ГРУППОВОЙ АНАЛИЗ В ЭТАПАХ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ГИДРОБИОХИМИЧЕСКОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ ВЕЩЕСТВ ПРЕСНОВОДНЫХ ЭКОСИСТЕМ

В.Ю. Агейков

Кратко изложены основные результаты применения методов группового анализа в математическом моделировании гидробиохимической трансформации веществ пресноводных экосистем. Использованы модели, показывающие практически весь диапазон такого применения в рамках систем обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка.

1 Первый этап. Создание математических моделей

Определенная обособленность и изолированность пресноводных экосистем от их экологического окружения дает возможность рассматривать их как биологические реакторы с заданным гидродинамическим режимом и четко определенным набором входов (значения которых характеризуются внешними параметрами) и выходов. При этом биологическая составляющая определяется совокупностью продукционно-деструкционных процессов, структурой и скоростями трансформации органических и минеральных веществ в ходе биотического круговорота.

1.1 Модель реки

Модель качества воды в реке [8, 13] воспроизводит пространственное (по *x*) распределение двадцати видов химических соединений: $БПК_5$, дефицита O_2, взвеси, ХПК, NH_4, NO_2, NO_3, СПАВ, нефтепродуктов, фенолов, гексохлорана, Cl, сульфатов, Mg, Ca, линдана, Fe, Cu, Pb, фосфатов, для заданных периодов года:

$$E\omega \frac{d^2C_i}{dx^2} = \frac{d(QC_i)}{dx} - \omega H_i - g_i\ .$$

Характеристики неконсервативности рассматриваемых соединений H_i есть некие линейные функции, зависимые от концентраций веществ C_i, при этом полный набор коэффициентов для этой системы есть: ω, J, B, E, Q, K_i, g_i и P_i^j, где i — соединения модели, а j — некоторые трансформирующиеся в i.

Дифференциальные уравнения второго порядка модели реки, если они хотя бы линеаризуемы, образуют алгебру Ли размерности не выше восьми [4, 6]. Далее задача для следующего этапа сводится к нахождению параметрических групп преобразований соответствующих размерностей алгебр Ли для системы из этих уравнений. Чтобы не решать эту сложную задачу, было принято решение о введении приемлемых ограничений для модели с целью получения более простых формул в результате решения дифференциальных уравнений. Для этого были введены следующие граничные условия:

$$\omega(x^l) = \omega^l,\quad C_i(x^0) = C_i^0,\quad \frac{dC_i(x^l)}{dx} = 0\ ,$$

где x^0 — координата начального створа, а x^l — замыкающего створа.

Дифференциальные уравнения модели реки после введения ограничений:

$$\frac{d(QC_i)}{dx} = \omega H_i + g_i\ . \qquad (1)$$

Вместо нахождения операторов допускаемых групп, редуцирующих порядок уравнений, из приемлемых граничных условий имеем подобный редукции результат.

1.2 Модель озера

Эта аналитическая модель выводится из простейшей зависимости Вольтерра "водоросли – органика – фосфор" [2] и упрощается до следующего вида [1]:

$$\begin{aligned} \frac{dz}{dt} &= \delta y(t-\tau_1) - \gamma z\ ; \\ \frac{dy}{dt} &= -\delta y(t-\tau_2) + \gamma z\ , \end{aligned} \qquad (2)$$

где t — время; z и y — концентрации: органического вещества и минерального биогенного вещества (в данном случае — фосфора), при этом полный набор коэффициентов для этой системы есть: δ, γ, τ_1 и τ_2.

Общий вид записи дифференциальных уравнений модели озера позволяет надеяться на существование для этой системы полного комплекта (не менее двух) разрешимых групп Ли. Это возможно только в том случае, если допустить некоторое отступление от первоначальной записи коэффициентов модели, то есть вместо них использовать новые γ', δ', τ_1' и τ_2', зависимые от прежних, вид зависимостей новых коэффициентов и физические размерности будут уточняться. Статус модели как аналитической относительно легко позволяет сделать такое допущение и рассмотреть этот частный случай на следующем этапе математического моделирования.

Таким образом, из множества возможных выбирается именно та модель озера, для которой возможно вычисление разрешимых групп Ли, необходимых для успешной редукции и решения уравнений.

