

Федеральное государственное бюджетное научное учреждение
«Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики
Российской академии наук»

На правах рукописи

Гладских Дарья Сергеевна

Исследование термогидродинамических и биогеохимических процессов во внутреннем водоеме на основе модифицированных моделей турбулентного переноса

Специальность 25.00.29 – Физика атмосферы и гидросферы

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук

Троицкая Юлия Игоревна

Нижний Новгород – 2022

Содержание

Введение	4
Глава 1. Обзор современного состояния описания термогидродинамики и биохимии внутренних водоемов	13
1.1. Иерархия моделей термогидродинамики водоемов суши	13
1.2. Описание турбулентного перемешивания в озерах и водохранилищах	14
1.3. Ледовые характеристики водоемов суши и их исследование	19
1.4. Биогеохимические процессы во внутренних водоемах	21
1.5. Выводы по современному состоянию проблемы.	24
Глава 2. Исследование вертикальной термической структуры внутреннего водоема на примере Горьковского водохранилища	26
2.1. Краткое описание модели озера LAKE.....	26
2.2. Процедура задания скорости ветра как важнейшего фактора перемешивания	29
2.2.1. Использование данных глобального метеорологического реанализа.....	29
2.2.2. Восстановление поля скоростей ветра с помощью геофизической модельной функции SMOD5	30
2.2.3. Привлечение результатов расчетов, полученных с помощью атмосферных моделей .	32
2.3. Численное моделирование сезонных вариаций вертикальной термической структуры Горьковского водохранилища	34
2.4. Выводы по Главе 2.....	39
Глава 3. Модификация стандартного k-ε замыкания для описания турбулентности в стратифицированной жидкости и ее применение к моделированию термогидродинамики внутренних водоемов	41
3.1. Основные положения моделей турбулентности, учитывающих двустороннюю трансформацию кинетической и потенциальной энергий турбулентных пульсаций.	41
3.2. Процедура получения параметризации турбулентного числа Прандтля и модификация турбулентного замыкания.....	48
3.3. Оценка влияния параметризации на процессы перемешивания	54
3.4. Выводы по Главе 3.	57

Глава 4. Исследование сезонности ледяного покрова крупных озер и водохранилищ Русской равнины и его климатических трендов по данным спутников JASON-1,2,3, TOPEX/Poseidon и SARAL	59
4.1. Алгоритм выявления периодов ледостава и вскрытия льда из анализа яркостных температур	59
4.2. Сопоставление результатов расчетов ледовых характеристик крупнейших водоемов Русской равнины с натурными данными Российского Регистра Гидротехнических Сооружений и выявление климатических трендов.....	67
4.3. Выводы по Главе 4.....	72
 Глава 5. Разработка трехмерной численной модели биохимических процессов во внутренних водоемах	74
5.1. Краткие сведения о биогеохимии парниковых газов, их производстве и потреблении.	74
5.2. Описание механизмов генерации, переноса и стока примесей.	77
5.2.1. Трехмерная модель термогидродинамики замкнутого водоема	77
5.2.2. Общий вид уравнения переноса, диффузии и реакций.....	78
5.2.3. Описание газообмена	79
5.2.4. Описание реакций.....	81
5.3. Верификация модели на примере описания взаимодействия метана и кислорода.....	85
5.4. Выводы по Главе 5.....	97
 Заключение	99
Список литературы.....	100
Основные публикации автора по теме диссертации.....	113
Свидетельства о государственной регистрации.....	115
Приложение А. Геофизическая модельная функция CMOD5.....	116
Приложение Б. Оптимальный по Кунгу-Траубу метод восьмого порядка, свободный от производных.	118

Введение

Актуальность работы

Озера и водохранилища являются объектом исследования при решении широкого круга задач, и процессы, протекающие в них, представляют, с одной стороны, самостоятельный интерес в рамках гидрологии и экологии, а с другой – являются важным аспектом в глобальных задачах метеорологии и климатологии, таких, как изучение климата Земли и оценки его изменений. Вплоть до середины прошлого столетия лимнология (изучение озер) представляла собой сугубо описательную науку, и лишь во второй половине XX века произошел переход от описания отдельных характеристик водоемов суши к выяснению связей между элементами природных систем и исследованию механизмов, порождающих такие связи и возникающих в результате взаимодействий компонентов Земной системы на различных уровнях.

Наличие обратных связей – роль внутренних водоемов в изменении климата и реакция водных объектов на такие изменения – отмечено в ряде работ (Jacobs and Grondin, 1988; Tranvik et al., 2009; Адаменко, 1985; Астраханцев и др., 2003). Суточные колебания температуры поверхности воды обладают меньшей амплитудой по сравнению с сушей (Skowron and Piasecki, 2016), процессы выхолаживания и прогрева происходят медленнее, что приводит к возникновению бризовых циркуляций, определяющих погоду на прилегающих территориях. В регионах с большим количеством озер и водохранилищ наблюдается выраженное потепление климата. С точки зрения взаимодействия с атмосферой водоемы суши являются особым типом подстилающей поверхности, и в мезомасштабных моделях атмосферы критически важно корректное воспроизведение термогидродинамики озер и водохранилищ.

Также отмечается, что наличие озер приводит к сглаживанию сезонного хода температуры воздуха в регионах: минимум температуры выше летом, но ниже зимой, а максимум выше зимой, но ниже летом. Это обусловлено уже приведенным фактом меньшей амплитуды колебаний температуры поверхности. Данный эффект описан, к примеру, в работе (Scott and Huff, 1997) на примере Великих Американских озер и в работе (Samuelsson et al., 2010) для озер северной Европы.

Процессы, протекающие во внутренних водоемах, требуют учета и при разработке глобальных моделей (Ljungemyr et al., 1996; Tsuang et al., 2001). Помимо термогидродинамических характеристик, таких, как потоки тепла и влаги, в глобальных моделях необходима параметризация потоков биохимических веществ в атмосферу, среди которых особую роль играют растворенные газы, в частности, парниковые: метан и углекислый газ. Эти газы вносят вклад в увеличение парникового эффекта Земли и во многом определяют глобальный углеродный цикл (Zeli and Qianlai, 2015; Коротеев и др., 2009). В работе (Raymond

et al., 2013) скорость выбросов оценена как ~ 2.1 петаграмм углерода в год. Что касается метана, то, несмотря на его невысокую концентрацию в атмосфере, вклад метана в создание парникового эффекта (потенциал глобального потепления) составляет примерно 30% от величины, принятой для углекислого газа (Forster et al., 2007; Коротеев и др., 2009).

Таким образом, влияние озер на климат и климата на озера охватывает различные пространственные и временные масштабы: как сезонные и региональные, так и глобальные. Именно поэтому необходимо численное исследование термогидродинамики и биохимии водоемов суши как важнейшего компонента Земной системы.

Цели и задачи диссертационной работы

Основной целью настоящей работы является численное исследование и разработка корректного описания гидрологических, термогидродинамических и биогеохимических процессов водоемов суши путем реализации новых физико-математических моделей и модификации существующих.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

- теоретическое исследование основных физических процессов, формирующих гидрологические и биогеохимические характеристики водоемов; определение наиболее эффективных подходов и методов математического моделирования озер и водохранилищ;
- проверка гипотезы о влиянии плотностной стратификации и сдвига скорости на процессы турбулентного перемешивания и формирования вертикальной структуры течения водного объекта: численные эксперименты и вывод закономерностей;
- численное исследование вертикальной термической структуры типичного внутреннего водоема среднего размера на примере озерной части Горьковского водохранилища с применением одномерной модели LAKE, разработка и оценка применимости процедур задания скорости ветра, как ключевого фактора, инициирующего перемешивание;
- вывод, внедрение и верификация параметризации, позволяющей учитывать особенности мелкомасштабной турбулентности во внутреннем водоеме и снимающей ограничение на существование турбулентности при больших значениях градиентного числа Ричардсона, модификация стандартного двухпараметрического $k-\varepsilon$ замыкания с учетом предлагаемой параметризации, исследование влияния модификации на моделирование турбулентного переноса импульса, энергии, температуры и пассивных субстанций во внутренних водоемах;
- определение характеристик ледяного покрова крупных озер и водохранилищ на основе данных дистанционного зондирования;

- разработка трехмерной модели биогеохимических процессов во внутреннем водоеме, включающей описание генерации, переноса и стока различных субстанций, в т.ч. парниковых газов и растворенного и твердого углерода.

Положения, выносимые на защиту

1. Одномерная модель термогидродинамики замкнутого водоема достаточно точно воспроизводит эволюцию вертикальной термической структуры внутреннего водоема среднего размера на масштабе порядка сезона (весь период открытой воды) с учетом уточненного описания ветрового воздействия на процессы перемешивания и применением данных глобального метеорологического реанализа.
2. Применение предложенной, разработанной и реализованной модификации двухпараметрического $k-\varepsilon$ замыкания позволяет уточнить вклад сдвига скорости и стратификации в мелкомасштабную турбулентность внутреннего водоема и эффективно описывать турбулентный перенос импульса и скалярных субстанций через термоклин.
3. Ледовые характеристики крупных и средних озер и водохранилищ, а также временные рамки установления и вскрытия льда могут быть эффективно определены с использованием результатов анализа разностей яркостной температуры, полученных из данных дистанционного зондирования.
4. Предложенная, разработанная и реализованная трехмерная модель генерации, переноса и стока биогеохимических примесей в водоемах суши (дополняющая модель термогидродинамики замкнутого водного объекта) позволяет получить полные трехмерные поля концентраций растворенных в воде веществ и потоков в атмосферу.

Научная новизна

Научная новизна диссертационной работы заключается в следующем:

1. Разработан комплексный подход к численному исследованию гидрологических, термогидродинамических и биогеохимических характеристик внутреннего водоема, основанный на объединении существующих, модифицированных и разработанных методов и моделей;
2. Модернизирована стандартная $k-\varepsilon$ схема турбулентного перемешивания, что позволило учесть вклад в мелкомасштабную турбулентность внутреннего водоема стратификации и сдвига скорости;
3. Предложен метод, позволяющий провести анализ климатических трендов, связанных с сезонностью ледяного покрова водоемов Русской равнины, за последние 25 лет, и явным образом продемонстрировавший тенденцию к сокращению времени ледостава;

4. Разработана и создана трехмерная модель биогеохимических процессов внутреннего водоема, объединенная в программный комплекс с моделью термогидродинамики озера и позволяющая решать задачи диагностики и прогноза эмиссий парниковых газов и уточнения роли водоемов в изменении климата.

Научная и практическая значимость результатов

Полученные в работе результаты планируются к применению для дальнейшего изучения термогидродинамических и биогеохимических процессов во внутренних водоемах. Уточненный подход к описанию мелкомасштабной турбулентности может быть также применен к задачам, связанным с исследованиями турбулентности в океане и атмосфере. Разработанные методики задания скорости ветра на основе данных глобального реанализа и дистанционного зондирования представляют интерес для моделирования и прогнозирования процессов, связанных с взаимодействием атмосферы и гидросферы. Также в задачах численного исследования озер и водохранилищ на годовых и многолетних масштабах может эффективно применяться предложенный алгоритм определения ледовых характеристик. Разработанная автором модель биогеохимических процессов позволяет получить полные трехмерные поля концентраций растворенных в воде веществ, а также дать оценки как вертикальной, так и горизонтальной изменчивости потоков парниковых газов, что необходимо для параметризаций водоемов суши в глобальных моделях, направленных на исследование климата Земли и механизмов его формирования. Таким образом, научная и практическая значимость полученных результатов обусловлена возможностью их непосредственного использования для решения как фундаментальных, так прикладных задач гидрологии, экологии, и климатологии.

Достоверность полученных результатов

Достоверность результатов моделирования и численных экспериментов базируется на корректном применении математических методов и подтверждается согласованностью полученных результатов с известными аналитическими и экспериментальными данными, в т.ч. полученными при участии автора в ходе экспедиционных работ на полигоне Горьковского водохранилища. Физическая трактовка полученных результатов, находится в согласии с общепризнанными представлениями. Основные положения диссертации опубликованы в ведущих российских и зарубежных журналах, докладывались на международных и всероссийских конференциях и неоднократно обсуждались на семинарах в ИПФ РАН и НИВЦ МГУ.

Публикации по теме диссертации

По теме диссертации опубликовано **32** работы, в том числе **6** статей в рецензируемых журналах из списка ВАК, **10** статей в изданиях, индексируемых Web of Science и/или Scopus, **16** тезисов докладов на российских и международных конференциях. Получено **3** свидетельства регистрации интеллектуальной деятельности.

Личный вклад автора

Основные результаты диссертации получены автором лично либо при непосредственном участии: проведены и реализованы в программном коде модификации турбулентного замыкания, получены новые теоретические зависимости, разработаны и реализованы алгоритмы, сконструирован новый численный метод, поставлены и проведены численные эксперименты, разработана и программно реализована трехмерная модель биогеохимии водоема. Также автор принимал участие в экспедиционных работах, в ходе которых были получены натурные данные, использованные в настоящей диссертации.

Апробация работы

Диссертация выполнена в Институте прикладной физики РАН. Результаты диссертации были использованы в ходе исследовательских работ в рамках грантов РФФИ, РНФ, проектов в рамках Федеральных целевых программ Минобрнауки, грантов Президента Российской Федерации, проекта Фонда содействия инновациям.

Материалы диссертации были представлены в виде докладов на следующих конференциях:

- Всероссийская научная конференция «Проблемы экологии Волжского бассейна», ВГУВТ, Нижний Новгород, 2017, 2018;
- International Conference on Computer Simulation in Physics and beyond, NRU NSE, Moscow, 2017, 2018;
- Международная школа молодых ученых «Физическое и математическое моделирование процессов геосредах», ИПМех РАН, Москва, 2017, 2018, 2019, 2020;
- Всероссийская конференция «Гидрометеорология и экология: научные и образовательные достижения и перспективы развития», Санкт-Петербург, 2017;
- European Geosciences Union General Assembly, Вена, Австрия, 2018, 2019, 2020, 2021, 2022.
- Школа молодых ученых «Нелинейные волны», Нижний Новгород, 2018, 2020.
- III научная конференция молодых учёных «Комплексные исследования Мирового океана», Санкт-Петербург, 2018;

- 19-ая международная конференция "Потоки и структуры в жидкостях", ТОИ ДВО РАН, Владивосток, 2018;
- European Meteorological Society Annual Meeting, Копенгаген, Дания, 2019;
- Всероссийская конференция «Научные проблемы оздоровления российских рек и пути их решения», Нижний Новгород, 2019;
- International Conference and Early Career Scientists School on Environmental Observations, Modeling and Information Systems ENVIROMIS-2020, Институт мониторинга климатических и экологических систем СО РАН, Томск, 2020;
- Международная конференция по вычислительно-информационным технологиям для наук об окружающей среде CITES-2021, Москва, 2021.

Также результаты работы были неоднократно представлены на семинарах ИПФ РАН и НИВЦ МГУ.

Структура и объем диссертации

Работа состоит из **введения, пяти глав, заключения и списка литературы.**

Во **Введении** обосновывается актуальность работы, формулируются её цели и задачи, кратко излагается содержание диссертации.

В **Главе 1** приводится обзор современного состояния рассматриваемой проблемы исследования термогидродинамики и биогеохимии водоемов суши. В **разделе 1.1** приведена иерархия моделей описания термогидродинамических процессов, протекающих во внутренних водоемах, указаны основные преимущества и недостатки моделей различной пространственной детализации, а также основные сферы их применения. **Раздел 1.2** посвящен обзору подходов к описанию турбулентности в водных объектах с точки зрения детальности разрешения турбулентных пульсаций и их энергетического спектра; здесь же рассмотрены наиболее широко применяемые турбулентные замыкания: так называемые k -схемы, к которым относится модель k - ϵ , в основе которой лежат уравнения для кинетической энергии турбулентности (k) и скорости ее диссипации (ϵ); приведены обоснования необходимости модификации этой схемы для исследования особенностей мелкомасштабных процессов при больших значениях градиентного числа Ричардсона. В **разделе 1.3** представлены методики изучения ледового режима внутренних водоемов, среди которых наиболее популярными являются методы спутниковой альтиметрии и радиометрии. В **разделе 1.4** описаны существующие в настоящее время модели описания биогеохимических процессов в озерах и водохранилищах, подходы, используемые в этих моделях, их преимущества и недостатки. **Раздел 1.5** включает выводы по современному состоянию проблемы, обозначает наиболее актуальные и не решенные к настоящему времени задачи, которые и были рассмотрены автором в диссертационной работе.

Глава 2 посвящена численному исследованию эволюции вертикальной термической структуры замкнутого пресного водоема среднего размера на примере озерной части Горьковского водохранилища с применением одномерной модели LAKE. В **разделе 2.1** приводится краткое описание модели, обосновывается выбор объекта исследования, обозначаются основные проблемы, связанные с реалистичным заданием данных сопутствующей метеорологической обстановки и, в частности, скорости ветра. Решение этой проблемы предлагается в **разделе 2.2**: здесь представлены три методики процедуры задания скорости ветра: на основе комбинированного метода, совмещающего данные глобального реанализа и данные натурных измерений, с помощью данных дистанционного зондирования, с привлечением атмосферной модели. В **разделе 2.3** приведены результаты численного моделирования вертикального распределения температуры Горьковского водохранилища, сопоставление этих результатов с данными натурных измерений, сделаны выводы о применимости методики и перспективах ее совершенствования.

