	5,78567E-01
2	$(Uptake_{max})_{Bacill}$	сут ⁻¹	3,08199E+00	2,43729E+00	2,54462E+00
3	$(Uptake_{max})_{Cyan}$	сут ⁻¹	2,38170E+00	2,14304E+00	1,90549E+00
4	$(Uptake_{max})_{Chlor}$	сут ⁻¹	3,04055E+00	2,62055E+00	2,79496E+00
5	$(Uptake_{max})_{Protozoa}$	сут ⁻¹	2,89965E-01	2,84112E-01	2,62334E-01
6	$(Uptake_{max})_{HerbZoopl}$	сут ⁻¹	4,52177E-01	5,80721E-01	5,36575E-01
7	$(Uptake_{max})_{PredZoopl}$	сут ⁻¹	1,62989E-01	1,46256E-01	1,70227E-01
8	$(Uptake_{max})_{MacroPh}$	сут ⁻¹	9,70142E-01	8,02816E-01	7,96625E-01
9	$(Uptake_{max})_{Chiron}$	сут ⁻¹	1,21073E-01	1,12011E-01	1,09193E-01
10	$(Uptake_{max})_{Oligoch}$	сут ⁻¹	5,48060E-01	5,52479E-01	5,50020E-01
11	$(Uptake_{max})_{Polych}$	сут ⁻¹	4,89951E-01	4,48702E-01	4,38001E-01
12	$(Uptake_{max})_{Mollusca}$	сут ⁻¹	1,47695E-01	1,42298E-01	1,58705E-01
13	$(Uptake_{max})_{Misidae}$	сут ⁻¹	8,25141E-02	8,65474E-02	8,74198E-02
194	$TransfR_{N_detr \rightarrow DON}^*$	сут ⁻¹	1,31002E-04	1,48499E-04	1,27149E-04
196	$TransfR_{NH_4^+ \rightarrow NO_2^-}^*$	сут ⁻¹	2,34117E-01	2,13379E-01	2,82105E-01
197	$TransfR_{NO_2^- \rightarrow NO_3^-}^*$	сут ⁻¹	2,21641E-01	2,16506E-01	2,68389E-01
198	$TransfR_{NO_3^- \rightarrow N_2}^*$	сут ⁻¹	2,19429E+00	1,70102E+00	2,43760E+00
199	$TransfR_{P_detr \rightarrow DOP}^*$	сут ⁻¹	6,71348E-04	7,43640E-04	6,93334E-04
201	$TransfR_{DOP \rightarrow DIP}^*$	сут ⁻¹	1,49202E-03	1,36282E-03	1,73562E-03
202	$TransfR_{Si_detr \rightarrow DOSi}^*$	сут ⁻¹	1,53209E-04	1,32452E-04	1,32882E-04
204	$TransfR_{DOSi \rightarrow DISi}^*$	сут ⁻¹	1,51468E-03	1,41167E-03	1,47626E-03
265	$U_{N_detr}^{sed}$	сут ⁻¹	1,40609E-01	1,41019E-01	1,41855E-01
266	$U_{P_detr}^{sed}$	сут ⁻¹	3,68128E-01	3,69385E-01	4,21623E-01
267	$U_{Si_detr}^{sed}$	сут ⁻¹	1,33551E-01	1,41648E-01	1,15385E-01
268	$U_{N_detr_sed}^{resusp}$	сут ⁻¹	2,33008E-04	2,32331E-04	2,34135E-04
269	$U_{P_detr_sed}^{resusp}$	сут ⁻¹	1,34006E-05	1,28779E-05	1,30633E-05
270	$U_{Si_detr_sed}^{resusp}$	сут ⁻¹	5,18452E-04	5,43598E-04	4,96651E-04
271	$U_{DOC_sed}^{resusp}$	сут ⁻¹	1,41007E-06	1,35195E-06	1,34219E-06
272	$U_{NH_4^+_sed}^{resusp}$	сут ⁻¹	4,34747E-05	5,68333E-05	5,45507E-05
273	$U_{NO_3^-_sed}^{resusp}$	сут ⁻¹	2,73541E-05	2,06782E-05	2,56563E-05