1.3 Модель водохранилища

Следующая система дифференциальных уравнений описывает самые общие черты динамики экосистемы, взаимодействие популяций и биохимическую трансформацию веществ, с учетом балансов вещества и воды, изменение содержания веществ в пресной воде с течением времени *t*. Имитационная модель [7, 9, 12] имеет следующие двадцать три зависимые переменные C_i — соединения N: биологические — в биомассах гетеротрофных бактерий BN, фитопланктон FN, простейшие PRN, зоопланктон ZON; химические — растворенный органический DON, аммонийный NH4, нитритный NO2, нитратный NO3, детритный ND; а также соединения P: биологические — в биомассах гетеротрофных бактерий BP, фитопланктон FP, простейшие PRP, зоопланктон ZOP; химические — растворенный органический DOP, минеральный DIP, детритный PD; растворенный кислород O2; переменные трансформации донных отложений — соединения N: органика CBN, интерстициальный NB, сорбированный на твердой фазе NS; а также соединения P: органика CBP, интерстициальный PB, сорбированный на твердой фазе PS:

$$\frac{d(WC_i)}{dt} = WR_i + q_i \,. \tag{3}$$

Где R_i — скорости трансформации веществ, учитывающие химическую и биологическую кинетику, они описываются полуэмпирическими средствами формальной химической, ферментативной, микробиологической кинетики и трофодинамики; q_i — алгебраическая сумма источников и стоков, которая учитывает внешний обмен, включающий в себя учет гидрологических и гидродинамических процессов, связанных с поступлением и выносом веществ, обменные процессы в пограничном слое "воздух–вода", обменные процессы в системе "донные отложения–вода". При этом полный набор основных коэффициентов для этой системы: ζ_k^j, K_i^l, a_m^k, v_m^k, C_i^+, Q_+, Q_-, g_i, L, Ω, K_{tur}, V, H, V_{sed}, K_{tra}^{N}, ν, K_{tra}^{P}, α, σ, L_1, K_{min}, γ_{N}; γ_{P}, K_n^{sto}, K_{pho}, K_{oxi}, C_{0oxi}, J_{upt}, K_U^k, где i — соединения модели, а l — некоторые трансформирующиеся соединения в отдельные i, и в частности: k — гидробионты, а j — потребляемые ими формы N и P, другие индексы: n=1÷8, m=1÷2.

Анализ развёрнутой записи системы дифференциальных уравнений (3) показывает сходство общего вида отдельных из них — отличие только в химическом элементе. Далее о том, как можно получить редуцирование (3) в соответствии с теоремой о редукции не математическими средствами.

Известно, что биомасса гидробионтов водной экосистемы складывается из потребленных питательных веществ. Их относительное содержание в клетках выдержано в определенных пропорциях и поэтому рассматривать по отдельности биогенные вещества гидробионтов не имеет смысла. После отмирания клеток планктона образуется детрит (взвешенный и растворенный). Только после этой стадии — после перехода веществ в минеральные соединения, имеет смысл рассматривать биогенные вещества по отдельности.

Таким образом, можно ввести упрощение при использовании дифференциальных уравнений (3) в качестве модели водной экосистемы. Для всех уравнений, за исключением описывающих минеральные формы N и P, следует использовать одинаковые значения коэффициентов для аналогичных компонентов N и P.

В реальности пропорции содержания биогенных веществ в клетках могут изменяться с течением времени, но для практических расчётов эти кривые изменения пропорций веществ неизвестны. Эта проблема преодолевается тем, что и в практических расчётах для выявления содержания биогенных веществ в неминеральных соединениях используется гипотеза о том, что стехиометрические отношения концентраций C, N и P в компонентах экосистемы постоянны: $C:N:P = 106:16:1$. Данные измерений также приводятся в соответствие относительно сравниваемых модельных расчетов через использование постоянной величины в виде этого соотношения. Это позволяет дополнительно упростить систему дифференциальных уравнений (3), используемую в качестве модели водохранилища.

Отмеченные выше упрощения при использовании дифференциальных уравнений (3) приводят к отличию их правых частей для BN, FN, PRN, ZON, DON, ND и CBN от своих аналогов для P на постоянную величину $K_{N/P}$ = N/P. Тогда, в соответствии с теоремой о редукции можно говорить о существовании групп по перечисленным переменным с операторами вида $\partial/\partial C_N$, и для расчета в водной среде перечисленных компонентов можно использовать формулу вида: $C_N = K_{N/P}C_P$, где C_N и C_P — обозначают компоненты модели, представляющие соответственно части N и P одного и того же неминерального соединения. Это позволяет произвести редукцию системы дифференциальных уравнений модели экосистемы водохранилища. Легко проверить, что при этом закон сохранения масс для внутреннего биотического круговорота не нарушается.

1.4 Вывод для первого этапа

В итоге видно, что групповой анализ на этапе создания моделей используется минимально — только в качестве подсказки направления, по которому производится поиск нематематических резервов с целью редукции. То есть модели подвергаются изменениям не из-за каких-то уже существующих особенностей их систем дифференциальных уравнений, а из-за вводимых по тем или иным соображениям ограничений (модель реки), допущений (модель озера) и упрощений (модель водохранилища).

2 Второй этап. Исследование математических задач

В практике математического моделирования редки случаи получения точных решений для нелинейных зависимостей и отсутствует традиция обоснования выбора метода решения, поэтому чаще всего для решения систем дифференциальных уравнений применяются численные методы. При этом для обоснования метода решения необходимо исследовать систему дифференциальных уравнений на наличие фундаментальной системы решений, так что задача построения общего решения сводится к нахождению конечного числа частных решений. Этот вопрос не имеет отношения к допускаемой группе, но решается также при помощи методов группового анализа [3].