В **Главе 3** рассматривается задача корректного описания турбулентности в стратифицированной жидкости, и предложена модифицированная модель турбулентного переноса, сконструированная на основе $k-\varepsilon$ замыкания с привлечением моделей, учитывающих двустороннюю трансформацию кинетической и потенциальной энергии турбулентных пульсаций. Основные положения таких моделей приведены в **разделе 3.1**: рассмотрены модель нестационарных турбулентных течений в стратифицированной жидкости Л.А. Островского и Ю.И. Троицкой, построенная на решении уравнения для функции распределения вероятности значений гидрофизических полей, и эквивалентная ей модель С.С.Зилитинкевича, в основе которой лежат балансные уравнения для энергий и потоков. В **разделе 3.2** приведена процедура получения параметризации турбулентного числа Прандтля как функциональной зависимости от градиентного числа Ричардсона. Полученная зависимость позволила модифицировать $k-\varepsilon$ схему с целью учета вклада сдвига скорости и плотностной стратификации в турбулентность и снять ограничение на описание турбулентности при больших значениях градиентного числа Ричардсона. Численные эксперименты для оценки влияния параметризации на процессы перемешивания представлены в **разделе 3.3**. Подтверждена эффективность использования модифицированной схемы для описания переноса энергии, импульса и скалярных субстанций через термоклин во внутреннем водоеме.

Глава 4 посвящена исследованию сезонности ледяного покрова крупных озер и водохранилищ Русской равнины и климатических трендов по данным спутников JASON-1,2,3, TOPEX/Poseidon и SARAL. В **разделе 4.1** предложен и описан алгоритм выявления периодов ледостава и открытой воды из анализа яркостных температур, полученных по данным дистанционного зондирования. Эффективность алгоритма подтверждается в **разделе 4.2** путем

сопоставления результатов расчетов ледовых характеристик с натурными данными Российского Регистра Гидротехнических Сооружений. Показано наличие климатического тренда к более позднему замерзанию, более раннему вскрытию льда, и, тем самым, сокращению периода ледостава за последние 25 лет.

В **главе 5** представлена разработанная автором трехмерная модель генерации, переноса и стока биогеохимических примесей в водоемах суши, дополняющая модель термогидродинамики замкнутого водного объекта. В **разделе 5.1** приведены краткие сведения о биогеохимии парниковых газов: метана и углекислого газа, их производстве и потреблении. Эти газы представляют наибольший интерес для исследования, ввиду их вклада в изменение климата Земли. Описаны основные механизмы образования и потребления метана, даны оценки эмиссий парниковых газов с пресноводных экосистем. **Раздел 5.2** дает представление об основных уравнениях для описания механизмов переноса, диффузии и взаимодействия биогеохимических субстанций и уравнениях термогидродинамики замкнутого водоема, которые объединены в программный комплекс. Приведены примеры реакций в формулировке кинетики Михаэлиса-Ментен – уравнения ферментативной кинетики, описывающего зависимость скорости реакции, катализируемой ферментом, от концентрации субстрата. Верификация разработанной модели описана в **разделе 5.3**: она проводилась на основе сопоставления с одномерной моделью LAKE 3.0, верифицированной на основе данных измерений, и учета физических эффектов, связанных с трехмерным описанием, используемым в предлагаемой автором модели. С помощью численной реализации классического лабораторного эксперимента Като-Филлипа, дополненной граничными условиями для растворенных газов, подтверждено, что в отсутствие эффектов, связанных с трехмерной циркуляцией, термогидродинамика и биогеохимия воспроизводятся в моделях схожим образом. Серия численных экспериментов по исследованию этих процессов в идеализированных водоемах конечного размера подтвердила, что трехмерное описание корректирует недостатки одномерного подхода, связанные с описанием вертикальной диффузии газов, генерации турбулентной кинетической энергии в термоклине (достаточной для того, чтобы коэффициент турбулентной диффузии заметно превышал молекулярный аналог) и эффектов, связанных с перераспределением массы и горизонтального градиента давления под влиянием ветрового нагона. В этой главе также приведены результаты численных экспериментов, направленных на исследование влияния различных конфигураций рельефа дна на распределение примесей в толще водоема.

В **Заключении** сформулированы основные результаты, полученные в диссертации, и обозначены возможные направления дальнейших исследований.

Общий объем диссертации составляет **120** страниц, включая **42** иллюстрации и **2** таблицы. **Список литературы** состоит из **173** источников.

Благодарности

Автор в первую очередь благодарит научного руководителя Ю.И.Троицкую за постоянное внимание к работе и обсуждения, способствовавшие формированию у автора критического и глубокого взгляда на собственные научные результаты. Важную роль в выборе автором тематики исследований сыграло сотрудничество с В.М. Степаненко, которому автор благодарен за многочисленные консультации по научным вопросам. Также автор глубоко признателен коллективу Отдела нелинейных геофизических процессов ИПФ РАН, в особенности, И.А.Соустовой и Д.А.Сергееву за плодотворную совместную работу. Автор выражает отдельную благодарность сотруднику НИВЦ МГУ и ИВМ РАН Е.В.Мортикову за сотрудничество, ценные замечания и всестороннюю поддержку в проводимых автором исследованиях.

Глава 1. Обзор современного состояния описания термогидродинамики и биохимии внутренних водоемов

1.1. Иерархия моделей термогидродинамики водоемов суши

К настоящему времени созданы математические модели различной пространственной размерности, позволяющие описывать термогидродинамические процессы во внутренних водоемах. Наиболее детальное описание дают трехмерные модели (см. (Abbasi et al., 2016; Blumberg and Mellor, 1987; Kelley et al., 1998; Дианский и др., 2016)), основой которых является осредненная по Рейнольдсу система уравнений термогидродинамики в приближении Буссинеска и гидростатики (Астраханцев и др., 2003). Их использование имеет смысл при наличии подробной информации об изучаемом водном объекте: пространственно-временной картине течений, данных о метеорологической обстановке в районе водоема с пространственным разрешением, учитывающим особенности его батиметрии и топографии прилегающей территории. Также подобные модели могут быть использованы для верификации моделей более низкой пространственной детализации в случаях, когда отсутствуют экспериментальные данные. В настоящей работе использовалась трехмерная гидростатическая модель озера, разработанная в НИВЦ МГУ на основе единого гидродинамического кода, объединяющего как RANS, так и DNS (Direct Numerical Simulation, прямое численное моделирование), LES (Large-Eddy Simulation, вихреразрешающее моделирование) подходы для расчета геофизических турбулентных течений при высоком пространственном и временном разрешении (см. (Mortikov, 2016; Mortikov et al., 2019; Гладских и др., 2021)).

Применение двумерных моделей озер имеет смысл только в специфичных задачах: например, математическое моделирование термобара (Зилитинкевич и Крейман, 1990; Цыденов и Старченко, 2013), описание подледной конвекции в весеннее время года (Pushistov and Ievlev, 2000).

В настоящее время для моделирования термогидродинамики и биогеохимии водоёмов суши широкое распространение получили одномерные (по вертикали) модели, которые являются вычислительно эффективными и могут быть использованы для расчёта на многолетних масштабах. Подобные модели также применяются для параметризации внутренних водных объектов в климатических моделях (Martynov et al., 2012; Mironov et al., 2010; Subin et al., 2012; Rontu et al., 2012). В то же время, при расчёте крупных озёр и водохранилищ, особенно обладающих сложной геометрией, эти модели не могут воспроизвести многие важные эффекты, связанные с горизонтальной неоднородностью. Особенно это становится важным для задач прогноза качества воды (в частности, сезонных “цветений” и эвтрофикации), а также инвентаризации и прогноза эмиссии парниковых газов с водохранилищ.

Таким образом, одномерные модели могут успешно применяться для не очень глубоких водоемов, и, в частности, для расчетов термического режима озер, где вариации гидрологических характеристик в различных точках по вертикали значительно превосходят вариации по горизонтали. При этом для учета всей совокупности атмосферных процессов, влияющих на термогидродинамику озер и водохранилищ, модели требуют корректных данных метеорологических условий, характеризующих изменение условий на верхней границе в течение всего периода расчета.

Основными типами одномерных моделей являются следующие: горизонтально-осредненные модели и модели пограничного слоя.

В первом случае используется осреднение трехмерных RANS (Reynolds-averaged Navier-Stokes) уравнений по горизонтальному сечению водоема, и его площадь явно входит в уравнения. Здесь возможен учет адвекции, примесей и импульса, но добавляются новые неизвестные характеристики, требующие описания в рамках модели, в частности, потоки субстанций на наклонном дне. В работе (Goudsmit et al., 2002) потоки полагаются заданными, а в (Fang and Stefan, 2009) рассчитываются с учетом теплопереноса в донных отложениях. Донный поток импульса также может быть рассчитан с использованием значения средней скорости на рассматриваемой глубине (Jöhnk, 2000) с помощью калибровочного коэффициента. К первому типу относятся модели, описанные в работах (Fang and Stefan, 2009; Jöhnk, 2000), и широко используемая в настоящей работе модель LAKE (Stepanenko et al., 2016).

В моделях пограничного слоя используются уравнения, полученные также из RANS, имеющие тип уравнений атмосферного или океанического пограничного слоя. Здесь предполагается условие горизонтальной однородности полей всех физических величин, что может выполняться только для крупных водоемах и вдали от берегов, где преобладает эффект наклонного дна. В отличие от уравнений атмосферного пограничного слоя, где на верхней границе задаются условия Дирихле, здесь используются условия Неймана. Донными потоками тепла и импульса в таких моделях зачастую пренебрегают. Наиболее известными примерами подобных моделей являются Flake (Mironov, 2008) и Hostetler model (Hostetler et al., 1993).

1.2. Описание турбулентного перемешивания в озерах и водохранилищах

Важнейшую роль в численном моделировании термогидродинамики и биогеохимии внутренних водоемов является корректное описание процессов турбулентного перемешивания. Мелкомасштабные процессы в озерах эффективно взаимодействуют между собой, обрушение и сдвиговая неустойчивость крупномасштабных течений, поверхностных и внутренних волн приводят к генерации мелкомасштабной турбулентности, а турбулентное перемешивание

может приводить к формированию тонкой структуры с областями резких градиентов гидрофизических величин (Монин и Озмидов, 1981).

В настоящее время существует три основных подхода к моделированию турбулентных течений в океане и внутренних водоемах: прямое численное моделирование уравнений Навье-Стокса, вихреразрешающее моделирование и использование осреднения по Рейнольдсу. В основе разделения лежит степень детальности разрешения турбулентных пульсаций и их энергетического спектра: на рисунке 1.1 показано, какая часть спектра разрешается явным образом в численном расчете, а какая учитывается с помощью приближенного моделирования.

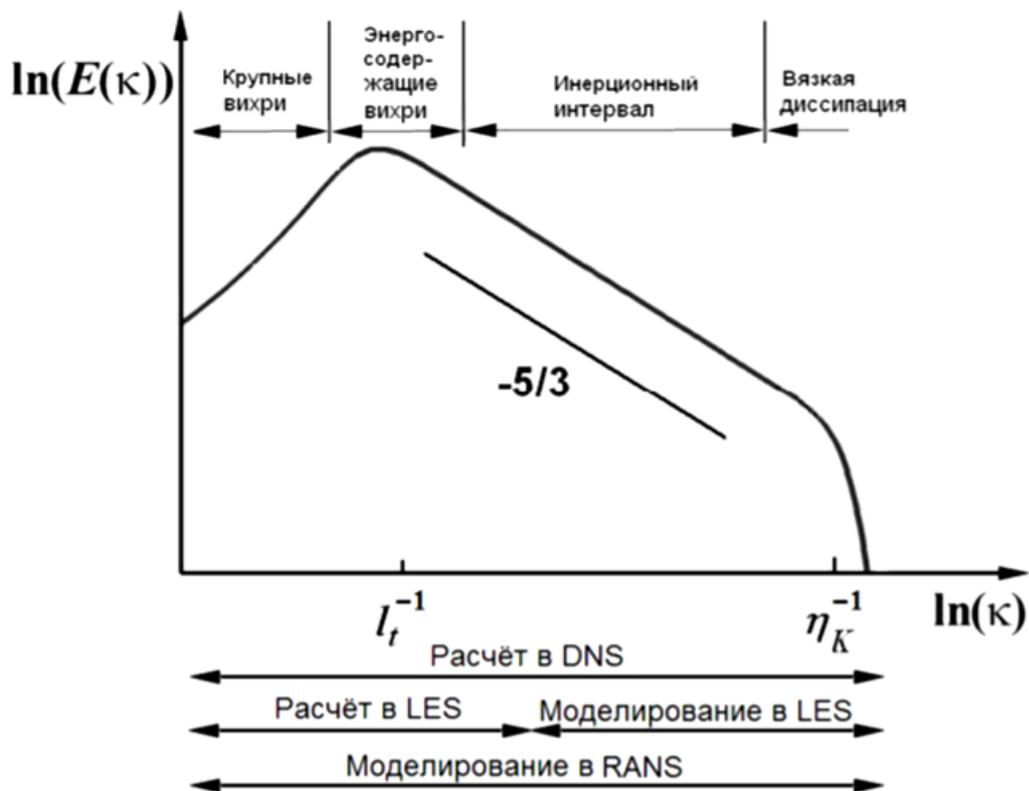


Рис. 1.1. Вычисляемая и моделируемая части энергетического спектра турбулентных пульсаций при использовании методов DNS, LES и RANS (Снегирёв, 2009).

Прямое численное моделирование (Direct Numerical Simulation, DNS) может рассматриваться как инструмент для детального изучения турбулентности во всем диапазоне ее масштабов. Поскольку разрыв между крупными и колмогоровскими масштабами увеличивается с ростом числа Рейнольдса потока, вычислительные затраты на выполнение прямого численного моделирования существенно зависят от Re : число необходимых расчётных точек в трехмерном пространстве с учетом продвижения по времени оказывается пропорциональным Re^3 , и вычислительные затраты растут быстрее, чем Re^3 (Fröhlich and Terzi, 2008). Таким образом, на данном этапе развития вычислительных ресурсов возможно прямое численное моделирование течений с числом Рейнольдса не выше 10^4 .

Второй подход – моделирование крупных вихрей (Large Eddy Simulation, LES) – использует более грубую сетку и основан на концепции «фильтрации» турбулентности: исходные уравнения Навье-Стокса фильтруются интегрированием по пространству с весовой функцией, в отфильтрованных уравнениях появляются неизвестные корреляции, отражающие вклад турбулентных движений с масштабами меньше размеров фильтра. Так производится разделение вихрей на «крупные» (больше некоторого размера) и «мелкие». Приближённое вычисление подсеточных корреляций с использованием отфильтрованных величин означает моделирование коротковолновой части спектра, а энергетический спектр скорости, полученной при численном решении, воспроизводит длинноволновую часть спектра, включая значительную часть инерционного интервала. Тем не менее, LES подход также обладает высокой расчетной стоимостью, что ограничивает его применение для описания процессов различного масштаба в окружающей среде.

Третий подход к моделированию турбулентности базируется на осреднённых по ансамблю реализаций случайных полей термогидродинамических величин RANS- уравнениях. Исходные уравнения осредняются по всему спектру пульсаций, и осредненные уравнения которые включают дополнительные неизвестные корреляции пульсирующих величин – напряжения Рейнольдса $\langle u'_i u'_j \rangle$ (u'_i есть турбулентные пульсации i -той компоненты вектора скорости, а угловые скобки означают осреднение). Для напряжений Рейнольдса также может быть выведено уравнение переноса, но при этом оно будет включать дополнительные неизвестные – напряжения Рейнольдса более высокого, например, третьего и т.д. порядков. Задача определения этих напряжений известна в моделировании турбулентности как проблема замыкания, для решения которой привлекаются модели турбулентности, которые выражают неизвестные корреляции через известные (точнее — искомые) осреднённые значения. Один из наиболее распространенных классов RANS-моделей турбулентности, применяемых в современной океанологии и лимнологии, – это двухпараметрические RANS модели, основанные на гипотезе, связывающей турбулентные потоки с градиентами средних величин (Монин и Яглом, 1965). Такие модели включают уравнения переноса для двух турбулентных параметров: первый – турбулентная кинетическая энергия k , а второй – например, скорость ε диссипации k , или произведение k на масштаб турбулентности, или частота турбулентных пульсаций ω . К таким моделям можно отнести так называемую k - ε схему (Mellor and Yamada, 1975; Лыкосов, 1992), в которой решаются уравнение для кинетической энергии турбулентности (k) и дополнительное уравнение для скорости ее диссипации (ε), и схожую с ней схему k - ω (Umlauf et al., 2003), где уравнение на диссипацию заменяется уравнением на частоту турбулентности.

При моделировании внутренних водоемов, особенностью которых является сезонная температурная стратификация, наличие сдвиговых течений за счет касательного напряжения

ветра (ветровой форсинг), а также сильное турбулентное перемешивание, обусловленное обрушением поверхностных волн, за последние 20 лет чаще всего используется k - ε модель. В этой модели для турбулентного напряжения применяется градиентная аппроксимация:

$$-\langle u'_i u'_j \rangle = K_m \left(\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \langle u_i'^2 \rangle. \quad (1.1)$$

Введение дополнительного уравнения для ε связано с тем, что в k модели с единственным уравнением для кинетической энергии турбулентных флуктуаций (см., например (Rodi, 1980)) в выражения для коэффициентов турбулентной вязкости K_m , турбулентной теплопроводности K_h , а также скорости диссипации ε входит неизвестная величина – внешний линейный масштаб турбулентности L . Так, согласно гипотезе Колмогорова-Прандтля (Монин и Яглом, 1965), $K_h = c_\mu \sqrt{k} L$, $\varepsilon = \frac{c k^{3/2}}{L}$, при этом определение L в случае сложных течений затруднительно. Решение уравнений в k - ε модели при больших числах Рейнольдса в условиях локальной изотропной турбулентности позволяет определить распределение линейных масштабов турбулентности $L = \frac{k^{3/2}}{\varepsilon}$.