Окончание табл. 4
Table 4 (continued)

№ параметра Parameter No.	Название параметра Parameter name	Единицы измерения Units	Годы Years		
			1998	1999	2000
274	$U_{O_2_sed}^{resusp}$	сут ⁻¹	1,58201E-04	1,52663E-04	1,45796E-04
275	$U_{DIP_sed}^{resusp}$	сут ⁻¹	1,97420E-08	1,55005E-08	1,78824E-08
276	$U_{DISi_sed}^{resusp}$	сут ⁻¹	8,99494E-06	8,75573E-06	7,04096E-06
277	$U_{O_2_sed}^{resusp}$	сут ⁻¹	9,19668E-05	8,74732E-05	8,83247E-05

Таблица 5. Наилучшие наборы некоторых значений оцениваемых параметров для биогидрохимического блока имитационной модели Невской губы Финского залива (период 1984–1987 гг.)

Table 5. The best sets of some values of the estimated parameters for the biogeochemical block of the simulation model of the Neva Bay of the Gulf of Finland (period 1984–1987)

№ параметра Parameter No.	Название параметра Parameter name	Единицы измерения Units	Годы Years			
			1984	1985	1986	1987
25	$(Uptake_{max})_{Bacteria}$	сут ⁻¹	1,08571	1,06731	1,08277	1,17717
26	$(Uptake_{max})_{Algae}$	сут ⁻¹	1,00035	1,74041	0,96112	2,84757
27	$(Uptake_{max})_{Protozoa}$	сут ⁻¹	0,47637	0,55997	0,75432	0,69218
28	$(Uptake_{max})_{Zoopl}$	сут ⁻¹	0,20943	0,18266	0,23413	0,17473
53	$TransfR_{N_detr \rightarrow DON}^*$	сут ⁻¹	0,00122	0,00167	0,00235	0,00244
54	$TransfR_{NH_4^+ \rightarrow NO_2^-}^*$	сут ⁻¹	0,00229	0,00192	0,00146	0,00379
55	$TransfR_{NO_2^- \rightarrow NO_3^-}^*$	сут ⁻¹	0,01692	0,02061	0,02995	0,02736
56	$TransfR_{P_detr \rightarrow DOP}^*$	сут ⁻¹	0,15078	0,18586	0,21556	0,19649
57	$TransfR_{DOP \rightarrow DIP}^*$	сут ⁻¹	0,00131	0,00134	0,00119	0,00221

На этом фоне органическое вещество, которое образуется в процессе экскреции органического вещества гидробионтами, по уровню оказывается менее значимым фактором в картине общей динамики ПОВ. В этом случае частные «вклады» в средневзвешенное значение критерия Тейла, которые рассчитываются по модельным компонентам DON, DOP, DOSi, будут мало меняться в процессе выполнения процедур оптимизации.

Результаты однофакторного дисперсионного анализа показали, что для 85 % исследованных параметров модели экосистемы ВЗ межгодовые различия их значений недостоверны на уровне значимости $\alpha = 0,05$. Для 8 % параметров на том же уровне значимости межгодовые различия оказались достоверными. Для оставшихся 7 % параметров модели межгодовые различия их значений достоверны на уровне значимости и достоверно не отличаются на

уровне значимости $\alpha = 0,01$. Полученные результаты показали, что примерно в 8–15 % от всего исследованного набора эмпирических параметров имитационной модели экосистемы ВЗ межгодовые отличия значений параметров статистически достоверны или могут быть достоверными. Проведенный анализ свидетельствует о том, что следует с большой осторожностью использовать одни и те же значения модельных параметров для разных лет при проведении вычислительных экспериментов.

Исследование чувствительности моделей к изменению параметров и начальных условий

Оценка чувствительности математической модели к изменению значений параметров – важный этап ее построения и отладки. Он дает возможность отобрать среди всего набора

эмпирических параметров наиболее важные и значимые для функционирования всей системы. Примеры расчетов значений коэффициентов чувствительности для моделей экосистем НГ и ВЗ показаны на рис. 2. Чем более «чувствительна» модель к изменениям значений того или иного параметра, тем сильнее будет «выброс» значения коэффициента чувствительности на графике.