2.1 Модель реки

Методы группового анализа путем решения уравнений, определяющих группу, позволяют получать точные решения для некоторых нелинейных задач. Для случая неоднородных обыкновенных дифференциальных уравнений модели качества воды в реке, имеющих общий вид $C_i' = p(x)\cdot C_i + q(x)$, достаточно использовать готовые методы решения, которые выведены для них ранее Софусом Ли, откуда известен оператор разрешимой группы [4, 6]: $e^{\int p(x)dx}\partial/\partial y$.

Вопрос о существовании фундаментальной системы решений решается положительно, так как для единой системы модели реки (1), для каждого из дифференциальных уравнений с двумя решениями (общим и частным), можно записать всего один оператор при x^0. Откуда, из нестрогого неравенства произведения числа уравнений и количества их решений, в сравнении с количеством операторов при коэффициентах с участием x, следует выполнение условий теоремы о существовании фундаментальной системы решений [3]. Связь компонентов модели реки однонаправлена, поэтому простой подстановкой одних определяются другие решения.

2.2 Модель озера

Прежде рассмотрения проблемы о разрешимых группах, увязанной с особым видом коэффициентов (см. первый этап), рассмотрим вопрос о наличии фундаментальной системы решений [3] для уравнений озера.

Системе (2) соответствуют операторы при t^0 и при t^1, которые выводятся из конкретных систем дифференциальных уравнений по правилам теоремы о наличии фундаментальной системы решений. Критерий проверки когда есть два оператора — скобка Ли, но результат, который следует ожидать при выполнении условий теоремы должен быть линейной комбинацией с некими постоянными коэффициентами — не выполняется [1].

Далее находим новые γ', δ', τ_1' и τ_2'.

Для этого решается задача нахождения разрешимой группы для системы уравнений озера в виде операторов групп. Это возможно при использовании следующей замены [1]:

$$\delta = \left(\frac{\gamma'}{\tau_2' - \tau_1'}\right)^2 \cdot \delta',$$

$$\gamma = \frac{\gamma'}{\tau_2' - \tau_1'},$$

$$\tau_2 - \tau_1 = \frac{\tau_2' - \tau_1'}{\gamma'}.$$

В результате получены две разрешимые группы, при условии отношения $\tau_1 \neq \tau_2$ [1]. При этом новые коэффициенты γ' и δ' становятся безразмерными, тогда как прежние были, если использовать систему СИ, соответственно 1/с и 1/с^2. Случай отношения $\tau_1 = \tau_2$ не используется, так как масса не может быть отрицательной, а случай содержания в воде нулевых масс органических и минеральных веществ в природных условиях нашей планеты практически недостижим.

Результат вычисления скобки Ли между операторами разрешимых групп указывает на приоритетность использования в первую очередь одного из них. На основе найденных групп с заданными операторами, в установленном порядке очерёдности применения групп, через расчёты инвариантов и замены переменных, необходимых для спрямления зависимых координат *y* и *z*, выводятся расчётные формулы модели озера.

Отсутствие фундаментальной системы решений показывает, что для определённой части решения следует использовать численный расчёт — это численное интегрирование для стандартной функции ошибок. Таким образом, решается проблема получения конкретных расчётных формул для модели озера, в отличие от полностью численного подхода для получения решения.

2.3 Модель водохранилища

Исследуется система дифференциальных уравнений упрощенной модели водохранилища — с одним гидробионтом [9]. В модели берётся простейший случай коррекции фитопланктона на условия освещенности.

Выполняя условия теоремы о фундаментальной системе решений, после выведения из системы дифференциальных уравнений редуцированных компонентов и компонента O2 (непосредственно не влияет на другие), на основе формул (3) получаются три оператора при перечисленных ниже коэффициентах соответственно:

$$\left(N_0 + \left(Q_+ - Q_-\right) t\right)^{-2},$$

$$\left(N_0 + \left(Q_+ - Q_-\right) t\right)^{-1},$$

$$\left(N_0 + \left(Q_+ - Q_-\right) t\right)^{0}.$$

Далее вычисляются скобки Ли для полученных операторов с целью установления их принадлежности трехмерной алгебре Ли. При этом не обязательно вычислять все возможные варианты, но достаточно остановиться на первом случае невыполнения критерия. Только для первых двух операторов вычисление соответствует критерию, но для остальных не так, начиная со скобки Ли между первым и третьим, или между вторым и третьим операторами. Это означает, что для дифференциальных уравнений модели водохранилища не существует фундаментальной системы решений.

Находить разрешимые группы аналогично модели озера не имеет смысла, так как затраты на аналитические вычисления, ввиду сильно нелинейных связей, были бы несоизмеримо велики по сравнению с результатами. Таким образом, можно сделать вывод о необходимости применения численных методов для решения системы дифференциальных уравнений модели водохранилища.