Расчет крупномасштабных сдвиговых течений в стратифицированной жидкости и исследование особенностей мелкомасштабных процессов при больших числах Ричардсона требуют модификации k - ε модели. Особенностью мелкомасштабной турбулентности во внутренних водоемах является то, что она, как правило, находится под действием двух факторов – плотностной стратификации и сдвига скорости, что необходимо учитывать при построении ее статистической теории. Известно, что необходимым условием гидродинамической неустойчивости Майлса-Хорварда (Miles, 1961; Howard, 1961), полученном в линейном приближении является условие, что градиентное число Ричардсона $Ri = -g \frac{d\rho/\rho dz}{(dU_0/dz)^2}$ не превосходит критическое значение $Ri_{кр} = 1/4$. Для поддержания существующей турбулентности требуется более мягкое условие: в (Монин и Яглом, 1965) показано, что незатухающая турбулентность возможна при $Ri_f < Ri_{f,кр} < 1$, где $Ri_f = -g \frac{\langle \rho' u'_i \rangle}{\langle u'_i u'_j \rangle V_{0z}}$ – динамическое (или потоковое) число Ричардсона, характеризующее роль сил Архимеда и осредненного сдвигового движения в балансе турбулентной энергии. Здесь $\langle \rho' u'_i \rangle$ – поток массы, $\langle u'_i u'_j \rangle$ – поток импульса, V_{0z} – сдвиг скорости, и с учетом определения коэффициентов турбулентной вязкости и турбулентной диффузии это условие может быть записано как $Ri < Pr_T$ (*), где $Pr_T = K_m/K_h$ – турбулентное число Прандтля, равное отношению коэффициента турбулентной вязкости и турбулентной диффузии. Условие (*) является общим

следствием уравнения баланса турбулентной энергии, означающим, что генерация энергии турбулентности за счет сдвига

Важно отметить, что при расчете динамики температурной стратификации в процессе турбулентного перемешивания в рамках стандартной k - ε модели полагается, что Pr_T постоянно, а стратификация и сдвиговые течения учитываются обычно двумя способами. В первом случае члены, описывающие силы плавучести, включаются в уравнения переноса для k и ε с рядом предположений, учитывающих, например, анизотропию сил плавучести. Второй способ учета сил связан с введением дополнительных алгебраических соотношений для турбулентных напряжений и потоков различных скалярных величин, например, тепла, что характерно для температурно-стратифицированных водоемов. Эти модификации приводят к существенному усложнению схем замыкания турбулентных напряжений Рейнольдса и появлению дополнительных эмпирических констант (Rodi, 1980).

Однако есть основания полагать, что турбулентное число Прандтля Pr_T не остается постоянным, и при изменении градиентного числа Ричардсона Ri может быть настолько велико, что динамическое число Ричардсона Ri_f остается меньше критического значения, и турбулентность существует (Монин и Яглом, 1965). Измерения показывают, что и при $Ri > Pr_T$ в пикноклине существует турбулентность, имеющая перемежающийся характер (в виде отдельных беспорядочно расположенных пятен) (Kondo and Curry, 2000; Strang and Fernando, 2001; Stretch et al., 2001). Она реализует эффективный перенос тепла, соли, питательных и загрязняющих веществ через скачок плотности, и перенос этот иногда во много раз более существенный, чем за счет молекулярной теплопроводности и диффузии. В целом, проблема учета зависимости уровня мелкомасштабной турбулентности от сдвига и стратификации при больших значениях градиентного числа Ричардсона остается актуальной и активно развивающейся областью лимнологии и океанологии.

Вопрос о поддержании турбулентности в стратифицированных сдвиговых течениях при больших значениях градиентного числа Ричардсона и описывающие его полуэмпирические модели замыкания обсуждались рядом авторов. Так, в схеме 2.5 порядка замыкания, описанной в (Mellor and Yamada, 1982), где для нахождения коэффициентов турбулентной вязкости и диффузии необходимо решить уравнения для кинетической энергии турбулентности и макромасштаба турбулентности, турбулентное число Прандтля находится из отношения функций устойчивости для вязкости и диффузии и не является константой, а зависит от стратификации, но при этом не является неограниченным, что, как следствие, накладывает ограничения и на описание турбулентности. Также ограниченным, но не постоянным является число турбулентное число Прандтля в замыкании, описанном в (Kantha and Clayson, 1994).

В качестве решения задачи корректного описания турбулентности в устойчиво стратифицированном потоке, типичном для внутреннего водоема, может быть предложена

модификация классического k - ε замыкания с учетом параметризации числа Прандтля, полученной на основе модифицированной теории турбулентного замыкания в стратифицированных сдвиговых потоках [Островский и Троицкая, 1987; Zilitinkevich et al. 2007; Zilitinkevich et al. 2013]. В работе [Soustova et al., 2020] отмечено, что чувствительность численной схемы к используемой параметризации (особенно в области больших градиентов) представляется важной в задачах воспроизведения концентраций биохимических примесей во внутренних водоемах и описания газообмена с атмосферой (см. [Karpowicz and Ejsmont-Karabin, 2017]). Таким образом, можно ожидать, что использование параметризации может влиять на перенос биохимических примесей в небольших внутренних водоемах, в частности, через термоклин, что поможет дать более корректные оценки концентраций примесей и, тем самым, оценки последующей эмиссии парниковых газов в атмосферу.

1.3. Ледовые характеристики водоемов суши и их исследование

В регионах, где наблюдаются отрицательные температуры воздуха, на термический режим водоемов существенно влияет ледяной покров. Он влияет на энергообмен между гидросферой и атмосферой, биогеохимические процессы в озерах (например, цветение диатомовых водорослей); учет динамики льда необходим при планировании и проектировании транспортных систем, включая судоходство; а такие характеристики как время замерзания воды и начала таяния и дрейфа льда, протяженность и толщина ледяного покрова и т.д. отражают как изменения регионального климата, так и глобальные климатические тренды. Таким образом, ледовый режим внутренних водоемов, с одной стороны, является значимым индикатором климатических изменений, а с другой - влияет на социально-экономическое развитие прилегающих территорий и жизнедеятельность.

Помимо этого, для моделирования и прогнозирования гидрологических характеристик внутренних водоемов, например, термического режима, на многолетних масштабах необходима информация о стартовом вертикальном распределении, эволюция которого будет исследоваться с помощью математических моделей. Подобные данные могут быть получены экспериментально, либо на основе предположения о том, что в большинстве средних и крупных водоемов средней полосы России температурный профиль после вскрытия льда представляет собой 4°C по всей глубине. При этом остается открытым вопрос определения конкретных временных рамок установления периода открытой воды

Для изучения таяния льда и снега широко применяются методы спутниковой альтиметрии и радиометрии. Спутниковые методы наблюдений за ледово-снежным покровом имеют определенные преимущества, связанные с глобальным охватом и мгновенными

наблюдениями за большими акваториями. Подобные методы позволяют получить многолетнюю информацию о ледовом режиме водных объектов, в т.ч. тех, для которых отсутствуют данные наземных наблюдений (гидропостов). Однако использование спутниковых методов для озер и водохранилищ часто ограничено их пространственным разрешением, сравнимым с размерами водоемов или их превышающим. Спутники с приборами высокого пространственного разрешения часто имеют большие периоды повторяемости (ICESat), либо качество данных сильно зависит от погодных условий (Landsat).

Существуют различные исследования как российских, так и зарубежных авторов, посвященные алгоритмам определения ледового режима по данным дистанционного зондирования [Kang et al., 2014; Kouraev et al., 2007; Родионова и др., 2013; Hall et al., 1981; Goita et al., 2003; Kang et al., 2008], но, тем не менее, среди объектов, расположенных в Российской Федерации, наиболее подробно такие исследования проводились для самых крупных объектов: озера Байкал [Kouraev et al., 2007; Родионова и др., 2013], Онежского озера [Баклагин, 2008]. Изучение особенностей ледового режима озер России основано, как правило, на данных натурных измерений [Ефремова и др., 2010; Шимараев, 2007; Вуглинский, 2014; Смахтин, 2018], что требует наличия метеостанции для непрерывного наблюдения за объектом.

Большой интерес представляет использование данных спутников Jason 1, 2, 3 и Торех/Poseidon. Радиоальтиметрические спутники (см. рисунок 1.2) обеспечивают непрерывные, длинные временные ряды (с 1992 года) как активных, так и пассивных одновременных микроволновых наблюдений, на той же платформе и с тем же углом падения. Эти спутники оснащены двухчастотными (13,6 ГГц и 5 ГГц) радиолокационными высотомерами и трехканальными (18, 21 и 37 ГГц) микроволновыми радиометрами. Диаметр зоны охвата их высотомеров в Ku-диапазоне составляет около 5-10 км, а период повторяемости наблюдений – десять дней, что делает их пригодными для наблюдений за крупными и средними внутренними водоемами.



Рис. 1.2. Радиоальтиметрический спутник Торех/Poseidon.

1.4. Биогеохимические процессы во внутренних водоемах

Озера и водохранилища являются источниками парниковых газов: метана и диоксида углерода. В работе [Raymond et al., 2013] даны оценки влияния водоемов (озер, водохранилищ, рек и ручьев) на глобальный углеродный цикл: скорость выбросов оценена как ~ 2.1 петаграмм углерода в год. В [Rosentreter et al., 2021] дается следующая оценка: на водные экосистемы приходится от 41% до 53% общих глобальных выбросов метана из антропогенных и естественных источников. На рисунке 1.3. приведены выбросы метана из водных экосистем по сравнению с другими глобальными источникам. В качестве водных объектов рассмотрены ручьи и реки, озера, водохранилища, пруды, приливные отмели, континентальные шельфы и т.д.

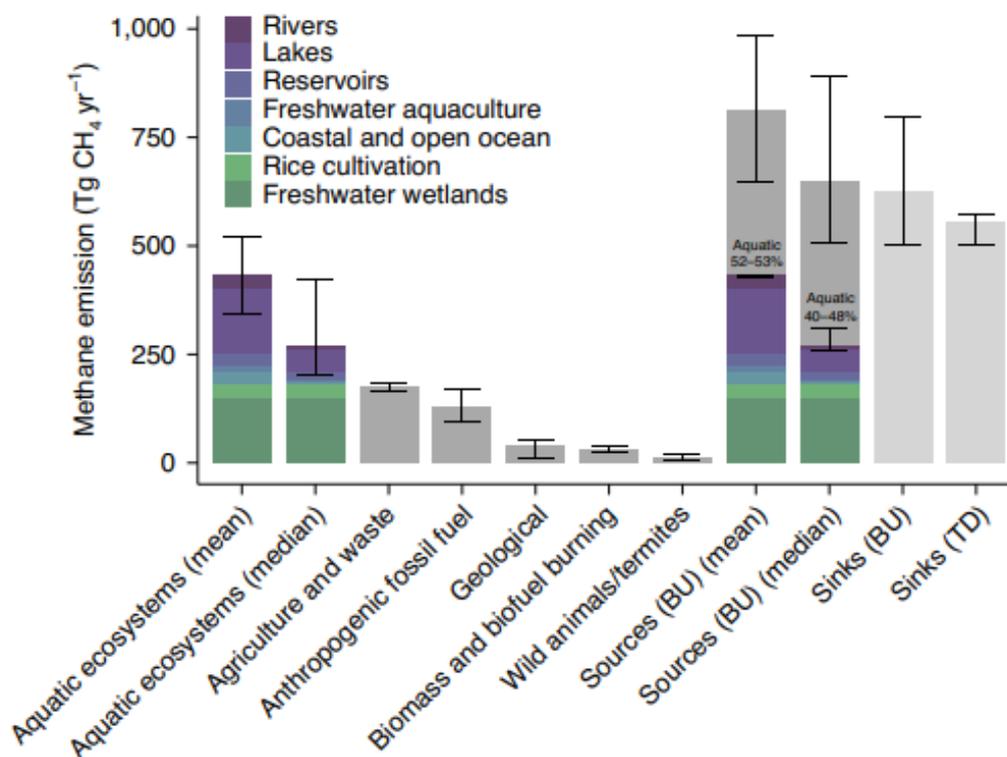


Рис. 1.3. Глобальные выбросы метана природными экосистемами по сравнению с другими источниками и стоками метана. Для источников и стоков: BU – bottom-up, TD – top-down.

(Rosentreter et al., 2021)

В последнее десятилетие было предпринято несколько попыток создания модели озера, включающей биогеохимические процессы, определяющие концентрацию метана и углекислого газа [Kessler et al., 2012; Tan et al., 2015]. В работе [Tan and Zhuang, 2015] приведена оценка эмиссии парниковых газов с поверхности водоемов северной части Евразии и Северной Америки. В качестве инструмента расчета была использована одномерная модель bLake4Me.

Эта модель состоит из 5 расчетных блоков, 2 из которых относятся к термодинамике, 3 к биохимии газов (углекислый газ, метан, азот). К термодинамическим блокам относятся расчет температуры воды и температуры донных отложений. Расчет производится на осредненных по горизонтали ячейках толщиной 10 см по уравнениям диффузии тепла. К биохимическим блокам относятся модуль продукции газов в донных отложениях, диффузный транспорт в водной толще и отдельно рассматривается модель пузырьков в водной среде. В модуле биохимии донных отложений наибольшее внимание уделяется метану. Рассчитывается его продукция в зависимости от плотности лабильной органики в грунтах, константы ее разложения и температуры, которая всегда играет важную роль в микробиологических процессах. После этого рассчитывается его диффузия в поровом растворе и пузырьковый сток из донных отложений. Диффузия растворенных газов в воде рассчитывается по градиенту концентраций между слоями в модели, и в каждом слое производится расчет биохимических преобразований, как например, окисление метана с помощью кинетики первого порядка. В модели пузырька рассчитывается средний размер, баланс газов на границе “пузырек - вода”, и соотношение газов внутри пузырька. Таким образом, поступающие к поверхности воды газы, рассчитанные в модели в блоках диффузного и пузырькового переноса, и составляют эмиссию их в атмосферу.

В качестве еще одного примера модели описания эмиссии метана водоемами можно привести работу [Makhov and Bazhin, 1999], где рассматриваются уравнения баланса массы растворенных газов в водном столбе в стационарном приближении. Коэффициенты диффузии в воде считаются постоянными, потоки газов на дне – заданными. В последующих работах [Bazhin, 2001, 2003] аналитически решается задача нахождения профилей концентраций газов в донных отложениях. Основным недостатком приведенной модели и ее модификаций является, во-первых, тот факт, что перенос газов описан очень упрощенно, без учета специфики турбулентного обмена.

В последнее время также ведутся разработки подходов к моделированию эмиссии парниковых газов во внутренних водоемах. Так, в отчете Уппсальского университета по оценкам эмиссии парниковых газов [Wilson, 2021] предлагается использование модели GOTM (General Ocean Turbulence Model) [Burchard, 2002], структура которой сосредоточена вокруг моделей замыкания турбулентности для параметризации вертикальных турбулентных потоков импульса, тепла, а также растворенного органического вещества и взвешенных частиц.

В [Цветова, 2017] представлены результаты моделирования пузырькового метана для озера Байкал. Численные эксперименты проводились на одной из версий комплекса моделей, разрабатываемого в ИВМиМГ СО РАН для изучения гидротермодинамики многофазных сред с участием метана. Рассматривается двухфазная модель «жидкость-газ» с учетом фазового перехода газа в раствор. В системе имеется 3 компонента: вода – несущая среда, метан в

газовой фазе и растворенный метан; и решается задача о крупномасштабной конвекции, которая возникает за счет выталкивающей силы пузырьков, выходящих из точечного источника со дна озера. Математическая модель в негидростатическом приближении представлена системой уравнений в частных производных для трех компонентов вектора скорости, уравнения для температуры, уравнения состояния и уравнения неразрывности. Поведение фаз метана описывается системой уравнений типа конвекции-диффузии-реакции. Предполагается, что растворенный метан движется со скоростью несущей среды, а газовая фаза получает дополнительные скорости подъема за счет сил плавучести. Явные термические эффекты при переходе газ-раствор не проявляются, поэтому в уравнении для температуры они не учитываются. Следует отметить, что для озера Байкал, как для крупнейшего на континенте природного резервуара пресной воды, исследования эмиссии парниковых газов ведутся достаточно широко, в то время как озера и водохранилища среднего и крупного размера в подобном ключе изучаются меньше, несмотря на то, что также являются важнейшим элементом глобальной климатической системы в целом и углеродного цикла в частности.

В работах [Полищук В. Ю. и Полищук Ю. М., 2020а, 2020б] представлен алгоритм геоимитационного моделирования, основанный на учете законов равномерного распределения координат центров озер и логнормального распределения их размеров, с привлечением спутниковых данных.

В исследованиях зарубежных авторов применяются как одномерные, так и трехмерные модели для оценок эмиссии парниковых газов. Так, в работе [Schmid et al., 2017], посвященной оценкам выбросов метана и изучению процессов, влияющих на его баланс, используется комбинация данных измерений и набора из трех моделей: модель пузырьков, высвобождаемых из донных отложений; одномерная физическая модель озера для расчета динамики перемешивания; и биогеохимическая модель диффузии-реакции для количественной оценки концентрации, потоков, источников и стоков метана с использованием озерного модуля программного комплекса AQUASIM 2.1g [Reichert 1994]. Авторы отмечают ряд неточностей, к которым привело использование такого подхода. Для физической модели наиболее серьезными проблемами являются количественная оценка вертикальной турбулентной диффузии в гипolimнионе и глубины металимниона. Основные же неточности заключаются в количественном определении источников и стоков метана, в их пространственной и временной изменчивости, а также в оценках выброса метана в атмосферу. Также авторы указывают на технические сложности подхода обмена данными между тремя моделями, не объединенными в единый комплекс.

В [Chen et al., 2019] предложена трехмерная модель для изучения выбросов углекислого газа из субтропического водоема и исследовано влияние концентрации данного газа на повышение биологической продуктивности озера (эвтрофикацию). Модель Delft3D,

предложенная авторами, включает в себя два блока: гидродинамический Delft3D-FLOW [Deltares, 2017a], в котором решаются уравнения Навье-Стокса в приближении мелкой воды, и “экологический” Delft3D-WAQ [Deltares, 2017b, 2017c], для решения уравнений переноса-диффузии-реакций.