Расчеты коэффициентов чувствительности для модели экосистемы НГ показали, что более высокая чувствительность модели к изменению значений параметров в разные годы связана с разными параметрами. Таким образом, нельзя однозначно указать какую-либо «ведущую» группу параметров, определяющую качество настройки модели. Тем не менее можно отметить, что наиболее важными являются параметры для функций температурной коррекции скоростей потребления веществ, а также коэф-

фициенты, которые используются при расчете скорости отмирания гидробионтов. Именно на эти коэффициенты, на их правильную оценку следует обращать особое, первостепенное внимание.

Расчеты коэффициентов чувствительности для модели экосистемы ВЗ показали, что более высокая чувствительность модели к изменению значений параметров в разные годы связана с одними и теми же группами параметров. Во-первых, это относится к значениям коэффициентов смертности всех рассматриваемых в модели бентосных организмов (хируномид, олигохет, полихет, моллюсков и мизид) для цикла азота. Во-вторых, достаточно высока чувствительность модели к изменению значения коэффициента, который используется при расчете скорости трансформации азота в составе детрита в аммонийный азот в верхнем слое донных отложений (ДО). В-третьих, следует

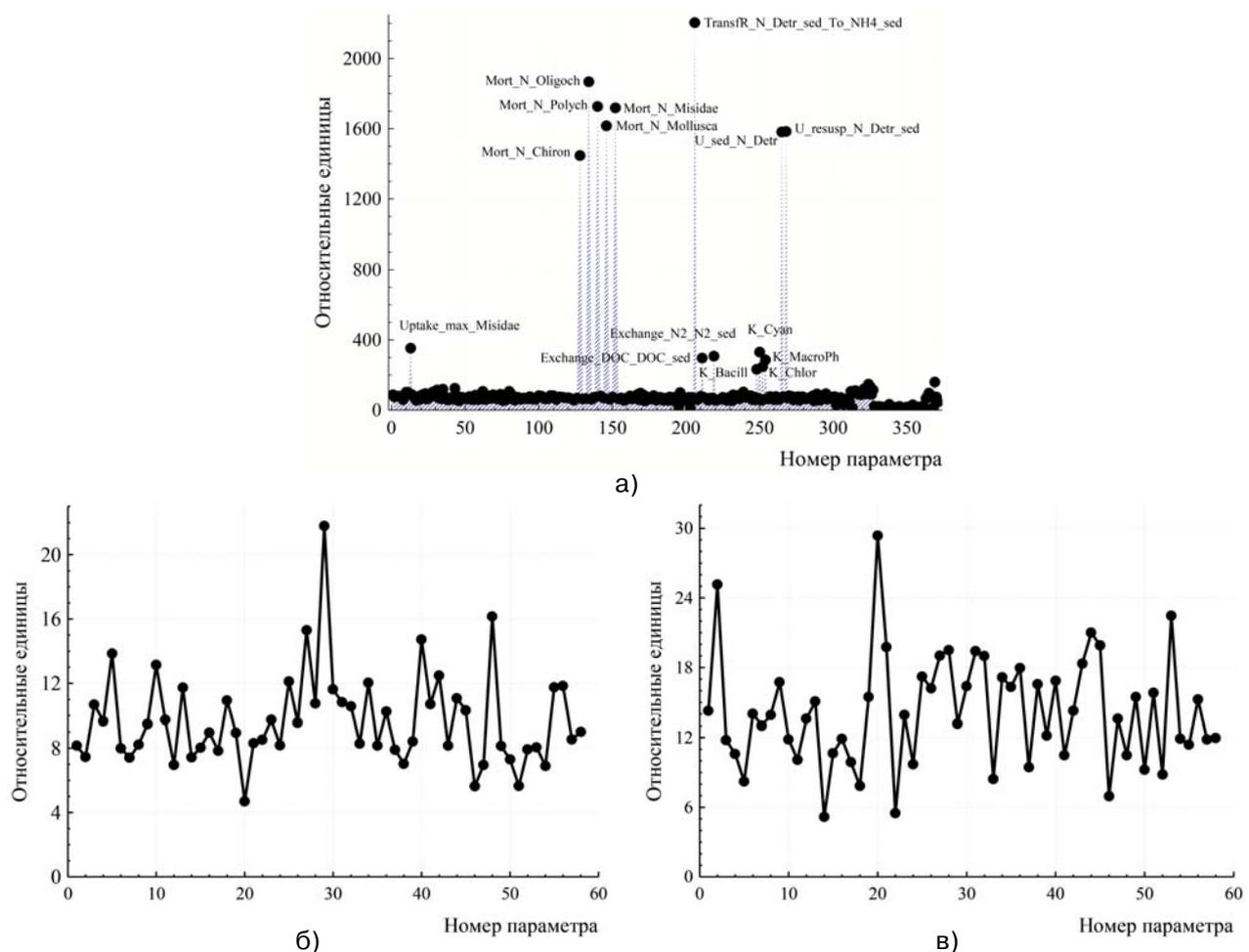


Рис. 2. Коэффициенты чувствительности модели (в относительных единицах) к изменению значений модельных параметров: а – Вислинский залив, 1999 г.; б, в – Невская губа: б – 1984 г.; в – 1986 г.

Fig. 2. Coefficients (in relative units) of model sensitivity to changes in the values of model parameters: а – Vistula Lagoon, 1998; б, в – Neva Bay: б – 1984; в – 1986

обратить внимание на чувствительность модели к параметрам, которые характеризуют скорости обменных процессов на границе вода-ДО (в частности, для растворенного органического углерода и свободного азота). В-четвертых, модель чувствительна к изменению значений коэффициентов, которые используются при расчете концентрации растворенного в воде кислорода (для разных систематических групп фитопланктона и макрофитов). В-пятых, высока чувствительность модели по отношению к параметрам, которые характеризуют скорости седиментации взвесей и ресуспензии донных отложений (в первую очередь это относится к азоту в составе детрита).