Увязать численные методы и параметрические преобразования в единое целое позволяет ряд Ли, как один из способов решения дифференциальных уравнений, имеющий свойства параметрического преобразования переводящего одни решения в другие [5].

2.4 Вывод для второго этапа

На этапе выбора метода получения решения для рассматриваемых математических моделей относительно просто использовать критерий о фундаментальной системе решений, но сложнее найти разрешимые группы даже для простой модели с перекрёстными членами. В отличие от рекомендательно-указующей функции на первом, на втором этапе математического моделирования методы группового анализа несут объективную информацию и приводят к конкретным формульным преобразованиям, необходимым для решения систем дифференциальных уравнений.

3 Третий этап. Согласование наблюдений и расчётов

Для третьего этапа математического моделирования особенно важным является решение вопроса об идентификации модели. При имитационном моделировании реальных водных экосистем обычно существует дефицит информации о влиянии параметров на поведение решения. Такая информация необходима для организации рациональной процедуры оптимизации по заданному критерию. Эта проблема может быть решена удовлетворительно путем выявления тенденций в изменении поведения фазовых координат при изменении параметров.

3.1 Модель реки

Для решения задачи идентификации модели рассматриваются данные измерений и расчётные значения $C_i(x)$ для конкретных значений x. Это последнее условие не препятствует тому, чтобы рассматривать точное решение системы дифференциальных уравнений модели реки (1) в качестве набора параметрических преобразований переводящих одни решения в другие [5]. Они удовлетворяют всем аксиомам не только для многопараметрических, но и иногда для однопараметрических преобразований [3, 4].

Точные решения рассматриваемой модели можно переставить в виде формул содержащих в качестве множителей при C_i^0 некие обобщённые коэффициенты, которые зависят от модельных коэффициентов, начального значения x_0 и фиксированного x, а также имеющих аддитивный обобщённый член. С целью придания компактности и наглядности запишем преобразованные решения $C_i(x)$ используя только символические обозначения (явно вписываем модельные коэффициенты, влияющие только на растяжение-сжатие или только на сдвиг):

$$C_i = a_i \cdot C_i^0 + b_i (g_i)$$

$$C_{БПК} = a_{БПК} \cdot C_{БПК}^0 + b_{БПК} (g_{БПК})$$

$$C_{ХПК} = a_{ХПК} \cdot C_{ХПК}^0 + b_{ХПК} (g_{ХПК})$$

$$C_{NH4} = a_{NH4} \cdot C_{NH4}^0 + b_{NH4} (P_{NH4}^{ХПК}, K_{ХПК}) \cdot C_{ХПК}^0 + c_{NH4} (P_{NH4}^{ХПК}, g_{NH4}, g_{ХПК}, K_{ХПК})$$

$$C_{Фосфаты} = a_{Фосфаты} \cdot C_{Фосфаты}^0 + b_{Фосфаты} (P_{Фосфаты}^{ХПК}, K_{ХПК}) \cdot C_{ХПК}^0 + c_{Фосфаты} (P_{Фосфаты}^{ХПК}, g_{Фосфаты}, g_{ХПК}, K_{ХПК})$$

$$C_{NO2} = a_{NO2} \cdot C_{NO2}^0 + b_{NO2} (K_{NH4}) \cdot C_{NH4}^0 + c_{NO2} (P_{NH4}^{ХПК}, K_{ХПК}, K_{NH4}) \cdot C_{ХПК}^0 + d_{NO2} (P_{NH4}^{ХПК}, g_{NO2}, g_{ХПК}, K_{ХПК}, g_{NH4}, K_{NH4})$$

$$C_{NO3} = a_{NO3} \cdot C_{NO3}^0 + b_{NO3} (K_{NO2}) \cdot C_{NO2}^0 + c_{NO3} (K_{NH4}, K_{NO2}) \cdot C_{NH4}^0 + d_{NO3} (P_{NH4}^{ХПК}, K_{ХПК}, K_{NH4}, K_{NO2}) \cdot C_{ХПК}^0 + e_{NO3} (P_{NH4}^{ХПК}, g_{NO3}, g_{ХПК}, K_{ХПК}, g_{NH4}, K_{NH4}, g_{NO2}, K_{NO2})$$

$$C_{Деф.O_2} = a_{Деф.O_2} \cdot C_{Деф.O_2}^0 + b_{Деф.O_2} (P_{NO3}^{NO2}, K_{NO2}) \cdot C_{NO2}^0 + c_{Деф.O_2} (P_{NO2}^{NH4}, P_{NO3}^{NO2}, K_{NH4}, K_{NO2}) \cdot C_{NH4}^0 + d_{Деф.O_2} (P_{NO2}^{NH4}, P_{NO3}^{NO2}, P_{NH4}^{ХПК}, K_{БПК}, K_{Взвесь}, K_{ХПК}, K_{NH4}, K_{NO2}) \cdot C_{ХПК}^0 + e_{Деф.O_2} (K_{БПК}, K_{Взвесь}) \cdot C_{БПК}^0 + f_{Деф.O_2} (P_{NO2}^{NH4}, P_{NO3}^{NO2}, P_{NH4}^{ХПК}, J, B, g_{Деф.O_2}, g_{БПК}, K_{БПК}, K_{Взвесь}, g_{ХПК}, K_{ХПК}, g_{NH4}, K_{NH4}, g_{NO2}, K_{NO2})$$

Представленные формулы показывают для расчёта каких $C_i(x)$ какие коэффициенты будут способны сдвинуть решение. Коэффициентов влияющих только на растяжение-сжатие здесь не выявлено, но остальные модельные коэффициенты (есть, но не записаны) одновременно способны сдвигать и растягивать-сжимать решение.