В работе [Филатов и др., 2019] представлена разработанная авторами модель экосистемы Ладожского озера в виде биогеохимического круговорота вещества, осуществляемого процессами транспорта и трансформации с учетом динамики биогенов в донных отложениях.

1.5. Выводы по современному состоянию проблемы.

В заключение главы выделим основные выводы по современному состоянию рассматриваемой в диссертационной работе проблемы исследования термогидродинамических и биогеохимических процессов в водоемах суши как факторов, влияющих на формирование и изменение климата Земли:

- для описания термогидродинамики внутренних водоемов создан ряд моделей различной пространственной детализации, при этом наиболее широко применяется одномерное приближение, позволяющее с достаточной точностью описывать вертикальное распределение тепла и импульса и не обладающее высокими требованиями к вычислительным ресурсам, однако в этом случае встает вопрос реалистичного задания сопутствующих атмосферных данных, оказывающих влияние на формирование вертикальной структуры течения;

- особенностью мелкомасштабной турбулентности во внутренних водоемах является то, что она находится под действием двух факторов – плотностной стратификации и сдвига скорости, что необходимо учитывать при ее описании путем построения зависимостей коэффициентов обмена от градиентного числа Ричардсона, при этом измерения показывают, что турбулентность может существовать и при больших его значениях, превышающих критическое; таким образом, возникает задача описания процессов перемешивания путем модификации существующих схем, снимающей ограничения на существование турбулентности при больших значениях градиентного числа Ричардсона и позволяющей учесть совокупность важных, но зачастую пренебрегаемых факторов;

- ледовый режим внутренних водоемов является индикатором климатических изменений и влияет на энергообмен между гидросферой и атмосферой, термодинамические и биогеохимические процессы в озерах, а информация о временных рамках установления и вскрытия льда может использоваться при численных исследованиях эволюции температурного распределения, при этом вопрос об определении конкретных дат изменения ледового режима остается открытым, и для его решения могут быть использованы данные дистанционного зондирования Земли;

- математическое моделирование биогеохимического взаимодействия атмосферы и гидросферы является сравнительно новым научным направлением, и подобное взаимодействие на данный момент полноценно не отражено ни в одной существующей модели, для чего необходима разработка полного трехмерного описания генерации, переноса и стока биогеохимических субстанций в замкнутом водоеме, объединенного в комплексную систему с описанием термогидродинамических процессов, для получения наиболее полной картины концентраций примесей и эмиссии парниковых газов, как для отдельных задач экологии, так и для оценки вклада озер в глобальный углеродный цикл.

Глава 2. Исследование вертикальной термической структуры внутреннего водоема на примере Горьковского водохранилища

2.1. Краткое описание модели озера LAKE

Исследованию термического режима внутренних водоемов и его влияния на экологические и биологические процессы, протекающие в озерах и водохранилищах, посвящено множество работ (Abbasi et al., 2016; Babajimopoulos et al., 1986; Козицкая, 1989; Крейман и др., 1992). Температурный режим оказывает сильнейшее влияние на ряд процессов, протекающих в озерах и водохранилищах, включая биологическую продуктивность их экосистем. Именно поэтому информация о распределении температуры по глубине и его изменении по времени необходима для моделирования и прогнозирования эволюции биогеоценозов таких водоемов. Температурные режимы внутренних водоемов могут характеризоваться сильной кратковременной (в течение суток) и сезонной изменчивостью за счет сочетания особенностей батиметрии, эффектов ветро-волнового перемешивания, метеорологических условий и т.д.

Для изучения изменчивости гидрологических и термодинамических характеристик внутренних водоемов на сезонных, годовых и климатических масштабах на сегодняшний день наибольший интерес представляют одномерные модели, отличающиеся вычислительной простотой. Эмпирические данные свидетельствуют, что вариации температуры по вертикали значительно превосходят вариации температуры по горизонтали (см. например (Степаненко, 2005)). Это также подтвердилось в ходе натурных измерений на полигоне Горьковского водохранилища (рисунок 2.1), проведенных с участием автора настоящей диссертации. Было продемонстрировано, что различия температуры воды близ поверхности не превосходят 1°C в разных точках озерной части водоема. При этом перепад температуры между поверхностью и дном при глубинах водоема в точках измерений 8-12 метров составил 2-3 градуса Цельсия. На данном объекте также выполнялись исследования сезонных изменений вертикального распределения температуры, район которых обозначен красным эллипсом на этом же рисунке.

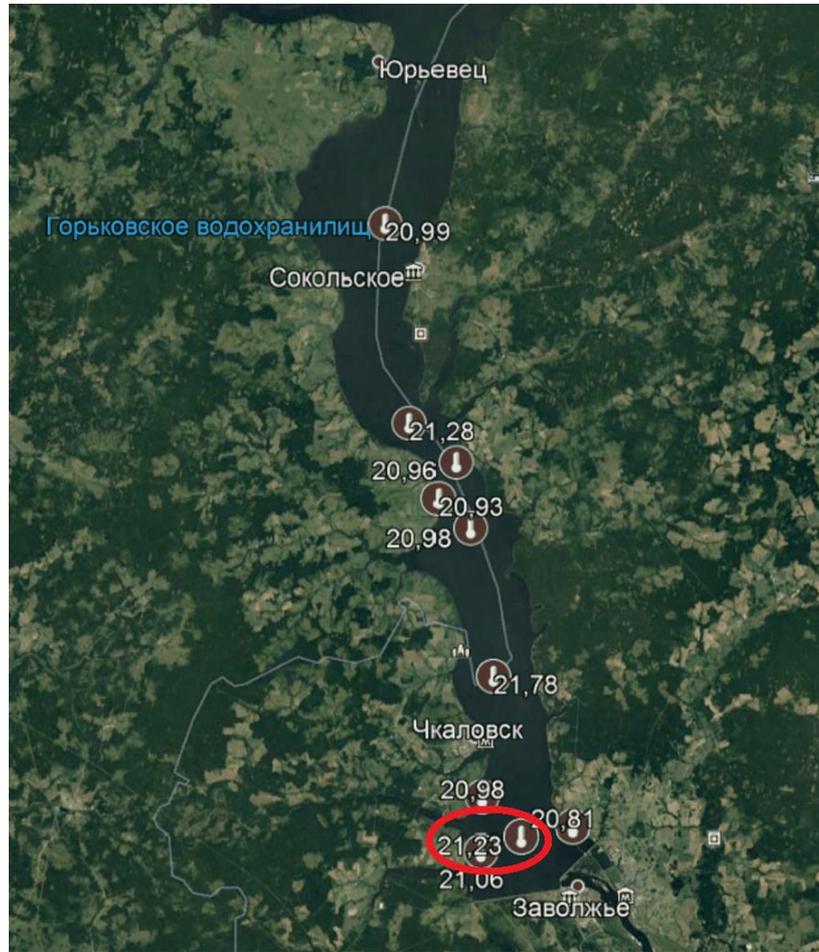


Рис. 2.1. Карта водохранилища с указанием значений температур поверхности, °С, измеренных в разных точках в период 13-16 августа 2017 г в период с 12 до 15 часов.

Одномерную систему уравнений, описывающую вертикальное распределение импульса и тепла, можно получить осреднением трехмерных уравнений по горизонтальному сечению водоема. Подобный подход используется в одномерной модели LAKE (подробное описание различных версий данной модели см. в (Степаненко, 2005; Степаненко, 2007; Stepanenko, 2016; Степаненко, 2018a)), которая в настоящий момент используется в последней версии климатической модели Института вычислительной математики РАН (Volodin et al., 2017). В настоящей работе эта модель использовалась для описания эволюции термического режима в Горьковском водохранилище.

Модель основана на горизонтально-осредненных уравнениях для температуры и импульса:

$$c_w \rho \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} = -c_w \rho A_T + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial z} \left(A (c_w \rho K_h + \chi') \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial z} \right) - \frac{1}{A} \frac{\partial A \langle R_s \rangle}{\partial z} + \frac{1}{A} \frac{dA}{dz} [R_{s_b} + F_{T,b}(z)], \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \langle u \rangle}{\partial t} = -A_u - \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} \right\rangle + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial z} \left(A (K_m + \nu) \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial z} \right) + \frac{1}{A} \frac{dA}{dz} F_{u,b}(z) + f \langle v \rangle, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \langle v \rangle}{\partial t} = -A_v - \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} \right\rangle + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial z} \left(A(K_m + \nu) \frac{\partial \langle v \rangle}{\partial z} \right) + \frac{1}{A} \frac{dA}{dz} F_{v,b}(z) - f \langle u \rangle, \quad (2.3)$$

где c_w – удельная теплоемкость воды, ρ – ее плотность, T – температура, A с индексами обозначены слагаемые, отвечающие за притоки, истоки и грунтовое питание водоема, $A(z)$ – горизонтальное сечение водоема; K_m и K_h – коэффициенты вертикальной турбулентной вязкости и температуропроводности соответственно; ν , χ' – коэффициенты молекулярной вязкости и температуропроводности, R_s – поток коротковолновой радиации (с индексом b – горизонтально однородный), $F_{T,b}(z)$ – поток тепла в донные отложения, u и v – компоненты скорости, p – давление, $F_{u,b}(z)$, $F_{v,b}(z)$ – вертикальный поток импульса на дне, f – параметр Кориолиса, угловые скобки означают осреднение.

Для расчета коэффициентов K_m и K_h используется двухпараметрическое k - ε замыкание в стандартной формулировке (Mellor and Yamada, 1975; Лыкосов, 1992). Оно основано на прогностических уравнениях для кинетической энергии турбулентности (ТКЭ, k) и скорости ее диссипации (ε). В следующей главе будет предложена модификация данного замыкания, но ввиду того, что результаты, полученные в настоящей главе, получены с применением стандартной схемы, пока остановимся на ней:

$$\frac{\partial k}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{K_m}{\delta_k} + \nu \right) \frac{\partial k}{\partial z} + P + B - \varepsilon, \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{K_m}{\delta_\varepsilon} + \nu \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} + \frac{\varepsilon}{k} (C_{1\varepsilon} \cdot P - C_{2\varepsilon} \cdot \varepsilon + C_{3\varepsilon} \cdot B), \quad (2.5)$$

$$K_m = C_\varepsilon \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (2.6)$$

$$K_h = K_m \cdot Pr_T^{-1}. \quad (2.7)$$

Здесь слагаемое $P = C_\varepsilon \frac{k^2}{\varepsilon} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right]$ соответствует генерации энергии турбулентности за счет сдвига скорости, а $B = -\frac{g}{\rho} C_{\varepsilon,T} \frac{k^2}{\varepsilon} \alpha_T \frac{\partial T}{\partial z}$ описывает генерацию или потребление энергии за счет действия сил плавучести, δ_k , δ_ε – турбулентные числа Шмидта для ТКЭ и скорости диссипации, соответственно, $C_{1\varepsilon}, C_{2\varepsilon}, C_{3\varepsilon}, C_\varepsilon, C_{\varepsilon,T}$ – эмпирические константы (см, например, (Burchard and Deleersnijder, 2001)), Pr_T – турбулентное число Прандтля, полагаемое в классическом замыкании постоянным.

2.2. Процедура задания скорости ветра как важнейшего фактора перемешивания

2.2.1. Использование данных глобального метеорологического реанализа

В модели LAKE в качестве входных данных для расчета временной эволюции вертикального распределения температуры используются: начальный температурный профиль, постоянные (неизменяющиеся в ходе расчета) характеристики (параметры численной схемы, глубина водоема, постоянные коэффициенты в уравнениях), а также таблицы данных метеорологических условий, характеризующих изменение условий на верхней границе в течение всего периода счета.

Задаваемые метеоданные для расчета граничных условий включают в себя временные зависимости температуры воздуха, атмосферного давления, удельной влажности воздуха, скорости выпадения осадков, интенсивность солнечной радиации и встречного излучения атмосферы, а также компоненты скорости ветра. В большинстве работ (Пуклаков и Гречушников, 2001; Пуклаков и др., 1991; Степаненко, 2005; Abbasi et al., 2016), посвященных моделированию термодинамики водных объектов, в качестве входных данных метеорологических условий используются результаты специальных натурных измерений, что требует наличия постоянно функционирующей аппаратуры. В то же время стандартные текущие наблюдения, выполняемые на станциях и постах Гидрометцентра, расположенных на берегу (в случае Горьковского водохранилища это Волжская ГМО г. Городец и станция в г. Юрьевец), могут не отражать реальных условий непосредственно на водоеме. На средних и небольших водоемах таких измерений может вообще не проводиться. Поэтому представляется перспективным использование данных глобального метеорологического реанализа, имеющихся в настоящее время в открытом доступе (The NCEP/NCAR Reanalysis Project). Для используемого стандартного реанализа NCEP интервал изменения метеоданных по времени составляет 6 часов, а пространственное разрешение - $2.5^{\circ} \times 2.5^{\circ}$. Подобное низкое разрешение приводит к тому, что даже на крупные водоемы, такие как Ладожское, Онежское озеро или Рыбинское водохранилище, приходится всего 1-2 ячейки, не говоря уже о Горьковском водохранилище. При этом ячейка сетки наряду с водоемом захватывает значительные территории суши, над которой метеосостояния сильно отличаются.

Скорость ветра критически важна с точки зрения влияния на основные характеристики эпимимниона: температуру и толщину. На основе сравнения результатов многочисленных измерений, выполненных с 2014 по 2017 гг. (Кузнецова и др., 2016), с соответствующими данными реанализа (см. рисунок 2.2) был получен поправочный коэффициент (равный 1.5), на который необходимо умножить значения скорости ветра, полученные из реанализа.

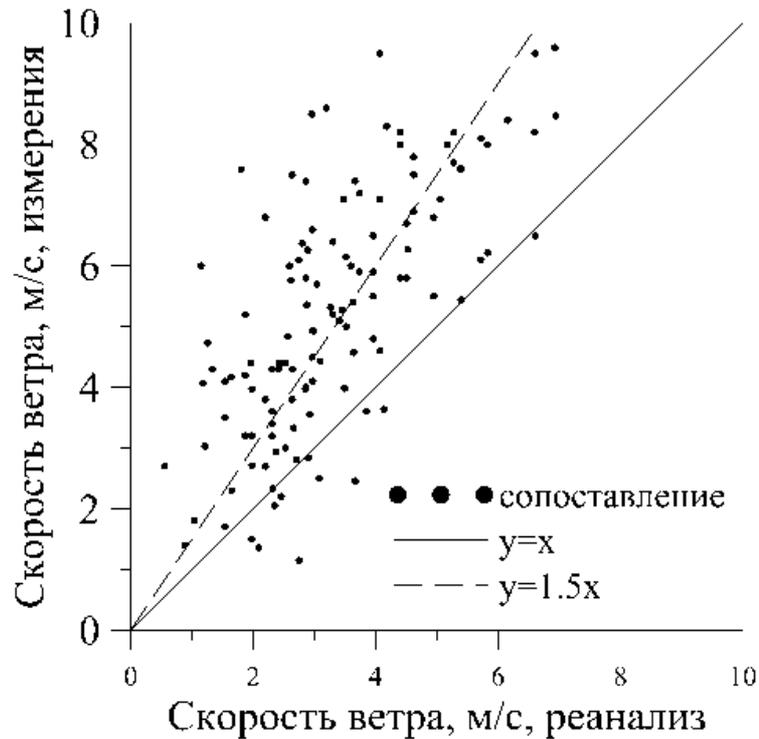


Рис. 2.2. Сопоставление данных натуральных измерений скорости ветра на высоте 10 метров и данных реанализа NCEP/NCAR.

2.2.2. Восстановление поля скоростей ветра с помощью геофизической модельной функции SMOD5

Помимо подхода, основанного на использовании данных глобального реанализа с корректировкой на основе данных натуральных измерений, существуют также методы оперативной диагностики и прогнозирования скорости приземного ветра с помощью дистанционного зондирования поверхности воды из космоса с использованием алгоритмов, полученных для морских условий. Нами были использованы изображения поверхности Горьковского водохранилища, полученные с помощью радиолокатора с синтезированной апертурой (РСА) со спутников Sentinel-1A/B (Sentinel-1 Mission) в С-диапазоне с использованием поляризации VV, а также геофизическая модельная функция SMOD5 (Hersbach, 2003).

Стандартный алгоритм SMOD5 позволяет определить удельную эффективную площадь рассеяния σ^0 (УЭПР) на основе данных о скорости ветра v , угла падения луча съемки θ и угол φ между азимутальным углом α и направлением ветра χ . Описание «прямого» алгоритма SMOD5 приведено в Приложении А.