Можно обратить внимание на то, что более сильные расхождения между данными моделирования и данными наблюдений для аммонийного азота, азота нитритов и нитратов могут быть связаны еще и с высокой чувствительностью модели к изменению значений коэффициентов при описании процессов в цикле азота.

Таким образом, можно указать на «ведущие» группы параметров, которые во многом определяют качество настройки модели. Однако для этого желательно иметь также и оценки этих величин на основании данных натуральных или экспериментальных наблюдений.

Структура имитационной модели для НГ гораздо более простая по сравнению с моделью экосистемы ВЗ. По всей видимости, группы «ведущих» параметров, которые наиболее сильно влияют на чувствительность модели, во многом зависят от структуры модели. Кроме того, параметрическая чувствительность модели может быть обусловлена межгодовыми изменениями условий функционирования экосистемы и последующими за этим перестройками ее структуры и перераспределениями потоков веществ внутри экосистемы.

Модельными экспериментами было установлено, что чувствительность моделей к начальным значениям переменных имитационных моделей, которые задавали по осредненным данным наблюдений или путем экспертных оценок, в целом невысока.

Заключение

Разработка методов количественной оценки значений параметров математических моделей, которые используют при описании физико-химических и биологических процессов в водных экосистемах, является одной из наиболее трудных и принципиальных проблем математического моделирования. В современных моделях водных экосистем количество

эмпирических параметров может достигать нескольких сотен. Поэтому решение задачи поиска наиболее оптимальных значений параметров (калибровки моделей) возможно только с помощью разных алгоритмов оптимизации.

По-прежнему актуальным остается требование к качеству и количеству данных непосредственных наблюдений. При этом важно обеспечить взаимную согласованность данных, соблюдение требования синхронности проведения съемок. Выполнение этих условий позволит существенно снизить неопределенности в оценках значений целевой функции, что приведет к более эффективному и устойчивому использованию вычислительных алгоритмов.