Для выявления модельных коэффициентов, которые наиболее влиятельны для сдвига и/или растяжения-сжатия решения запишем решения (1) как предыдущие, но через нулевой и первый члены ряда Ли [10, 11]:

$$C_i \approx a_i^{O^2} (K_i, \omega) \cdot C_i^0 + b_i^{O^2} (g_i)$$

$$C_{БПК} \approx a_{БПК}^{O^2} (K_{БПК}, K_{Взвесь}, \omega,) \cdot C_{БПК}^0 + b_{БПК}^{O^2} (g_{БПК})$$

$$C_{ХПК} \approx a^{O^2}_{ХПК}(K_{ХПК}, \omega) \cdot C^0_{ХПК} + b^{O^2}_{ХПК}(g_{ХПК}),$$

$$C_{NH4} \approx a^{O^2}_{NH4}(K_{NH4}) \cdot C^0_{NH4} + $$
$$+ b^{O^2}_{NH4}(P^{ХПК}_{NH4}, K_{ХПК}) \cdot C^0_{ХПК} + c^{O^2}_{NH4}(g_{NH4}),$$

$$C_{Фосфаты} \approx a^{O^2}_{Фосфаты}(K_{Фосфаты}) \cdot C^0_{Фосфаты} +$$
$$+ b^{O^2}_{Фосфаты}(P^{ХПК}_{Фосфаты}, K_{ХПК}) \cdot C^0_{ХПК} +$$
$$+ c^{O^2}_{Фосфаты}(g_{Фосфаты}),$$

$$C_{NO2} \approx a^{O^2}_{NO2}(K_{NO2}) \cdot C^0_{NO2} +$$
$$+ b^{O^2}_{NO2}(K_{NH4}) \cdot C^0_{NH4} + d^{O^2}_{NO2}(g_{NO2}),$$

$$C_{NO3} \approx a^{O^2}_{NO3}(K_{NO3}) \cdot C^0_{NO3} +$$
$$+ b^{O^2}_{NO3}(K_{NO2}) \cdot C^0_{NO2} + e^{O^2}_{NO3}(g_{NO3}),$$

$$C_{Деф.O_2} \approx a^{O^2}_{Деф.O_2}(K_{Деф.O_2}) \cdot C^0_{Деф.O_2} +$$
$$+ b^{O^2}_{Деф.O_2}(P^{NO2}_{NO3}, K_{NO2}) \cdot C^0_{NO2} +$$
$$+ c^{O^2}_{Деф.O_2}(P^{NH4}_{NO2}, K_{NH4}) \cdot C^0_{NH4} +$$
$$+ e^{O^2}_{Деф.O_2}(K_{БПК}) \cdot C^0_{БПК} +$$
$$+ f^{O^2}_{Деф.O_2}(t, B, g_{Деф.O_2}).$$

Здесь выявлены коэффициенты, важные только для растяжения-сжатия решения (см. коэффициенты при первом члене), а также представлены наиболее значимые коэффициенты для сдвига. Последующее увеличение членов ряда Ли добавляет коэффициенты для сдвига от тех уравнений, решения которых участвуют в расчёте, но только для растяжения-сжатия уже нет данных начиная со второго. По мере увеличения членов ряда Ли зависимости обобщённых коэффициентов стремятся к тем же, что и в точном решении.

Далее на основе нулевого, первого и второго членов ряда Ли в сравнении с прибавленным третьим установлено, что возникающие при этом дополнительные модельные коэффициенты влияют на сдвиг решения по цепочке зависимостей и после нулевого и первого членов ряда Ли вклад остальных коэффициентов уменьшается в соответствии с ростом порядка ошибки округления.

На практике было достаточно воспользоваться информацией о влиянии отдельных коэффициентов, которая известна от первых двух членов ряда Ли. Однонаправленная последовательность получения решений на фоне дисперсных данных [8, 13] позволила настраивать, ориентируясь лишь на критерий Тейла, коэффициенты K_i^0 на растяжение-сжатие. В точных формулах они же влияют на сдвиг, но, судя по двум первым членам ряда Ли, заметно меньше. Сдвиг использовался в случае с уравнением для расчёта C_{NO2}. Значения P_i^j оценивались в соответствии с реальными стехиометрическими соотношениями. Все остальные модельные коэффициенты были известны из других условий модели реки. Для настройки коэффициентов по критерию Тейла использовались перебор и нелинейный метод наименьших квадратов Маквардта.