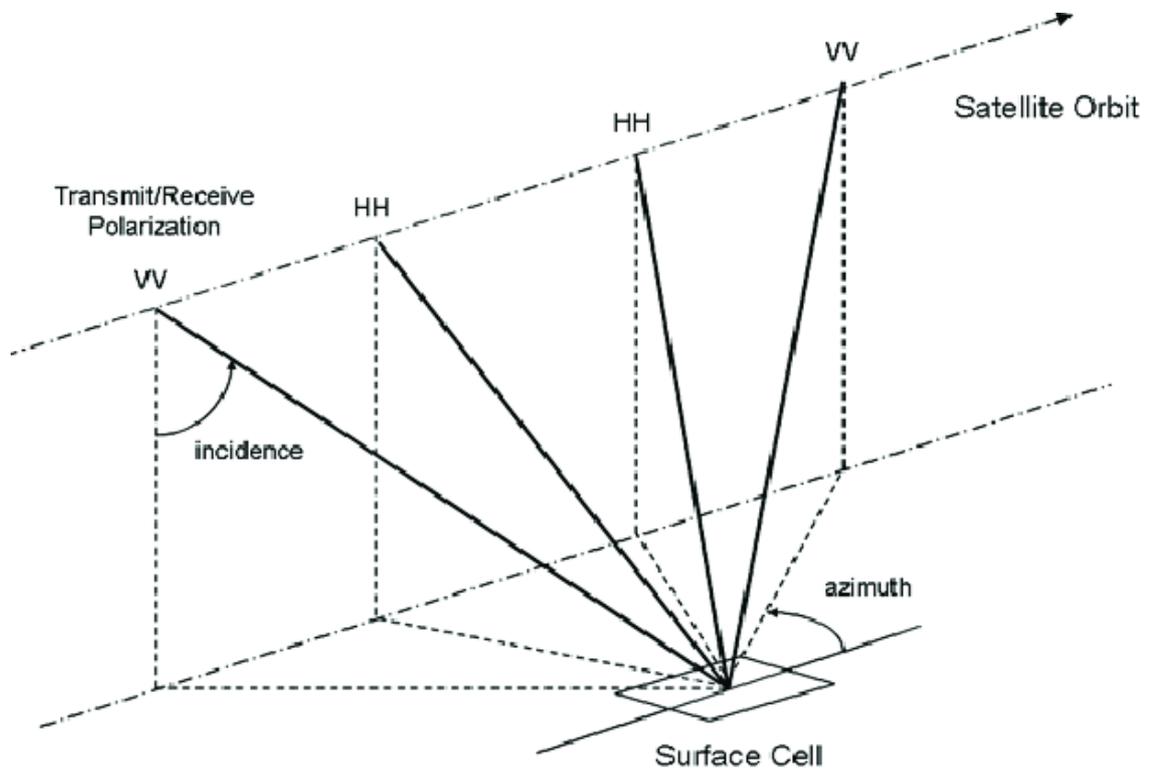


Рис 2.3. Азимутальный угол α (azimuth) и угол падения θ (incidence) для VV и HH поляризаций (Rivas, 2009).

Для восстановления поля скоростей ветра был реализован т.н. «обратный» алгоритм CMOD5. Информация о значениях УЭПР была получена в результате обработки изображений спутников Sentinel, и приведенное в (Hersbach, 2003) и Приложении А уравнение решалось относительно неизвестного v – скорости ветра. Уравнение является нелинейным, а решить его аналитически не представляется возможным, при этом классические численные методы Ньютона и Стеффенсена оказались неприменимы. Поэтому был сконструирован оптимальный по Кунгу-Траубу трехшаговый метод восьмого порядка, свободный от производных (см. Приложение Б), который и был использован для решения уравнения в численной реализации «обратного» алгоритма CMOD5. С его помощью были определены поля скоростей ветра над Горьковским водохранилищем в различные временные интервалы.

Результаты были сопоставлены с расчетами, полученными с использованием численной модели прогноза погоды WRF (Weather Research and Forecasting), предназначенной для исследования атмосферы (Skamarock et al., 2019). Рисунок 2.4 демонстрирует хорошее согласие между полями скоростей, полученными данной моделью и при помощи «обратного» алгоритма CMOD5. Таким образом, приведенный алгоритм также может быть использован для восстановления скоростей ветра с целью их использования в качестве данных текущей метеорологической обстановки при расчетах термогидродинамических характеристик внутренних водоемов одномерной моделью LAKE.

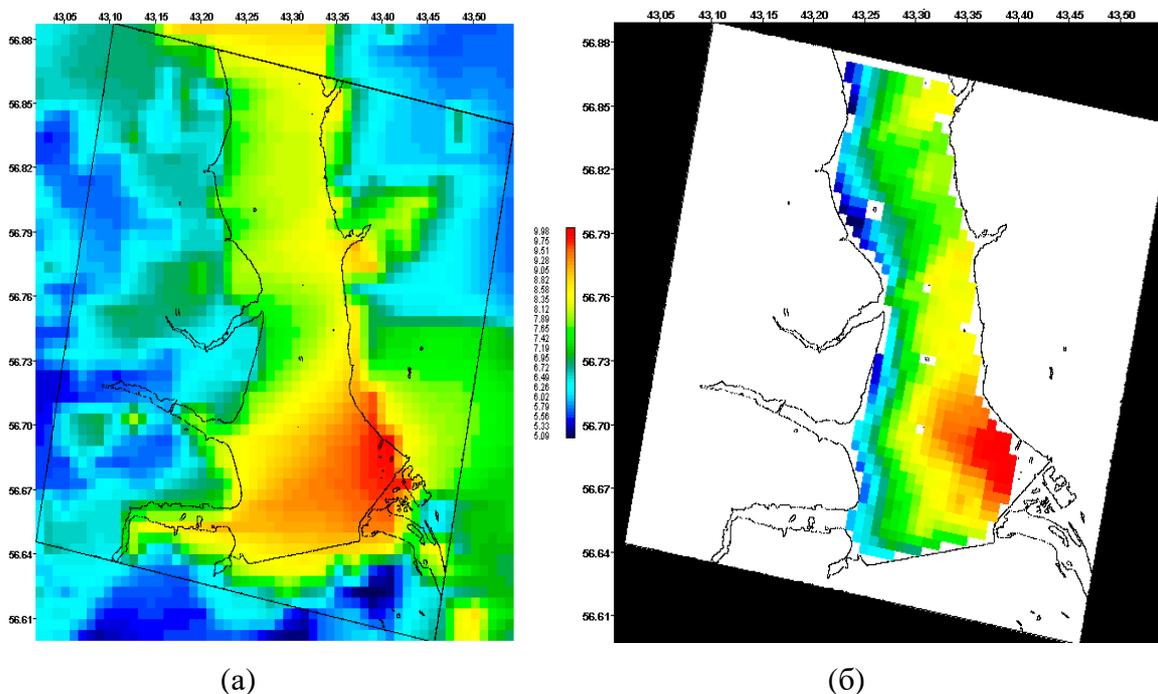


Рис. 2.4. Поле скоростей ветра над Горьковским водохранилищем 28.09.2018 в 6:00 часов: а) полученное с использованием модели WRF, б) с помощью обратного алгоритма SMOD5 по данным спутника Sentinel.

2.2.3. Привлечение результатов расчетов, полученных с помощью атмосферных моделей¹

Еще одним подходом является привлечение атмосферных моделей (Gu et al., 2015; Mallard et al., 2015; Xiao et al., 2016): например, в работе (Wang et al., 2019) рассматривается применение объединенной модели атмосферы и водоема к водохранилищу Нуожаду на юго-западе Китая. Автором настоящей работы использовалась методика, основанная на применении модели WRF к региону, содержащему рассматриваемую акваторию, и включение полученных атмосферных данных в модель озера LAKE для их использования в качестве граничных условий. Рисунок 2.5 демонстрирует, что расчеты с помощью WRF воспроизводят гораздо более сильные ветра, чем реанализ.

¹ Раздел написан на основе статьи (Gladskikh et al., 2022).

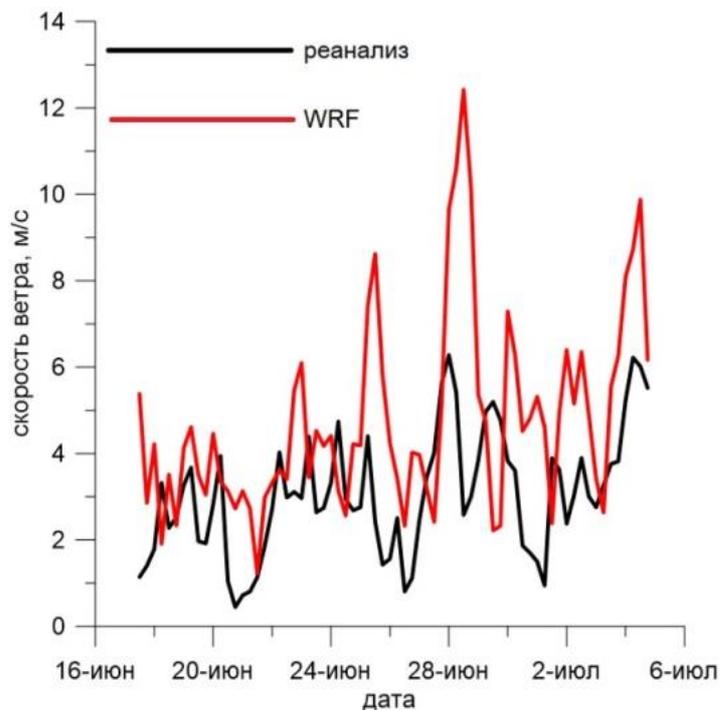


Рис. 2.5. Сопоставление данных скорости ветра на высоте 10 метров, полученных с помощью глобального реанализа NCEP/NCAR и по результатам расчетов с применением модели WRF.

Для универсального использования в целях прогнозирования температурной стратификации различных водных объектов без привлечения дополнительных натуральных измерений была выполнена модификация, в рамках которой значения скорости ветра, полученные с помощью WRF, поступают в качестве входных данных в модель LAKE. Для верификации объединенного программного комплекса были использованы данные натуральных измерений, проведенных на Горьковском водохранилище летом 2019 года. Исследовалась эволюция температурного профиля, полученного путем измерений, а в качестве сопутствующих данных о скорости ветра данные реанализа без поправочного коэффициента, с поправочным коэффициентом и результаты, полученные с помощью WRF. Далее было проведено сопоставление с температурным профилем, измеренным спустя две недели. Рисунок 2.6 демонстрирует, что примененная методика позволяет воспроизводить режимы сильного перемешивания ввиду корректных данных скорости приводного ветра.

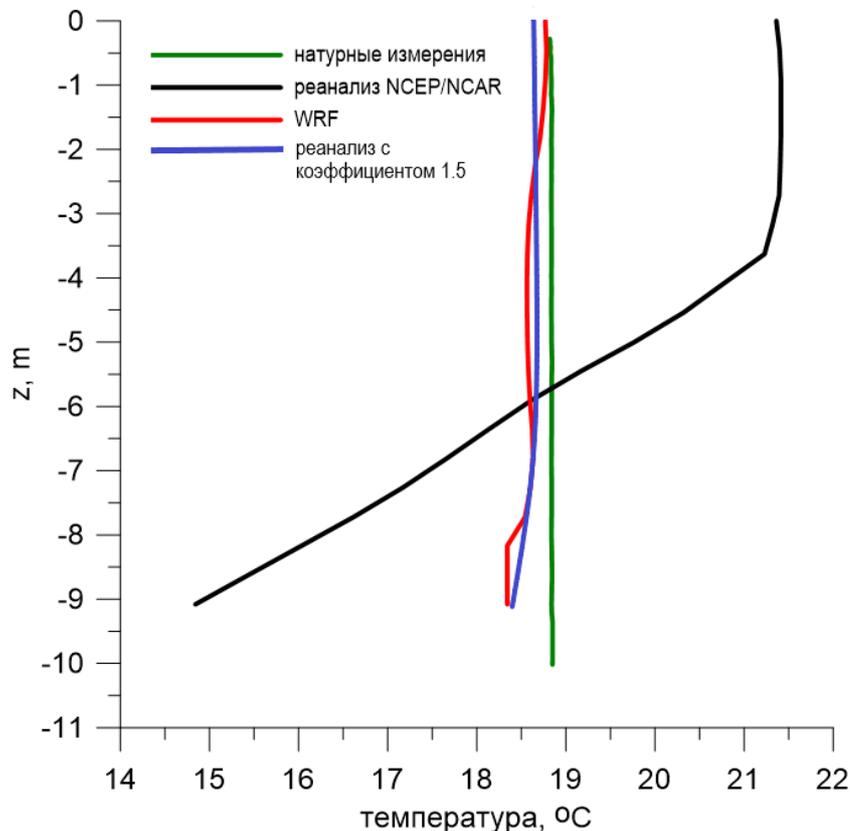


Рис. 2.6. Сравнение вертикального распределения температуры, полученного в рамках натуральных измерений, по данным расчетов с помощью модели LAKE с применением в качестве информации о скорости ветра данных глобального реанализа и расчетов WRF.

Отметим, что все прочие данные сопутствующей метеорологической обстановки (температура и влажность воздуха, атмосферное давление, падающая солнечная радиация и встречное излучение атмосферы) были получены из глобального реанализа и использовались без дополнительной коррекции. На основе выполненных ранее натуральных измерений с использованием уникального оборудования – вехи Фруда (Kuznetsova et al., 2016) – была получена параметрическая зависимость напряжения трения τ ($\text{кг/м}\cdot\text{с}^2$) от скорости ветра, учитывающая особенности подстилающей поверхности водоемов:

$$\tau = 1.274 * 10^{-3} * w_r + 3.4 * 10^{-4} * w_r^2 + 4.9 * 10^{-5} * w_r^3,$$

где w_r – модуль скорости ветра (м/с). Данная зависимость использовалась при расчетах в настоящей работе в граничном условии для кинетической энергии турбулентности на границе вода-воздух, а также в граничных условиях уравнений для расчета динамики водоема.

2.3. Численное моделирование сезонных вариаций вертикальной термической структуры Горьковского водохранилища

В настоящем разделе приведены результаты численного моделирования вертикального температурного распределения на временных интервалах, полностью охватывающих период от вскрытия льда на водоеме до замерзания и составляющих около полугода. Речь идет о моделировании сезонных вариаций распределения температуры по глубине для водоемов от средних до очень больших (в соответствие с классификацией, предложенной в работах (Захаренков, 1964; Иванов, 1948)). Типичным представителем подобных объектов является Горьковское водохранилище (рисунки 2.7, 2.8) площадью 1591 км², средней глубиной 3.6 м и максимальной глубиной 22 м. Для этого водоема накоплен значительный массив данных о вертикальном распределении температуры и сопутствующих погодных условиях в ходе экспедиционных работ, выполняющихся группой исследователей из ИПФ РАН с 2014 г. по н.в. (Кузнецова, 2016).

Для измерений профиля температуры использовался CTD-зонд модели RBR с точностью измерений 0.002°C и разрешением по глубине около 4 см, обусловленным частотой опроса датчиков (6 Гц) и скоростью погружения зонда (около 0.25 м/с). В ходе каждого выхода проводилось несколько измерений.

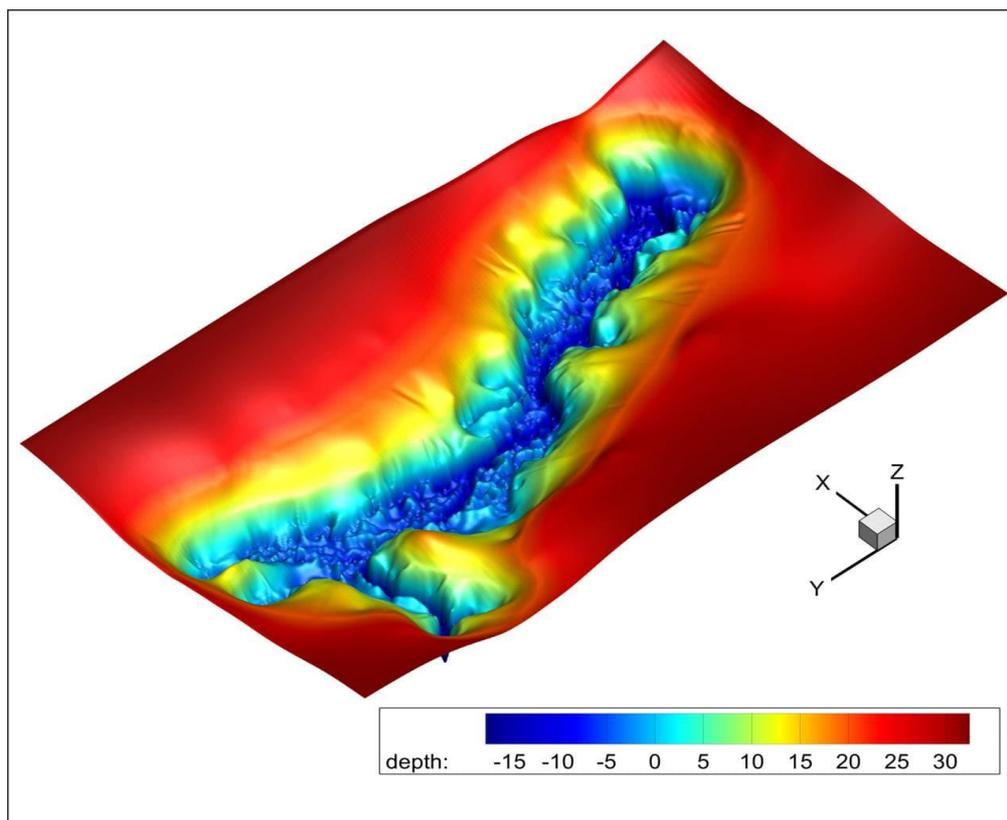


Рис. 2.7. Карта глубин Горьковского водохранилища на участке Городец-Юрьевоц.