Результаты настоящей работы показали, что предлагаемые алгоритмы поиска параметров для биогидрохимического блока имитационных моделей НГ и ВЗ позволяют в целом успешно решать оптимизационную задачу даже в условиях недостаточного объема данных наблюдений и сравнительно высокой их временной изменчивости. Применяемые алгоритмы доказали свою эффективность, обеспечили надежность и статистическую сходимость получаемых результатов. Они универсальны и могут быть использованы также и для других моделей экосистем и географических объектов (озер, водохранилищ). Важная задача будущих исследований – проверить эффективность алгоритмов при использовании других метрик и критериев адекватности моделей.

Численные эксперименты с моделями позволили установить, что примерно в 8–15 % от всего исследованного набора эмпирических параметров имитационной модели экосистемы ВЗ и около 20 % – для модели НГ Финского залива межгодовые отличия значений параметров статистически достоверны или могут быть достоверны в зависимости от выбора уровня значимости. Поэтому при проведении сценарных расчетов и/или решении задач прогнозирования следует с большой осторожностью использовать одни и те же значения модельных параметров для разных лет даже для одной и той же водной экосистемы, не говоря уже о разных экосистемах. Полученный результат крайне важен. Он со всей определенностью свидетельствует о том, что даже если моделируемые системы имеют похожие морфометрические, гидрологические условия, сходную временную динамику развития гидрофизических, гидрохимических и гидробиологических процессов, то использование одних и тех же наборов значений модельных параметров может привести к существенным ошибкам при выполнении модельных расчетов.

Результаты сравнительного анализа показали, что для модели экосистемы ВЗ высокая чувствительность модели в разные годы была связана с одними и теми же группами параметров, а для НГ – с разными их комбинациями. Структура имитационной модели для НГ гораздо более простая по сравнению с моделью экосистемы ВЗ, хотя обе они и построены на одних и тех же методологических принципах. По всей видимости, группы «ведущих» параметров, которые наиболее сильно влияют на чувствительность модели, во многом зависят от структуры имитационной модели. Кроме того, значительное влияние могут оказывать существенные различия показателей водообмена в НГ и ВЗ. Изменения параметрической чувствительности моделей могут быть обусловлены также и межгодовыми изменениями условий функционирования экосистем и последующими за этим перестройками их структуры и перераспределениями потоков веществ внутри экосистемы. Рассмотрение этих непростых методических вопросов требует дополнительных исследований.