3.2 Модель озера

Здесь почти всё аналогично 3.1: отличие в том, что несмотря на схожесть с формулами точного решения, имеем всё же их обозримость, ведь они включают составляющую, требующую численного расчёта.

Решение для модели озера (2), с заменой коэффициентов, можно рассматривать в качестве набора параметрических преобразований переводящих одни решения в другие [5]. Они удовлетворяют всем аксиомам для многопараметрических преобразований [3, 4].

Условно-точные решения модели озера можно представить в виде формул, содержащих в качестве множителей при зависимых переменных обобщённые коэффициенты, которые включают в себя в качестве аргументов модельные коэффициенты, начальное значение t_0 и фиксированное t, а также имеющих аддитивный обобщённый член. Запишем преобразованные решения, используя только символические обозначения:

$$z = a \cdot z_0 + b \cdot y_0 ,$$
$$y = c \cdot y_0 + d \cdot z_0 .$$

В этих формулах все модельные коэффициенты одновременно способны сдвигать и растягивать-сжимать решение.

Для выявления модельных коэффициентов, которые наиболее влиятельны для сдвига и/или растяжения-сжатия решения, запишем решения (2) как предыдущие, но через нулевой и первый члены ряда Ли [10, 11]:

$$z = \tilde{a} \cdot z_0 + \tilde{b}(K') \cdot y_0 + O^2 ,$$
$$y = \tilde{c}(K') \cdot y_0 + \tilde{d} \cdot z_0 + O^2 .$$

Здесь выявлен коэффициент δ' важный для растяжения-сжатия решения для *y* и сдвига для *z*. Далее, начиная со следующего члена ряда Ли, зависимости обобщённых коэффициентов становятся такими же, что и в полученном через группы решении. Это полностью соответствует закономерности появления коэффициентов выявленной в 3.1.

Дальнейшие эксперименты с моделью подтвердили правоту особенного влияния коэффициента δ' в сравнении с γ' и достаточность использования в этой связи нулевого и первого членов ряда Ли, для получения объективной информации о влиянии коэффициентов.

Далее была определена пара предпочтительных для настройки коэффициентов — τ_1' и τ_2'. Коэффициенты γ' и δ' безразмерные, поэтому их легко проигнорировать приравниванием к единице. Эта пара настраивается хуже в связи с особенностями поведения функции ошибок. Для настройки коэффициентов использовался метод Ньютона.

3.3 Модель водохранилища

Несмотря на отсутствие такого же решения, что и для предыдущих моделей, используя ряд Ли и запись на его основе параметрического преобразования [5] с обобщёнными коэффициентами, можно получить информацию о конкретных модельных коэффициентах наиболее влиятельных в смысле сдвига и/или растяжения-сжатия решения. Для этого используем выводы из 3.1 и 3.2 об информативности первых двух членов ряда Ли. Таким образом, для формул из (3), с учетом упрощения до одного FP, имеем [10, 11]:

$$\mathrm{FP} \approx A^{O^2}_{\mathrm{FP}} + Z^{O^2}_{\mathrm{FP}},$$

$$\mathrm{DOP} \approx A^{O^2}_{\mathrm{DOP}}\left(K^{\mathrm{DOP}}_{\mathrm{DIP}}\right)\mathrm{DOP}_0 + B^{O^2}_{\mathrm{DOP}}\left(K^{\mathrm{PD}}_{\mathrm{DOP}}\right)\mathrm{PD}_0 + C^{O^2}_{\mathrm{DOP}}\left(C^{+}_{\mathrm{DOP}}, g_{\mathrm{DOP}}, L\right) + Z^{O^2}_{\mathrm{DOP}},$$

$$\mathrm{PD} \approx A^{O^2}_{\mathrm{PD}}\left(K^{\mathrm{PD}}_{\mathrm{DOP}}, V_{sed}\right)\mathrm{PD}_0 + B^{O^2}_{\mathrm{PD}}\left(, C^{+}_{\mathrm{PD}}, g_{\mathrm{PD}}, K_{tur}, V\right) + Z^{O^2}_{\mathrm{PD}},$$

$$\mathrm{NH4} \approx A^{O^2}_{\mathrm{NH4}}\left(K^{\mathrm{NH4}}_{\mathrm{NO2}}, \nu\right)\mathrm{NH4}_0 + B^{O^2}_{\mathrm{NH4}}\left(K_{\mathrm{N/P}}, K^{\mathrm{DOP}}_{\mathrm{DIP}}\right)\mathrm{DOP}_0 + C^{O^2}_{\mathrm{NH4}}\cdot \mathrm{NB}_0 + D^{O^2}_{\mathrm{NH4}}\left(, C^{+}_{\mathrm{NH4}}, g_{\mathrm{NH4}}\right) + Z^{O^2}_{\mathrm{NH4}},$$