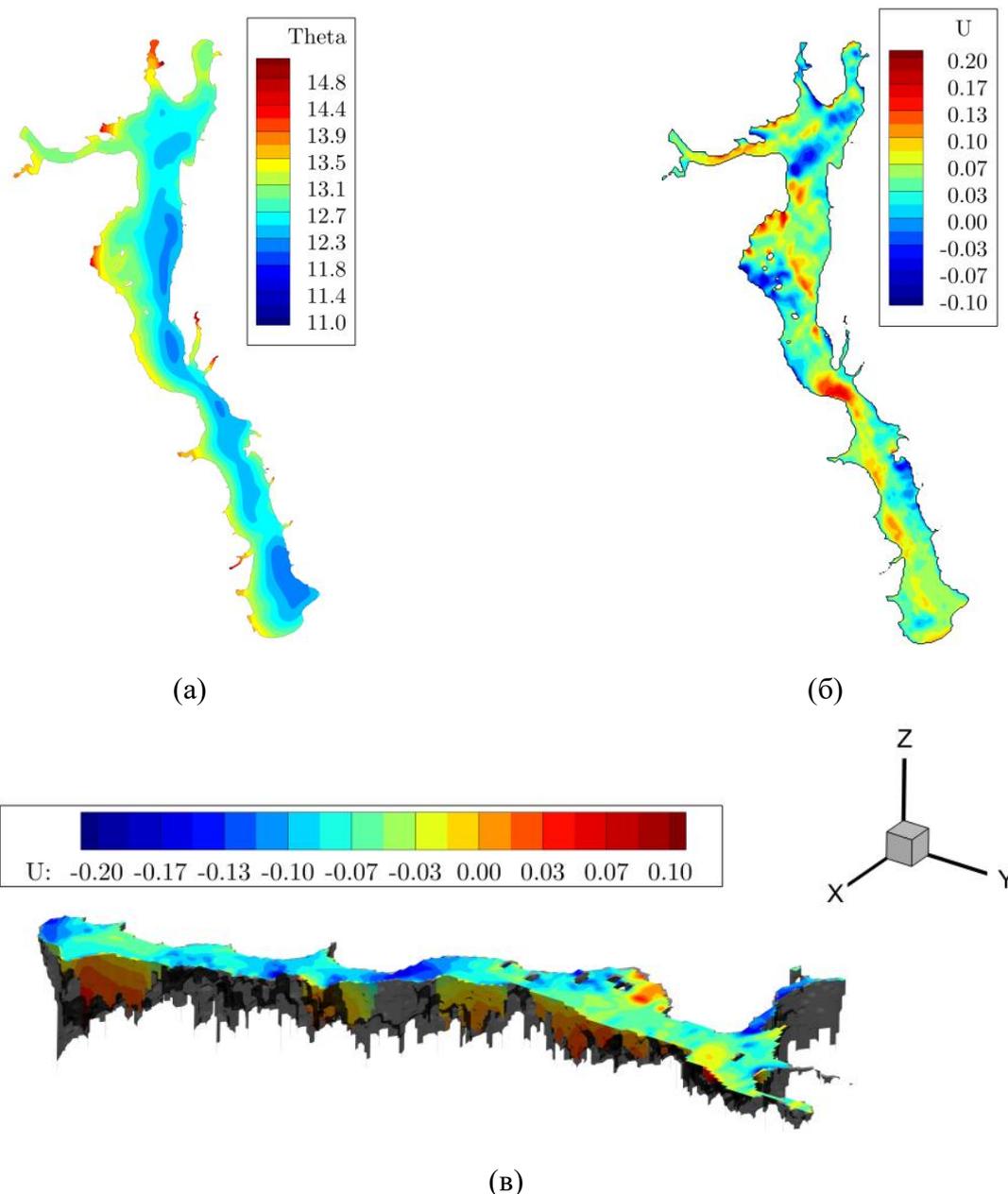


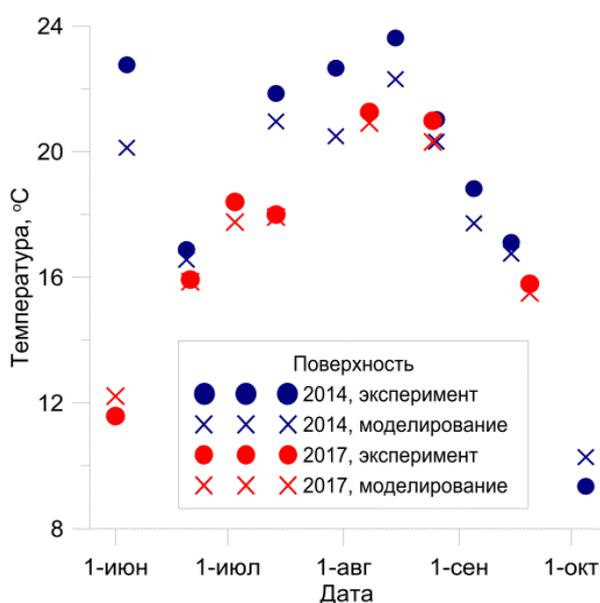
Рис. 2.8. – Мгновенное распределение температуры поверхности (а) и горизонтальной компоненты скорости течения (б, в) в расчетах циркуляции Горьковского водохранилища с применением трехмерной модели.

Из массива данных по всем экспедициям были выбраны 2014 и 2017 гг., поскольку эти сезоны характеризуются значительными отличиями в характере распределения температуры, что связано в первую очередь с сильными различиями в метеорологических условиях, а также по той причине, что для них имелось максимальное количество измерений. Лето 2014 г. (особенно в начале и середине) характеризуется значительно большей интенсивностью падающей солнечной радиации, более высокой температурой воздуха и меньшими ветрами. Соответственно профили вертикального распределения температуры, полученные в этот период, отличаются сильной стратификацией, в отличие от периода 2017 г., когда почти в

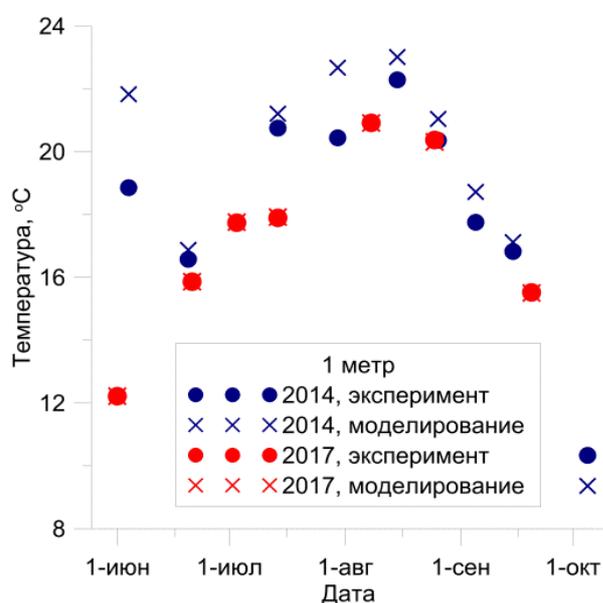
течение всего сезона наблюдались практически однородные по глубине профили из-за слабого прогрева и сильного перемешивания.

Для оценки численных результатов нами были последовательно проанализированы рассчитанные и измеренные значения температуры в контрольных точках (на разных горизонтах глубины), а также формы профилей распределения температуры для характерных случаев и среднееквадратическое отклонение численных результатов от данных измерений.

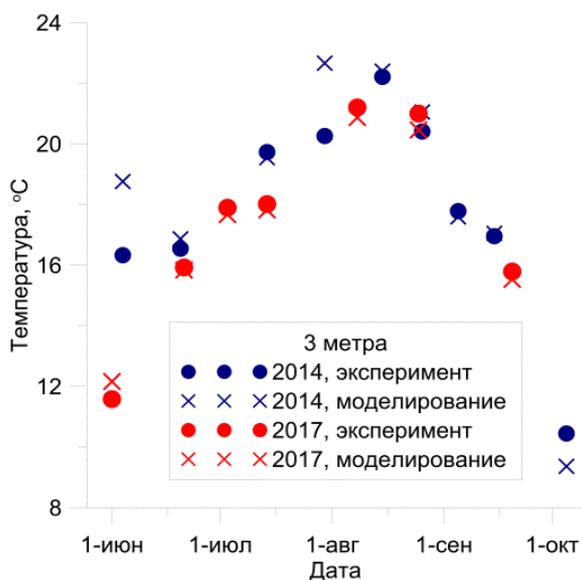
В качестве контрольных уровней были выбраны поверхность и глубины 1 м, 3 м, 8 м. На рисунке 2.9 хорошо видно, что чем больше глубина, тем различия между расчетом и экспериментом меньше, что лишний раз подтверждает большую изменчивость и сложность физических процессов в эпилимнионе и металимнионе, обусловленных, в первую очередь, ветро-волновым взаимодействием.



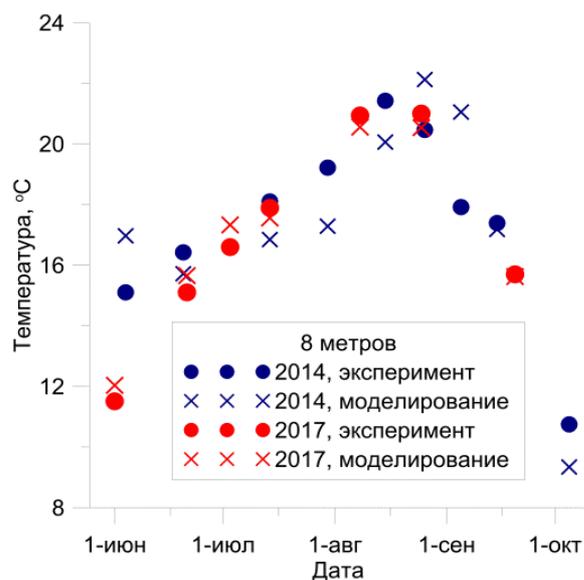
(a)



(б)



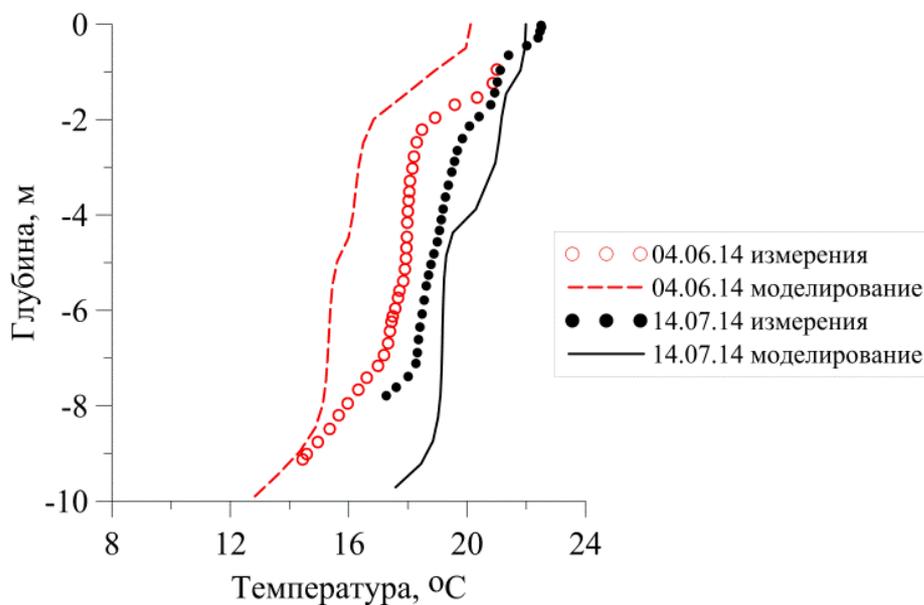
(в)



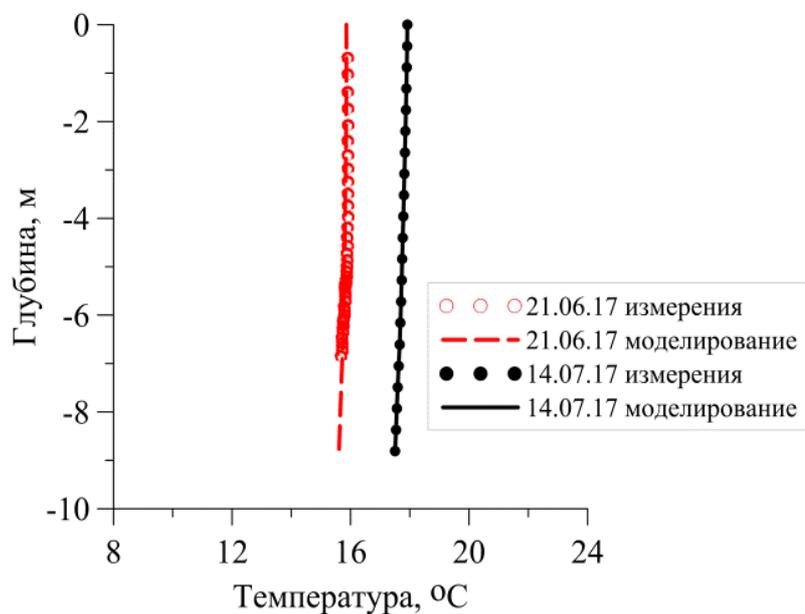
(г)

Рис. 2.9. Сравнение измеренных и рассчитанных значений температуры на различных горизонтах глубины: а) поверхность, б) 1 м, в) 3 м, г) 8 м.

Рисунок 2.9 демонстрирует, что расчеты достаточно хорошо описывают общие сезонные изменения температурного распределения по глубине. Если перейти к сравнению форм профилей для характерных случаев в обоих сезонах (см. рисунок 2.10), также видно, что расчеты хорошо не только качественно, но и количественно воспроизводят натурные данные. Однако наилучшего совпадения удалось достичь для режимов сильного перемешивания, часто наблюдавшихся в 2017 г., по сравнению с сильной стратификацией, характерной для 2014 г., где существуют количественные различия (в значениях температур) между рассчитанными и натурными данными.



(а)



(б)

Рис. 2.10. Сравнение форм измеренных и рассчитанных профилей вертикального распределения температуры: а) стратифицированные профили 2014 г., б) перемешанные профили 2017 г.

Для интегральной характеристики согласия натуральных данных и расчетов использовалось среднеквадратичное отклонение по температуре по всему ансамблю реализаций по следующей формуле:

$$\sigma = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (T_{ij} - \overline{T_{ij}})^2},$$

где n – число реализаций в сезоне (9 – для 2014 г., 7 – для 2017 г.), m – число точек по глубине (25 точек), T_{ij} – рассчитанное значение температуры, $\overline{T_{ij}}$ – измеренное значение температуры, σ – значение среднеквадратического отклонения для всего ансамбля реализаций. Оно оказалось равным примерно 1°C для 2014 года, а для 2017 года — 0,4°C, что подтверждает повышение точности расчетов по сравнению с использованием исходной версии модели LAKE 1.0 (Степаненко, 2005), которая демонстрировала среднеквадратическое отклонение около 2-3°C в обоих случаях. Есть основания полагать, что полученное улучшение результатов обусловлено реалистичным заданием начальных условий.

Следует отметить, что сильное перемешивание и менее интенсивная солнечная радиация в 2017 г. препятствовали установлению стратификации по сравнению с 2014 г, что демонстрирует широкий диапазон изменения термического режима в зависимости от сезонных условий.

2.4. Выводы по Главе 2.

Глава 2 настоящей работы посвящена численному исследованию эволюции вертикальной термической структуры внутреннего водоема среднего размера на примере озерной части Горьковского водохранилища с помощью программного комплекса, основанного на одномерной модели LAKE. Для повышения точности результатов предложена модификация, затронувшая процедуру задания входных данных и обеспечившая учет ветрового воздействия на процессы перемешивания за счет параметризации потока импульса, основанной на данных натуральных измерений. В качестве данных текущих метеорологических условий для расчетов использовались данные глобального метеорологического реанализа NCEP/NCAR. Предложены три методики процедуры задания скорости ветра, как важнейшего фактора, влияющего на

перемешивание во внутренних водоемах: комбинированный метод, основанный на использовании данных реанализа и отдельных измерений; восстановление поля скоростей ветра с помощью данных дистанционного зондирования и геофизической модельной функции; привлечение атмосферной модели.

Результаты расчетов были сопоставлены с данными о вертикальном распределении температуры, измеренными в озерной части Горьковского водохранилища с помощью свободно падающего CTD-зонда. Продемонстрировано, что результаты расчетов хорошо согласуются с реальными сезонными изменениями термического режима, происходящими в Горьковском водохранилище. Наилучшего совпадения удалось достичь для режимов сильного перемешивания, по сравнению с сильной стратификацией, и причин этому может быть несколько:

- Недостаточно корректные данные солнечной радиации, получаемые из реанализа: облачность над водоемом и суши может сильно отличаться за счет конвективных явлений, т.е. целесообразно использование калибровочного коэффициента на основе данных натуральных измерений либо привлечения атмосферных моделей, как в случае скорости ветра.

- При сильной эвтрофикации может локально изменяться коэффициент экстинкции, что сильно сказывается на поглощении излучения и нагрева эпилимниона. Для учета изменений оптических характеристик воды, связанных с биологической продуктивностью, вычислительная технология дополнена параметризацией коэффициента экстинкции, о которой будет подробнее сказано в Главе 5.

- Необходимо учитывать зависимость коэффициента генерации турбулентности от характеристик ветро-волновой обстановки, а также вклад сдвига скорости и внутренних волн в мелкомасштабную турбулентность. Для учета ряда эффектов, связанных с турбулентностью в озерах и водохранилищах, была произведена модификация турбулентного замыкания (см. в Главе 3).

В целом, можно заключить, что одномерная модель термогидродинамики замкнутого водоема достаточно точно воспроизводит эволюцию вертикальной термической структуры внутреннего водоема среднего размера на масштабе порядка сезона (весь период открытой воды) с учетом уточненного описания ветрового воздействия на процессы перемешивания и применением данных глобального метеорологического реанализа.

Глава 3. Модификация стандартного k - ε замыкания для описания турбулентности в стратифицированной жидкости и ее применение к моделированию термогидродинамики внутренних водоемов

3.1. Основные положения моделей турбулентности, учитывающих двустороннюю трансформацию кинетической и потенциальной энергий турбулентных пульсаций.