Литература

- Лесин В. В., Лисовец Ю. П. Основы методов оптимизации. М.: Изд-во МАИ, 1998. 344 с.
- Мотовилов Ю. Г., Гельфан А. Н. Модели формирования стока в задачах гидрологии речных бассейнов. М.: ИВП РАН, 2018. 300 с.
- Подгорный К. А. Математическое моделирование пресноводных экосистем нестратифицированных водоемов (алгоритмы и численные методы). Рыбинск: Рыбинский дом печати, 2003. 328 с.
- Подгорный К. А. Математическая модель для изучения экосистемы Вислинского залива Балтийского моря. Часть 1. Теоретические основы и структура модели, методология подготовки исходных данных для выполнения расчетов. Калининград: АтлантНИРО, 2018. 271 с.
- Подгорный К. А., Дмитриева О. А. Математическое моделирование процессов трансформации соединений биогенных элементов в экосистеме Вислинского залива Балтийского моря // Труды Карельского научного центра РАН. 2022. № 6. С. 142–160. doi: 10.17076/lim1605
- Рыков А. С. Поисковая оптимизация. Методы деформируемых конфигураций. М.: Физматлит, 1993. 216 с.
- Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. М.: Мир, 1975. 515 с.
- Bennett N. D., Croke B. F. W., Guariso G., Guillaume J. H. A., Hamilton S. H., Jakeman A. J., Marsili-Libelli S., Newham L. T. H., Norton J. P., Perrin C., Pierce S. A., Robson B., Seppelt R., Voinov A. A., Fath B. D., Andreassian V. Characterising performance of environmental models // Environ. Model. Softw. 2013. Vol. 40. P. 1–20. doi: 10.1016/j.envsoft.2012.09.011
- Finley J. R., Pinter J. D., Satish M. G. Automatic model calibration applying global optimization techniques // Environ. Model. Assess. 1998. Vol. 3. P. 117–126. doi: 10.1023/A:1019010822186
- Harmel R. D., Smith P. K., Migliaccio K. W., Chaubey I., Douglas-Mankin K. R., Benham B., Shukla S., Muñoz-Carpena R., Robson B. J. Evaluating, interpreting, and communicating performance of hydrologic/water quality models considering intended use: a review and recommendations // Environ. Model. Softw. 2014. Vol. 57. P. 40–51. doi: 10.1016/j.envsoft.2014.02.013
- Hipsey M. R., Gal G., Arhonditsis G. B., Carey C. C., Elliott J. A., Frassl M. A., Janse J. H., de Mora L., Robson B. J. A system of metrics for the assessment and improvement of aquatic ecosystem models // Environ. Model. Softw. 2020. Vol. 128. Art. 104697. doi: 10.1016/j.envsoft.2020.104697.
- Jackson E. K., Roberts W., Nelsen B., Williams G. P., Nelson E. J., Ames D. P. Introductory overview: Error metrics for hydrologic modelling – a review of common practices and an open source library to facilitate use and adoption // Environ. Model. Softw. 2019. Vol. 119. P. 32–48. doi: 10.1016/j.envsoft.2019.05.001
- Marsili-Libelli S. Parameter estimation of ecological models // Ecol. Model. 1992. Vol. 62. P. 233–258. doi: 10.1016/0304-3800(92)90001-U
- Marsili-Libelli S., Guerrizio S., Checchi N. Confidence regions of estimated parameters for ecological systems // Ecol. Model. 2003. Vol. 165. P. 127–146. doi: 10.1016/S0304-3800(03)00068-1
- Model sensitivity and uncertainty analysis // Water resources systems planning and management. UNESCO, 2005. P. 255–290.
- Nelder J. A., Mead R. A simplex method for function minimization // Comput. J. 1965. Vol. 7. P. 308–313. doi: 10.1093/comjnl/7.4.308
- Podgorny K. A., Leonov A. V. The use of a spatially heterogeneous simulation model for studying biotransformation processes of nitrogen and phosphorus compounds and the dynamics of oxygen dissolved in water in the ecosystem of Neva Bay, the Gulf of Finland: 1. Model description // Water Resources. 2013a. Vol. 40, no. 2. P. 170–180. doi: 10.1134/S0097807813020061
- Podgorny K. A., Leonov A. V. The use of a spatially heterogeneous simulation model for studying biotransformation processes of nitrogen and phosphorus compounds and the dynamics of oxygen dissolved in water in the ecosystem of Neva Bay, the Gulf of Finland: 2. Input data for calculations, modeling results, and their analysis // Water Resources. 2013b. Vol. 40, no. 3. P. 254–270. doi: 10.1134/S009780781303007X
- Podgorny K. A., Leonov A. V. Review of the current methods used to assess the values of coefficients, sensitivity, and adequacy of simulation models of aquatic ecosystems // Water Resources. 2015. Vol. 42, no. 4. P. 477–499. doi: 10.7868/S0321059615040124
- Steenbeek J., Buszowski J., Chagaris D., Christensen V., Coll M., Fulton E. A., Katsanevakis S., Lewis K. A., Mazaris A. D., Macias D., de Mutsert K., Oldford G., Pennino M. G., Piroddi C., Romagnoni G., Serpetti N., Shin Y.-J., Spence M. A., Stelzenmüller V. Making spatial-temporal marine ecosystem modelling better – a perspective // Environ. Model. Softw. 2021. Vol. 145. Art. 105209. doi: 10.1016/j.envsoft.2021.105209

Subbey S. Parameter estimation in stock assessment modelling: caveats with gradient-based algorithms // *ICES J. Mar. Sci.* 2018. Vol. 75. P. 1553–1559. doi: 10.1093/icesjms/fsy044.