$$\mathrm{NO2} \approx A^{O^2}_{\mathrm{NO2}}\left(K^{\mathrm{NO2}}_{\mathrm{NO3}}\right)\mathrm{NO2}_0 + B^{O^2}_{\mathrm{NO2}}\left(K^{\mathrm{NH4}}_{\mathrm{NO2}}\right)\mathrm{NH4}_0 + C^{O^2}_{\mathrm{NO2}}\left(, C^{+}_{\mathrm{NO2}}, g_{\mathrm{NO2}}\right) + Z^{O^2}_{\mathrm{NO2}},$$

$$\mathrm{NO3} \approx A^{O^2}_{\mathrm{NO3}}\cdot \mathrm{NO3}_0 + B^{O^2}_{\mathrm{NO3}}\left(K^{\mathrm{NO2}}_{\mathrm{NO3}}\right)\mathrm{NO2}_0 + C^{O^2}_{\mathrm{NO3}}\left(, C^{+}_{\mathrm{NO3}}, g_{\mathrm{NO3}}\right) + Z^{O^2}_{\mathrm{NO3}},$$

$$\mathrm{DIP} \approx A^{O^2}_{\mathrm{DIP}}\left(\right)\mathrm{DIP}_0 + B^{O^2}_{\mathrm{DIP}}\left(K^{\mathrm{DOP}}_{\mathrm{DIP}}, \right)\mathrm{DOP}_0 + C^{O^2}_{\mathrm{DIP}}\cdot \mathrm{PB}_0 + D^{O^2}_{\mathrm{DIP}}\left(, C^{+}_{\mathrm{DIP}}, g_{\mathrm{DIP}}\right) + Z^{O^2}_{\mathrm{DIP}},$$

$$\mathrm{O2} \approx A^{O^2}_{\mathrm{O2}}\cdot \mathrm{O2}_0 + B^{O^2}_{\mathrm{O2}}\left(K^{\mathrm{NH4}}_{\mathrm{NO2}}, K^{sto}_2, \right)\mathrm{NH4}_0 + C^{O^2}_{\mathrm{O2}}\left(K^{\mathrm{NO2}}_{\mathrm{NO3}}, K^{sto}_3\right)\mathrm{NO2}_0 + D^{O^2}_{\mathrm{O2}}\left(K_{\mathrm{N/P}}, K^{sto}_8, K^{\mathrm{DON}}_{\mathrm{NH4}}\right)\mathrm{DOP}_0 + E^{O^2}_{\mathrm{O2}}\left(C^{+}_{\mathrm{O2}}, C_{0oxi}, J_{upt}\right) + Z^{O^2}_{\mathrm{O2}},$$

$$\mathrm{CBP} \approx A^{O^2}_{\mathrm{CBP}}\left(K_{min}\right)\mathrm{CBP}_0 + B^{O^2}_{\mathrm{CBP}}\left(V_{sed}, \alpha, \sigma, L_1\right)\mathrm{PD}_0 + C^{O^2}_{\mathrm{CBP}}\left(W_0, Q_+, Q_-, \Omega, K_{tur}, V, \alpha, \sigma, L_1\right)$$

$$\mathrm{NB} \approx A^{O^2}_{\mathrm{NB}}\cdot \mathrm{NB}_0 + B^{O^2}_{\mathrm{NB}}\left(K_{\mathrm{N/P}}, K_{min}\right)\mathrm{CBP}_0 + C^{O^2}_{\mathrm{NB}}\left(\right)\mathrm{NH4}_0.$$

$$\mathrm{PB} \approx A^{O^2}_{\mathrm{PB}}\cdot \mathrm{PB}_0 + B^{O^2}_{\mathrm{PB}}\left(K_{min}\right)\mathrm{CBP}_0 + C^{O^2}_{\mathrm{PB}}\left(\right)\mathrm{DIP}_0.$$

Как видно, здесь представлено приближённое решение, содержащее нелинейный обобщённый член *Z*, где невозможно линейно разделить начальные значения некоторых переменных модели (FP, NH4, NO2, NO3, DIP) друг от друга.

При втором порядке ошибки округления для нахождения только DOP, PD, O2, CBP, NB и PB можно рассмотреть варианты параметрических преобразований, дающие информацию о влиянии модельных коэффициентов на поведение решений. В случае FP, NH4, NO2, NO3 и DIP аналогичное возможно, если отбросить аддитивный член *Z*, тогда для FP есть только член *A* с концентрацией в притоке, но без начального значения.

Допустимость отделения члена *Z* для этой модели объективно подтверждается критериями Тейла. В итоге, игнорируя член *Z*, можно выделить модельные коэффициенты наиболее важные для растяжения-сжатия и сдвига решения. Как и в предыдущих моделях начиная с третьего по порядку члена ряда Ли имеем выделение коэффициентов наиболее важных только для сдвига решения.