В модели, описанной в Главе 2, применяется k - ε параметризация турбулентности, основанная на уравнениях баланса для кинетической энергии турбулентности k и скорости ее затухания ε . При этом отношение коэффициента турбулентной вязкости к коэффициенту турбулентной теплопроводности (турбулентное число Прандтля, Pr_T) предполагается постоянным. Это, в частности, дает ограничение на описание известного эффекта (Монин и Яглом, 1965; Kondo and Curry, 2000; Strang and Fernando, 2001; Stretch et al., 2001), связанного с существованием турбулентности при больших градиентных числах Ричардсона Ri . В то же время и лабораторные, и натурные измерения указывают на зависимость Pr_T от Ri (Bertin, 1997; Esau, 2002; Kondo et al., 1978; Ohya, 2001; Rehmann and Koseff, 2004; Strang and Fernando, 2001; Stretch et al., 2001). В связи с этим особый интерес в задачах моделирования термогидродинамического режима внутренних водоемов представляет учет стратификации и, в частности, ее роли в процессах турбулентного перемешивания, динамики термоклина и т.п. В последнее время активно развиваются модернизированные подходы к описанию геофизической турбулентности, учитывающей наличие устойчивой и неустойчивой стратификации, а также внутренних волн, взаимодействующих с турбулентностью и даже усиливающих ее.

В настоящей главе предлагается модификация описания термогидродинамического режима внутренних водоемов в рамках k - ε схемы с учетом внедрения параметризации $Pr_T(Ri)$, полученной в ходе оригинальной модели нестационарных турбулентных течений в стратифицированной жидкости (Островский и Троицкая, 1987).

С использованием последовательной математической процедуры, основанной на приближенном решении уравнения для функции распределения вероятности $f(\mathbf{v}, \lambda, \mathbf{r}, t)$ (скорость \mathbf{v} и плотность λ в точке \mathbf{r} в момент t) значений гидрофизических полей, авторами (Островский и Троицкая, 1987) были получены выражения для турбулентных потоков, описывающие обратимый характер преобразования энергии стратифицированной турбулентности из кинетической в потенциальную, что обеспечивает зависимость турбулентного числа Прандтля от градиентного числа Ричардсона. Позднее в работах (Zilitinkevich et al. 2007; Zilitinkevich et al. 2013) независимо была предложена теория турбулентного замыкания, основанная на уравнениях баланса для кинетической, потенциальной

энергии турбулентности, турбулентных потоков количества движения, потенциальной температуры и релаксационного уравнения для турбулентного масштаба времени. Эта модель также позволяет снять ограничения на существование турбулентности при больших числах Ричардсона, при этом зависимости $Pr_T(Ri)$ в EFB-closure С.С. Зилинкевича и в работе Л.А. Островского и Ю.И. Троицкой эквивалентны.

Приведем уравнение для одноточечной функции распределения вероятности $f(\mathbf{v}, \lambda, \mathbf{r}, t) = \langle \delta(\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{v})\delta(\rho(\mathbf{r}, t) - \lambda) \rangle$ скорости и плотности в заданной точке в заданный момент времени; угловые скобки означают вероятностное осреднение, δ – функция Дирака.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial \mathbf{r}} - g \frac{\lambda - \rho_0}{\rho_0} \right) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = J_p + J_\rho + J_v + J_D. \quad (3.1)$$

В правой части (3.1) J_p, J_ρ, J_v, J_D задаются формулами:

$$J_p[f_{2\mathbf{v}}, f] = \frac{1}{4\pi} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \int d\mathbf{r}_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} \int d\mathbf{v}_1 \left(\mathbf{v}_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \right)^2 [f_{2\mathbf{v}} - f f_{\mathbf{v}}],$$

$$J_\rho[f_{2\lambda}, f] = \frac{1}{4\pi\rho_0} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \int d\mathbf{r}_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} \frac{\partial}{\partial z_1} \int_{-\infty}^{\infty} \lambda_1 [f_{2\lambda} - f f_\lambda] d\lambda_1,$$

$$J_v[f_{2\mathbf{v}}, f] = v \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \lim_{\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \int \mathbf{v}_1 [f_{2\mathbf{v}} - f f_{\mathbf{v}_1}] d\mathbf{v}_1,$$

$$J_D[f_{2\lambda}, f] = D \frac{\partial}{\partial \lambda} \lim_{\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \int_{-\infty}^{\infty} \lambda_1 [f_{2\lambda} - f f_\lambda] d\lambda_1,$$

где $f_{2\mathbf{v}}(\mathbf{v}, \lambda, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}, t) = \langle \delta(\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{v})\delta(\rho(\mathbf{r}, t) - \lambda)\delta(\mathbf{u}_1(\mathbf{r}, t) - \mathbf{v}_1) \rangle$ и, соответственно, $f_{2\lambda}(\mathbf{v}, \lambda, \lambda_1, \mathbf{r}, t)$ – двухточечные функции распределения скорости и плотности, характеризующие законы движения жидких частиц относительно друг друга.

Интеграл J_p связан с действием пульсаций давления за счет хаотического движения частиц жидкости (гидродинамическая составляющая), а J_ρ — с действием пульсаций, возникающих при случайном смещении частиц из состояния равновесия в стратифицированной жидкости в поле силы тяжести (гидростатическое давление), а также при воздействии средней и пульсационных компонент вязкой силы и диффузии средней и пульсационной компонент плотности. Интегралы J_p, J_ρ, J_v, J_D аналогичны интегралам столкновений в кинетической теории газов (Lundgren, 1967). Как показано в (Островский, Троицкая, 1987), в случае квазиоднородной изотропной мелкомасштабной турбулентности, когда характерный масштаб энергонесущих

вихрей мал по сравнению с масштабом изменения средних значений, член J_p является доминирующим в правой части.

Кратко обсудим приближенное решение интегро-дифференциального уравнения (3.1) для функции распределения вероятностей с правой частью в релаксационном приближении. Аналогичный подход был использован в (Keller and Wright, 1975) при выводе уравнения для спектральной плотности энергии поверхностного волнения в присутствии неоднородных течений, которое так же, как и уравнение для одноточечной функции распределения (3.1), представляет собой кинетическое уравнение.

Для статистически однородного стационарного турбулентного течения при отсутствии возмущающих факторов (неоднородных, нестационарных средних значений гидрофизических величин: скорости, плотности, давления) левая и правая части (3.1) обращаются в ноль. В этом случае интеграл столкновений J_p для гауссовской одноточечной и двухточечной функций распределения равен нулю:

$$f_0 = \frac{1}{(2\pi V^2)^{3/2}} \frac{1}{(2\pi \langle \rho'^2 \rangle)^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{(\mathbf{v} - \langle \mathbf{u} \rangle)^2}{2V^2} - \frac{(\lambda - \langle \rho \rangle)^2}{2\langle \rho'^2 \rangle} \right\},$$

аналогичное выражение можно записать и для $f_{02\mathbf{v}}$.

Неоднородность турбулентности и наличие сдвига средней скорости приводят к отклонениям функции распределения от гауссовой: левая и правая части уравнения (3.1) будут отличны от нуля. Если масштаб турбулентности L много меньше характерного масштаба неоднородности осредненных параметров турбулентного потока l , то в системе появляется малый параметр порядка отношения масштаба турбулентности L к характерному внешнему масштабу неоднородности турбулентного потока l : $\mu = \frac{L}{l}$. Будем искать решение (3.1) в виде ряда по μ :

$$f = f_0 + \mu f' + \dots, \quad (3.2)$$

где f_0 – равновесная одноточечная гауссова функция распределения. В 1-м порядке по μ уравнение (3.1) примет вид:

$$\left\{ \frac{\partial f_0}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} - \left(\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial \mathbf{r}} - g \frac{\lambda - \rho_0}{\rho_0} \right) \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} \right\} = I^{(1)}[f_{02\mathbf{v}}, f_0, f'], \quad (3.3)$$

$I^{(1)}$ — ядро интеграла столкновений (т. е. коэффициент в его разложении в окрестности состояния равновесия $f = f_0$). Заметим, что в этом подходе нам не нужно знать точное

выражение для ядра интеграла столкновений. Далее обратимся к так называемой модели временной релаксации.

Следуя (Keller and Wright, 1975), получим "интеграл столкновений" в релаксационном приближении. Рассмотрим вспомогательную задачу, когда равновесной системы имеют специальную форму в виде пространственно-однородных флуктуаций. Уравнение (3.1) принимает вид:

$$\frac{\partial f'}{\partial t} = I^{(1)}[f_{02v}, f_0, f']. \quad (3.4)$$

Линейное интегро-дифференциальное уравнение (3.4) первого порядка имеет решения в виде $f = f_* \exp(-\beta_r t)$. Для таких решений уравнение (3.4) принимает вид $-\beta_r f_* = I[f_{02v}, f_*]$, и, таким образом, оно сводится к задаче о собственных числах и собственных функциях интегрального оператора. Если оператор интегрального уравнения является диагональным, то для любой функции имеем:

$$I^{(1)}[f_{02v}, f_0, f'] = -\beta_r f'.$$

И тогда уравнение (3.3) примет вид:

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} - \left(\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial \mathbf{r}} - g \frac{\lambda - \rho_0}{\rho_0} \right) \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} = -\beta_r f'. \quad (3.5)$$

Следует заметить, что общий вид выражений для вторых и третьих моментов, полученных из (3.5) (см. уравнения 3.6-3.9), не зависит от предположения о диагональности оператора интегрального уравнения. В (Троицкая, 1986) получены выражения, совпадающие с (3.6-3.9) с точностью до коэффициентов, основываясь только на предположениях о малых отклонениях статистики турбулентных пульсаций скорости и плотности от гауссовой и малости параметра $\mu = \frac{L}{l}$. Для входящего в уравнение параметра релаксации справедливо: $\beta_r \simeq \frac{\langle (u')^2 \rangle^{\frac{1}{2}}}{L}$, так как, согласно простым оценкам, $J_p \simeq \frac{f}{\tau}$, где $\tau = \beta_r^{-1} \simeq \frac{L}{u}$ (Островский и Троицкая, 1987; Троицкая, 1986).

Таким образом, в релаксационном приближении $f^{(1)}$ выражается через функцию Гаусса f_0 и ее производные:

$$f^{(1)} = -\beta_r^{-1} \left\{ \frac{\partial f_0}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} - \left(\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial \mathbf{r}} - g \frac{\lambda - \rho_0}{\rho_0} \right) \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} - J_\rho[f_0, f_{02\lambda}] - J_v[f_0, f_{02\mathbf{v}}] + J_D[f_0, f_{02\lambda}] \right\}.$$

При известной функции распределения $f = f_0 + f^{(1)}$ можно найти выражения для всех одноточечных моментов по определению:

$$\langle \rho'^{m_4} \prod_{i=1}^3 u_i'^{m_i} \rangle = \int (f^{(0)} + f^{(1)}) (\lambda - \rho)^{m_4} \prod_{i=1}^3 u_i'^{m_i} (v_i - \langle u_i \rangle)^{m_i} d\mathbf{v} d\lambda.$$

Так, выражения для вторых и третьих моментов в данной модели имеют вид:

- турбулентный поток импульса:

$$\langle u_i' u_j' \rangle = V^2 \delta_{ij} - LV \left(\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_i} \right), \quad (3.6)$$

- турбулентный поток массы:

$$\langle \rho' u_i' \rangle = -LV \left(\frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial x_i} + g_i \frac{\langle \rho'^2 \rangle}{V^2 \rho_0} - \frac{g \beta_i}{V^2 \rho_0} \right). \quad (3.7)$$

При этом турбулентные потоки кинетической энергии и флуктуаций плотности имеют градиентный вид:

$$\left\langle \sum_{j=1}^3 u_j'^2 u_i' \right\rangle = -5LV \frac{\partial V^2}{\partial x_i}, \quad (3.8)$$

$$\langle \rho'^2 u_i' \rangle = -LV \frac{\partial \langle \rho'^2 \rangle}{\partial x_i}. \quad (3.9)$$

Здесь $V \simeq \sqrt{\langle u'^2 \rangle}$ – характерный масштаб скорости, \mathbf{g} – ускорение свободного падения, β_i – компоненты вектора $\boldsymbol{\beta}$, характеризующего пульсации давления в стратифицированной жидкости.

Заметим, что в выражение для потока массы (3.6) входит дополнительное слагаемое $g_i \frac{\langle \rho'^2 \rangle}{V^2 \rho_0} - \frac{g \beta_i}{V^2 \rho_0}$, что приводит к ряду существенных отличий от результатов, полученных в рамках обычных градиентных моделей (Монин и Озмидов, 1981).

Для статистически однородного поля флуктуаций плотности компоненты вектора β имеют вид $\beta_x = \beta_y = 0, \beta_z = \langle \rho'^2 \rangle \cdot R$, где R – параметр анизотропии:

$$R = \begin{cases} 1, & L_z \ll L_r, \\ \approx \left(\frac{L_r}{L_z}\right)^2, & L_z \gg L_r, \end{cases}$$

где L_z, L_r вертикальный и горизонтальный масштабы корреляции поля плотности соответственно.

Физический смысл приведенного выше дополнительного слагаемого можно объяснить следующим образом. Рассмотрим среду с равновесным распределением плотности ρ_0 и флуктуациями. Предположим, что в этой среде возник жидкий объем, и его плотность превышает равновесную, то есть $\rho' > 0$. Он вниз движется по оси z , направленной вверх, со скоростью $w' < 0$. Таким образом, поток массы $\langle \rho' w' \rangle$ отрицательный. В противоположном случае он также будет отрицательным: жидкий объем с плотностью, меньшей плотности среды $\rho' < 0$, будет двигаться вверх по z , со скоростью $w' > 0$. Величина возвращающей силы при этом будет зависеть от формы жидкого объема, а именно, от соотношения его масштабов, что и описывается параметром анизотропии.

Приведенные выражения позволяют получить замкнутую модель турбулентного течения в стратифицированной жидкости в виде уравнений для средних: скорости $\langle \mathbf{u} \rangle$, плотности $\langle \rho \rangle$, а также кинетической энергии турбулентности $k = 3V^2/2$ и дисперсии пульсаций плотности $\langle \rho'^2 \rangle$:

$$\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial t} + \langle u_j \rangle \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} + g_i \frac{\langle \rho \rangle - \rho_0}{\rho_0} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(L\sqrt{k} \left(\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_i} \right) \right), \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} + \langle u_i \rangle \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial x_i} = 2 \frac{\partial}{\partial x_i} L\sqrt{k} \left(\frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial x_i} + \frac{3}{2k\rho_0} (g_i \langle \rho'^2 \rangle + g\beta_i) \right), \quad (3.11)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial k}{\partial t} + \langle u_i \rangle \frac{\partial k}{\partial x_i} - L\sqrt{k} \left(\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_i} \right)^2 - \frac{g}{\rho_0} L\sqrt{k} \times \\ \times \left(\frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial z} + \frac{3g}{2k\rho_0} (\langle \rho'^2 \rangle + \beta_z) \right) + \frac{Ck^{3/2}}{L} = \frac{5}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(L\sqrt{k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right), \end{aligned} \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \rho'^2 \rangle}{\partial t} + \langle u_i \rangle \frac{\partial \langle \rho'^2 \rangle}{\partial x_i} - 2 \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial x_i} L\sqrt{k} \left(\frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial x_i} + (g_i \langle \rho'^2 \rangle - g\beta_i) \frac{3}{2k\rho_0} \right) + \\ + \frac{Dk^{1/2}}{L} \langle \rho'^2 \rangle = \frac{\partial}{\partial x_i} L\sqrt{k} \frac{\partial \langle \rho'^2 \rangle}{\partial x_i}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Заметим, что в уравнениях (3.12) и (3.13) приняты колмогоровские гипотезы для учета диссипативных и диффузионных процессов. При этом скорость диссипации энергии турбулентности ε и турбулентной диффузии ε_D определяются выражениями $\varepsilon = \frac{Ck^{3/2}}{L}$ и $\varepsilon_D = \frac{Dk^{1/2}}{L} \langle \rho'^2 \rangle$, где $C \sim D = 0.09$ – эмпирические константы.

Таким образом, в рамках предложенного в (Островский, Троицкая, 1987) кинетического подхода к описанию турбулентности в стратифицированной жидкости построена замкнутая нестационарная модель турбулентности. Она описывает двустороннее преобразование кинетической и потенциальной энергий турбулентных пульсаций, что приводит к ряду отличий от традиционной полуэмпирической теории (Монин, Яглом, 1965). даже в качественных выводах. Показано, что изотропная турбулентность может поддерживаться сдвигом средней скорости (включая мелкомасштабные внутренние волны) при любых значениях Ri . В частности, отсутствует явление «срыва» турбулентности, при котором в определенных фазах волны сдвиг скорости не может поддерживать ненулевой уровень турбулентной энергии.

Аналогичная модель была предложена в работах (Zilitinkevich et al. 2007; Zilitinkevich et al. 2013) на основе анализа уравнений баланса турбулентных потоков импульса и массы. Полная прогностическая модель основана на уравнениях баланса кинетической энергии турбулентности k , потенциальной Π , и вертикальных турбулентных потоков количества движения τ_{i3} и потенциальной температуры F_z , а также релаксационном уравнении для турбулентного масштаба времени $t_T = lk^{-1/2}$:

$$\frac{Dk}{Dt} - \frac{\partial}{\partial z} K_E \frac{\partial k}{\partial z} = -\tau_{i3} \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial z} + \beta F_z - \frac{k}{t_T}, \quad (3.14)$$

$$\frac{D\Pi}{Dt} - \frac{\partial}{\partial z} K_E \frac{\partial \Pi}{\partial z} = -\beta F_z - \frac{\Pi}{C_P t_T}, \quad (3.15)$$

$$\frac{D\tau_{i3}}{Dt} - \frac{\partial}{\partial z} K_{Fm} \frac{\partial \tau_{i3}}{\partial z} = -2k_z \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial z} - \frac{\tau_{i3}}{C_\tau t_T}; \quad (i = 1, 2), \quad (3.16)$$

$$\frac{DF_z}{Dt} - \frac{\partial}{\partial z} K_{Fh} \frac{\partial F_z}{\partial z} = -2(k_z - 2C_\theta \Pi) \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{F_z}{C_F t_T}, \quad (3.17)$$

$$\frac{Dt_T}{Dt} - \frac{\partial}{\partial z} K_T \frac{\partial t_T}{\partial z} = -C_R \left(\frac{t_T}{t_{TE}} - 1 \right). \quad (3.18)$$

Здесь D/Dt – производная Лагранжа ($D\varphi/Dt = \partial\varphi/\partial t + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\varphi$), K_E , K_{Fm} , K_{Fh} , K_T – коэффициенты турбулентного переноса для энергий и потоков, принимаются пропорциональными K_m ; k_z – вертикальная составляющая кинетической энергии, C_P , C_τ , C_θ , C_F , C_R – эмпирические константы, t_{TE} – равновесное время релаксации.