The Diversity of Russian estuaries and lagoons exposed to human influence / Ed. R. D. Kosyan. Switzerland, Springer, 2017. 270 p. doi: 10.1007/978-3-319-43392-9

Theil H. Applied economic forecasting. Amsterdam: North-Holland, 1971. 474 p.

Törn A., Zilinskas A. Global optimization. Lectures notes in computer science. Berlin: Springer-Verlag, 1989. Vol. 350. 260 p.

Witek Z., Zalewski M., Wielgat-Rychert M. Nutrient stocks and fluxes in the Vistula lagoon at the end of the twentieth century. Slupsk-Gdynia, 2010. 186 p.

References

Bennett N. D., Croke B. F. W., Guariso G., Guillaume J. H. A., Hamilton S. H., Jakeman A. J., Marsili-Libelli S., Newham L. T. H., Norton J. P., Perrin C., Pierce S. A., Robson B., Seppelt R., Voinov A. A., Fath B. D., Andreassian V. Characterising performance of environmental models. *Environ. Model. Softw.* 2013;40:1–20. doi: 10.1016/j.envsoft.2012.09.011

Finley J. R., Pinter J. D., Satish M. G. Automatic model calibration applying global optimization techniques. *Environ. Model. Assess.* 1998;3:117–126. doi: 10.1023/A:1019010822186

Harmel R. D., Smith P. K., Migliaccio K. W., Chaudhary I., Douglas-Mankin K. R., Benham B., Shukla S., Muñoz-Carpena R., Robson B. J. Evaluating, interpreting, and communicating performance of hydrologic/water quality models considering intended use: a review and recommendations. *Environ. Model. Softw.* 2014;57:40–51. doi: 10.1016/j.envsoft.2014.02.013

Himmelblau D. Applied nonlinear programming. Moscow: Mir; 1975. 515 p. (In Russ.)

Hipsey M. R., Gal G., Arhonditsis G. B., Carey C. C., Elliott J. A., Frassl M. A., Janse J. H., de Mora L., Robson B. J. A system of metrics for the assessment and improvement of aquatic ecosystem models. *Environ. Model. Softw.* 2020;128:104697. doi: 10.1016/j.envsoft.2020.104697

Jackson E. K., Roberts W., Nelsen B., Williams G. P., Nelson E. J., Ames D. P. Introductory overview: Error metrics for hydrologic modelling – a review of common practices and an open source library to facilitate use and adoption. *Environ. Model. Softw.* 2019;119:32–48. doi: 10.1016/j.envsoft.2019.05.001

Kosyan R. D. (ed.). The Diversity of Russian estuaries and lagoons exposed to human influence. Switzerland: Springer; 2017. 270 p. doi: 10.1007/978-3-319-43392-9

Lesin V. V., Lisovets Yu. P. Fundamentals of optimization methods. Moscow: MAI Publ.; 1998. 344 p. (In Russ.)

Marsili-Libelli S. Parameter estimation of ecological models. *Ecol. Model.* 1992;62:233–258. doi: 10.1016/0304-3800(92)90001-U

Marsili-Libelli S., Guerrizio S., Checchi N. Confidence regions of estimated parameters for ecological systems. *Ecol. Model.* 2003;165:127–146. doi: 10.1016/S0304-3800(03)00068-1

Model sensitivity and uncertainty analysis. *Water resources systems planning and management.* UNESCO; 2005. P. 255–290.

Motovilov Yu. G., Gel'fan A. N. Models of runoff formation in problems of hydrology of river basins. Moscow: IWP RAN Publ.; 2018. 300 p. (In Russ.)

Nelder J. A., Mead R. A simplex method for function minimization. *Comput. J.* 1965;7:308–313. doi: 10.1093/comjnl/7.4.308

Podgorny K. A., Dmitrieva O. A. Mathematical modeling of the transformations of nutrient compounds in the Vistula Lagoon ecosystem, Baltic Sea. *Trudy Kareli'skogo nauchnogo tsentra RAN = Transactions of the Karelian Research Centre RAS.* 2022;6:142–160. doi: 10.17076/lim1605 (In Russ.)