В модели с изъятым фитопланктоном узким местом для получения точного (как в модели реки) или почти точного (как в модели озера) решения являются пары компонентов NH4 – NB и DIP – PB. Результат поиска фундаментальной системы решений почти такой же, как и в 2.3. Искать виды записи независимых коэффициентов, для которых возможно существование разрешимых групп, не имеет смысла, так как рассматриваемая подмодель необходима лишь для получения информации в пользу модели с фитопланктоном, кроме того, что само по себе изъятие компонента FP не скомпенсировано никакими обоснованными добавлениями членов с участием t и некоторых периодов времени, связанных с процессом жизнедеятельности фитопланктона, как в модели озера [1], и является исключительно математической процедурой.

Почти все коэффициенты модели водохранилища были известны заранее из аналогичных исследований, поэтому происходила их некоторая корректировка. Выводы о влиянии коэффициентов на поведение решения позволили вести настройку методом перебора визуально-субъективно (одновременное прочерчивание графиков на мониторе компьютера в процессе расчёта) и объективно по критерию Тейла. Предпочтение отдавалось коэффициентам, влияющим на растяжение-сжатие решения, как наиболее эффективных для изменения рисунка хода кривой. Для переменных NO3, O2, NB и PB был возможен только сдвиг.

3.4 Вывод для третьего этапа

Решение проблем идентификации, для приведения в соответствие по заданному критерию натурных и расчётных данных, с использованием метода группового анализа позволило глубже проанализировать зависимость уравнений от коэффициентов и получить, подобно выводу из второго этапа, объективную информацию. С другой стороны, подобно выводу из первого этапа, результаты анализа можно рассматривать как рекомендацию к действию, если не использовать другие, чаще стохастические, алгоритмы нахождения коэффициентов. Исполнение же рекомендаций методов группового анализа приводит, опять же, аналогично выводу из второго этапа, к конкретным формульным преобразованиям, необходимым для организации более рационального решения задачи идентификации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Агейков В.Ю. Методы группового анализа в применении к аналитическим моделям пресноводных экосистем // Ползуновский вестник. – 2002. – № 1 – С. 95-97.
2. Домбровский Ю.А. и др. Теоретические и прикладные аспекты моделирования первичной продуктивности водоемов / Ю.А. Домбровский, В.Г. Ильичев, В.В. Селютин, Ф.А. Сурков. – Ростов-на-Дону: Изд-во Ростовского университета, 1990. – 176 с.
3. Ибрагимов Н.Х. Азбука группового анализа. – М.: Знание, 1989. – 48 с.
4. Ибрагимов Н.Х. Опыт группового анализа обыкновенных дифференциальных уравнений. – М.: Знание, 1991. – 48 с.
5. Митропольский Ю.А., Лопатин А.К. Теоретико-групповой подход в асимптотических методах нелинейной механики. – Киев: Наукова думка, 1988. – 271 с.
6. Олвер П. Приложения групп Ли к дифференциальным уравнениям: Пер. с англ. – М.: Мир, 1989. – 639 с.
7. Цхай А.А., Агейков В.Ю. Математическое моделирование экосистемы проектируемого водохранилища // Прилож. компьютера в гидротехнике и охрана водных ресурсов (Варна, 11-16.09.90) // Тр. Межд. шк. – София: БАН, 1990. – С. 428-439.
8. Цхай А.А. и др. Оценка и прогноз качества воды в речных системах на основе ГИС “Гидромониторинг” / А.А. Цхай, В.Ю. Агейков, М.И. Евстратов, К.Б. Кошелев, С.М. Шелепов, С.Л. Широкова // Математич. проблемы экологии. – Новосибирск: ИМ СО РАН, 1994. – С. 57-64.
9. Цхай А.А., Агейков В.Ю. Математическое моделирование процессов трансформации соединений азота и фосфора и изменчивости кислородного режима в водохранилище // Водные ресурсы. – 1997. – № 6 – С. 718-728.
10. Rodriguez J. A MAPLE program for the generation of the Lie-series solution of systems of non-linear ordinary differential equations // Computer Physics Communications. – Jan. 1992, Vol. 67, Iss. 3. – PP. 537-542.
11. Pilipchuk V.N., Tan C.A. Non-linear system identification based on Lie series solutions // Mechanical Systems and Signal Processing. – Jan. 2005, Vol. 19, Iss. 1. – PP. 71-86.
12. Tskhai A.A., Ageikov V.Yu. Simulation of nutrient transformation in a reservoir ecosystem // Hydrological, Chemical and Biological Processes of Transformation and Transport of Contaminants in Aquatic Environments. – IAHS Publ., 1994. – № 219. – PP. 303-308.
13. Tskhai A.A. et al. Models for water monitoring and optimization of enterprise water protective activity in present-day conditions / A.A. Tskhai, V.Yu. Ageikov, K.B. Koshelev, M.A. Leites, T.V. Tskhai // International Congress "Water: Ecology and Technology". – Moscow, Sept. 6-9, 1994. – Vol. 4. – PP. 1090-1115.