Podgorny K. A., Leonov A. V. The use of a spatially heterogeneous simulation model for studying biotransformation processes of nitrogen and phosphorus compounds and the dynamics of oxygen dissolved in water in the ecosystem of Neva Bay, the Gulf of Finland: 1. Model description. *Water Resources.* 2013a;40(2): 170–180. doi: 10.1134/S0097807813020061

Podgorny K. A., Leonov A. V. The use of a spatially heterogeneous simulation model for studying biotransformation processes of nitrogen and phosphorus compounds and the dynamics of oxygen dissolved in water in the ecosystem of Neva Bay, the Gulf of Finland: 2. Input data for calculations, modeling results, and their analysis. *Water Resources.* 2013b;40(3):254–270. doi: 10.1134/S009780781303007X

Podgorny K. A., Leonov A. V. Review of the current methods used to assess the values of coefficients, sensitivity, and adequacy of simulation models of aquatic ecosystems. *Water Resources.* 2015;42(4):477–499. doi: 10.7868/S0321059615040124

Podgorny K. A. Mathematical model for studying the ecosystem of the Vistula Lagoon of the Baltic Sea. Part 1. Theoretical foundations and structure of the model, methodology for preparing initial data for performing calculations. Kaliningrad: AtlantNIRO Publ.; 2018. 271 p. (In Russ.)

Podgorny K. A. Mathematical modeling of freshwater ecosystems in non-stratified water bodies: algorithms and numerical methods. Rybinsk: Rybinskii dom pechati; 2003. 328 p. (In Russ.)

Rykov A. S. Search engine optimization. Methods of deformable configurations. Moscow: Fizmatlit; 1993. 216 p. (In Russ.)

Steenbeek J., Buszowski J., Chagaris D., Christensen V., Coll M., Fulton E. A., Katsanevakis S., Lewis K. A., Mazaris A. D., Macias D., de Mutsert K., Oldford G., Pennino M. G., Piroddi C., Romagnoni G., Serpetti N., Shin Y.-J., Spence M. A., Stelzenmüller V. Making spatial-temporal marine ecosystem modelling better – a perspective. *Environ. Model. Softw.* 2021;145:105209. doi: 10.1016/j.envsoft.2021.105209.

Subbey S. Parameter estimation in stock assessment modelling: caveats with gradient-based algorithms. *ICES Journal of Marine Science.* 2018;75: 1553–1559. doi: 10.1093/icesjms/fsy044.

Theil H. Applied economic forecasting. Amsterdam: North-Holland; 1971. 474 p.

Törn A., Zilinskas A. Global optimization. Lectures notes in computer science. Berlin: Springer-Verlag; 1989. Vol. 350. 260 p.

Witek Z., Zalewski M., Wielgat-Rychert M. Nutrient stocks and fluxes in the Vistula lagoon at the end of the twentieth century. Slupsk-Gdynia; 2010. 186 p.

*Поступила в редакцию / received: 13.12.2023; принята к публикации / accepted: 19.03.2024.
Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов / The authors declare no conflict of interest.*

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:

Подгорный Константин Алексеевич

канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник лаборатории лиманов Балтийского моря, лаборатории экологии и оценки запасов промысловых популяций

e-mail: kapborok@mail.ru

Дмитриева Ольга Александровна

канд. биол. наук, старший научный сотрудник лаборатории гидробиологии «АтлантНИРО», научный сотрудник лаборатории морской экологии ИО РАН (Атлантическое отделение)

e-mail: phytob@yandex.ru

Семенова Анна Сергеевна

канд. биол. наук, старший научный сотрудник лаборатории гидробиологии «АтлантНИРО», старший научный сотрудник лаборатории экологии водных беспозвоночных ИБВВ РАН

e-mail: a.s.semenowa@mail.ru

CONTRIBUTORS:

Podgornyi, Konstantin

Cand. Sci. (Phys.-Math.), Senior Researcher

Dmitrieva, Olga

Cand. Sci. (Biol.), Senior Researcher, "AtlantNIRO"; Researcher, IO RAS (Atlantic Branch)

Semenova, Anna

Cand. Sci. (Biol.), Senior Researcher