Следует отметить, что данная модель довольно трудна для численного моделирования, однако она позволяет построить иерархию вариантов турбулентного замыкания различного уровня сложности. Эта модель позволяет рассчитать различные характеристики турбулентности в диапазоне от нейтральной до предельно устойчивой стратификации. При этом из системы (3.14-3.18) следует модель градиентного переноса при условии равновесных вариантов уравнений баланса для турбулентных потоков количества движения и потенциальной температуры. В этом случае:

$$F_z = -K_h \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial z},$$

$$\tau_{iz} = -K_m \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial z},$$

$$K_h = 2C_F k_z t_T \left(1 - C_\theta \frac{\Pi}{k_z} \right),$$

$$K_m = 2C_\tau k_z t_T.$$

Здесь k_z , Π , t_T определяются из уравнений (3.13, 3.14, 3.17), причем $k_z = A_z k$, где $A_z = A_z \left(\frac{\Pi}{k} \right)$ – доля вертикальной составляющей кинетической энергии турбулентности.

3.2. Процедура получения параметризации турбулентного числа Прандтля и модификация турбулентного замыкания

На основе предложенной модели были рассмотрены некоторые примеры взаимодействия турбулентности со сдвиговыми течениями в стратифицированной жидкости и, в частности, исследована эволюция однородной турбулентности в поле течения с постоянным сдвигом скорости. В рамках этой постановки задачи удастся проанализировать влияние взаимной трансформации кинетической и потенциальной энергий в эволюцию турбулентности при больших числах Ричардсона, а также рассчитать зависимость турбулентного числа Прандтля от числа Ричардсона.

Система (3.10-3.13) при указанных предположениях сводится к двум уравнениям для кинетической k и потенциальной $\Pi = \frac{\langle \rho'^2 \rangle g^2}{2N^2 \rho_0^2}$ энергий турбулентности и имеет вид:

$$\frac{dk}{dt} = V_{0z}^2 L \sqrt{k} - N^2 L \sqrt{k} \left(1 - \frac{3\Pi}{k} (1 - R) \right) - \frac{Ck^{3/2}}{L}, \quad (3.19)$$

$$\frac{d\Pi}{dt} = N^2 L \sqrt{\bar{k}} \left(1 - \frac{3\Pi}{k} (1 - R) \right) - \frac{Dk^{\frac{1}{2}}\Pi}{L}. \quad (3.20)$$

Прежде всего, найдем стационарное решение системы (3.19-3.20). При этом значения кинетической и потенциальной энергий:

$$k = k_2 = \frac{V_{0z}^2 L^2}{2C} f(Ri), \quad (3.21)$$

$$\Pi = \Pi_2 = \frac{V_{0z}^2 L^2}{C} - k_2, \quad (3.22)$$

где $f(Ri)$ – функция числа Ричардсона, которая будет приведена далее. Время установления состояния равновесия $t_1 \sim 1/V_{0z}\sqrt{C}$ (см. рисунок 3.1):

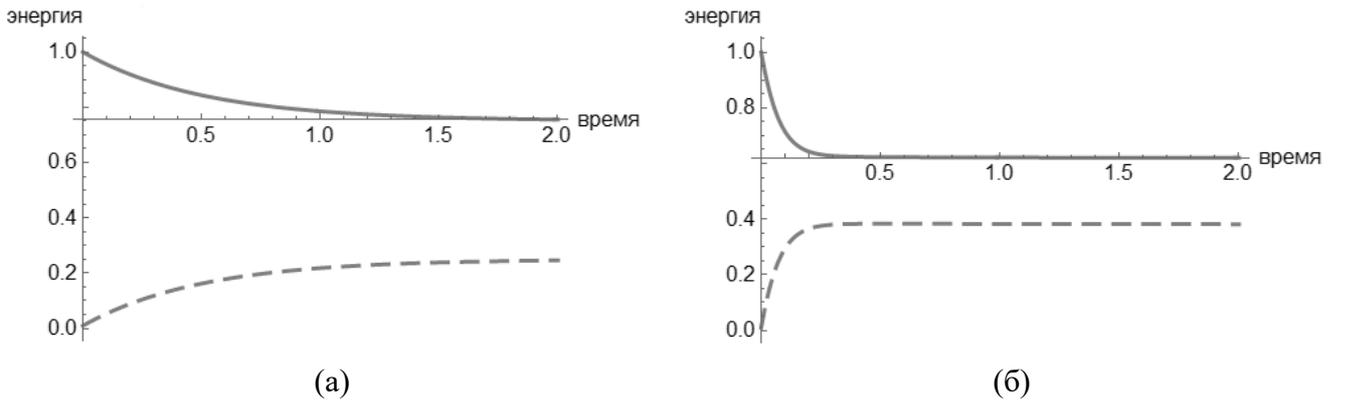


Рис. 3.1. Зависимость безразмерной кинетической $\bar{k} = k/k_x, k_x = (V_{0z})^2 L^2 / C$ (сплошная линия) и потенциальной $\bar{\Pi} = \Pi/\Pi_x, \Pi_x = (V_{0z})^2 L^2 / C$ (пунктирная линия) энергий турбулентности от безразмерного времени $\bar{t} = t/t_x, t_x = 1/V_{0z}\sqrt{C}$ при различных значениях числа Ричардсона Ri : а) $Ri = 0.5$, б) $Ri = 5$. Параметр анизотропии $R = 0.5$ в обоих случаях.

Градиентное слагаемое $(-N^2 L \sqrt{\bar{k}})$ в выражении для потока плавучести описывает переход энергии из кинетической в потенциальную (устойчивая стратификация гасит турбулентность). Дополнительное слагаемое $\left(\frac{3\Pi N^2 L (1-R)}{\sqrt{\bar{k}}} \right) \sim \langle \rho'^2 \rangle$, связанное с неградиентной добавкой в потоке массы, имеет противоположный градиентному знак и описывает обратный переход энергии из потенциальной в кинетическую за счет работы силы плавучести. При этом, если число Ричардсона велико ($Ri \gg 1$) (см. рисунок 3.1), то за время $t_2 \sim \left(\frac{\sqrt{\bar{k}}}{N^2 L} \right) \ll$

t_1 ; ($\frac{t_2}{t_1} = Ri^{-1}$) происходит уравнивание доли энергии турбулентных флуктуаций, переходящей из кинетической в потенциальную и наоборот за счет работы силы плавучести. Это означает, что при больших числах Ричардсона достаточно быстро устанавливается определенное соотношение между кинетической и потенциальной энергиями турбулентности $k = 3\Pi(1 - R)$; при этом дальнейшая эволюция турбулентности не зависит от числа Ричардсона:

$$\frac{dk}{dt} = L\sqrt{k} \frac{3(1-R)}{4-3R} V_{0z}^2 - \frac{k^{\frac{3}{2}}(3(1-R)C + D)}{(4-3R)L}.$$

Приведенные выше результаты позволяют вычислить турбулентное число Прандтля в стационарном состоянии. По определению:

$$Pr_T = \frac{\langle u'_i u'_j \rangle \rho_{0z}}{\langle \rho' u'_i \rangle V_{0z}} = \left(1 - \frac{3\Pi}{k} (1-R) \right)^{-1},$$

При этом из системы (3.21-3.22) получаем возрастающую зависимость числа Прандтля от числа Ричардсона:

$$Pr_T(Ri) = \frac{(4-3R)Ri + 1 + \left(((4-3R)Ri + 1)^2 - 4Ri \right)^{\frac{1}{2}}}{2}. \quad (3.23)$$

Величина $\frac{3\Pi}{k}(1-R)$ связана с переходом части потенциальной энергии в кинетическую, причем при $Ri \gg 1$:

$$Pr_T(Ri) = (4-3R)Ri. \quad (3.24)$$

Отметим, что выражения (3.22-3.23) сохраняют свой вид и в рамках k - ε модели, когда для коэффициента вихревой вязкости используется выражение $K_m = c_\mu \sqrt{k}L$, где $k = \left(\frac{c\varepsilon}{L} \right)^{2/3}$ и, соответственно, для масштаба турбулентности $L = C \frac{k^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon}$. Если при этом воспользоваться традиционной аппроксимацией скорости диффузии турбулентных пульсаций скалярной величины $\langle \zeta'^2 \rangle$ (см., например, (Rodi, 1980)):

$$\frac{\langle \zeta'^2 \rangle}{\varepsilon_\zeta} \cdot \frac{\varepsilon}{k} = R_1,$$

то для скорости диссипации потенциальной энергии турбулентных флуктуаций это можно записать как:

$$\frac{\Pi}{\varepsilon_\Pi} \cdot \frac{\varepsilon}{k} = R_1,$$

Тогда можно воспользоваться выражением $\varepsilon_\Pi = \varepsilon \frac{\Pi}{k}$ при $R_1=1$ (что означает равенство временных масштабов пульсаций скорости и скалярной величины).

Тогда выражения (3.21-3.22) преобразуются к виду:

$$\frac{\varepsilon^2}{k^2} = \frac{V_{0z}^2 C}{2} f(Ri), \quad (3.25)$$

$$\frac{\Pi}{k} = \frac{2(1 - f(Ri))}{f(Ri)}. \quad (3.26)$$

Аналогичная параметризация может быть получена из балансных уравнений, как это сделано в работах (Zilitinkevich et al. 2007; Zilitinkevich et al. 2013). Рассматриваем ту же задачу об эволюции однородной турбулентности в устойчиво стратифицированном стационарном сдвиговом потоке с заданным профилем скорости. Турбулентный режим такой жидкости описывается системой уравнений первого порядка по времени, имеющей два состояния равновесия: неустойчивое $\Pi = k = 0$ типа центр и устойчивое с ненулевым значением энергетического параметра стратификации $E_s = \Pi/k$, определяемым соотношением:

$$E_s(Ri) = \frac{C_p \frac{C_F}{C_\tau} \left(1 - C_\theta \frac{E_s(Ri)}{A_z(E_s)}\right) Ri}{1 - \frac{C_F}{C_\tau} \left(1 - C_\theta \frac{E_s(Ri)}{A_z(E_s)}\right) Ri}, \quad (3.27)$$

$$A_z(E_s) = \frac{E_{s\infty} \left(C_r - 3 \frac{E_s}{C_p}\right) (C_p + E_s) - 2C_r C_0 (C_p + E_{s\infty}) E_s}{3E_{s\infty} (1 + C_r) (C_p + E_s) - 2C_r (1 + C_0) (C_p + E_{s\infty}) E_s}, \quad (3.28)$$

где $E_{s\infty}$ - предельное значение параметра, равное 0.287.

Так, из определения турбулентного числа Прандтля и выражений, приведенных выше, получаем:

$$Pr_T(Ri) = \frac{C_p Ri \left(1 + \frac{E_s(Ri)}{C_p}\right)}{E_s(Ri)}. \quad (3.29)$$

Для нахождения $Pr_T(Ri)$ по (3.29) с учетом (3.27-3.28) использовался оптимальный по Кунгу-Траубу трехшаговый метод восьмого порядка, свободный от производных, разработанный автором и приведенный в Приложении Б. Классические итерационные методы оказались неприменимы для решения соответствующего нелинейного уравнения ввиду многозначности функции $Pr_T(Ri)$: она имеет как положительные, так и отрицательные значения, однако из эмпирических соображений нас интересует только положительная ветвь функции.

На рисунке 3.2 приведены графики зависимостей энергетического параметра стратификации (E_s), доли вертикальной составляющей кинетической энергии турбулентности (A_z) и турбулентного числа Прандтля (Pr_T) от градиентного числа Ричардсона (Ri) согласно EFB-модели (Zilitinkevich et al. 2007; Zilitinkevich et al. 2013).

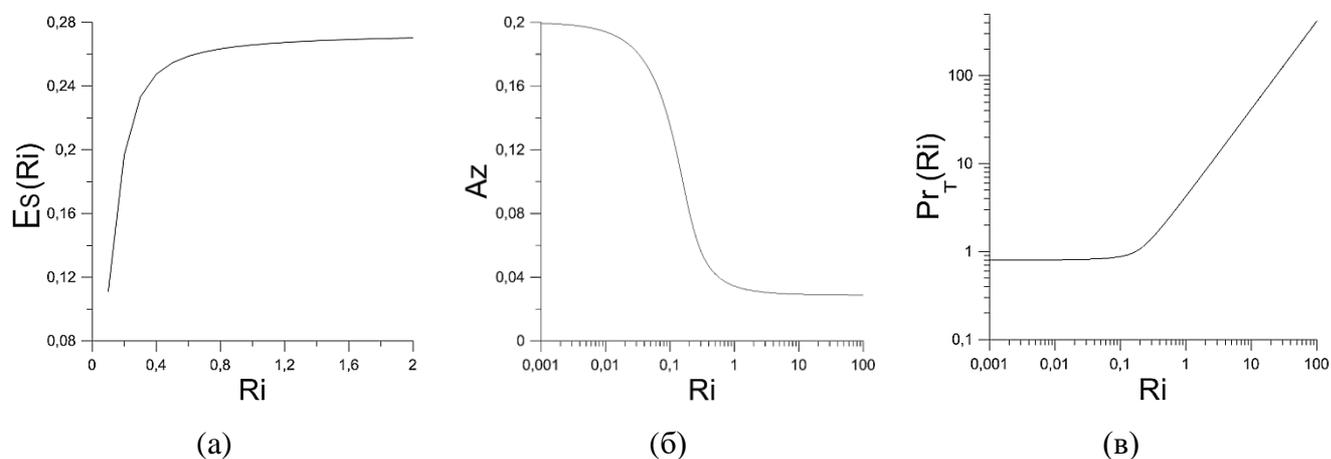


Рис. 3.2. Зависимости от градиентного числа Ричардсона (Ri) для а) энергетического параметра стратификации, б) доли вертикальной составляющей кинетической энергии турбулентности, в) турбулентного числа Прандтля.

На рисунке 3.3 приведена зависимость турбулентного числа Прандтля от градиентного числа Ричардсона согласно модели (Zilitinkevich et al. 2007; Zilitinkevich et al. 2013) и аналогичной модели (Островский и Троицкая, 1987) со значениями параметра $R = 0.3$ и $R =$

0.5. Видно, что $Pr_T(Ri)$ является неограниченно возрастающей функцией, причем при больших $Ri \gg 1$ число Прандтля растет по линейному закону.

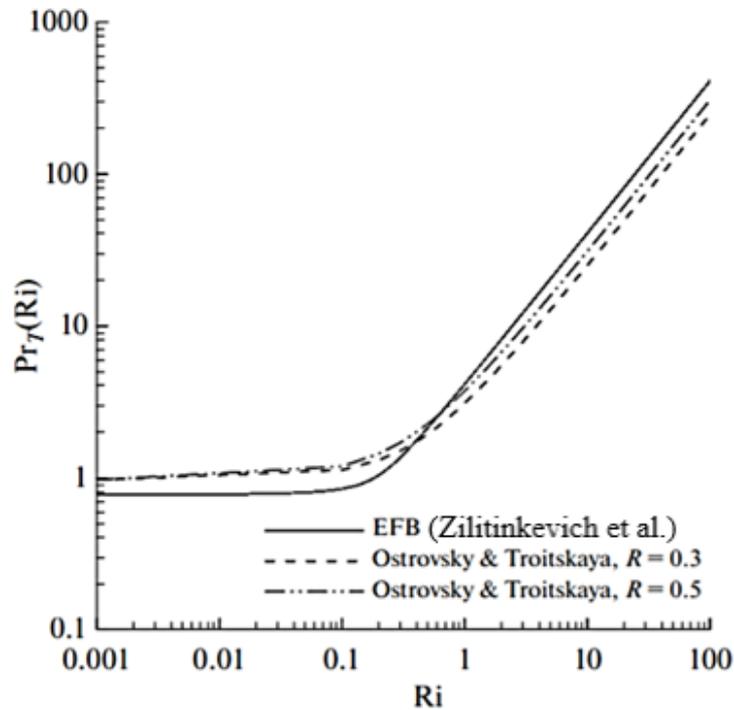


Рис. 3.3. Зависимость турбулентного числа Прандтля от градиентного числа Ричардсона.

Выше показано, что параметризации, представленные выражениями (3.23) и (3.9) эквивалентны, при этом версия замыкания (Островский и Троицкая, 1987) имеет более простую программную реализацию, не требующую привлечения новых итерационных методов.

Для оценки влияния предложенной параметризации на описание процессов перемешивания во внутренних водоемах использовалась трехмерная численная модель термогидродинамики, основой которой является осредненная по Рейнольдсу система уравнений в приближении Буссинеска и гидростатики (Mortikov, 2016; Mortikov et al., 2019; Гладских и др., 2021). Подробнее эта модель будет описана в Главе 5. Для расчета коэффициентов вертикального турбулентного обмена используется стандартное k - ε замыкание, описанное системой (2.4-2.7).

Заметим, что для однородного и стационарного турбулентного потока с учетом выражений для источников энергии турбулентности P и B из (2.5) следует выражение:

$$C_{1\varepsilon} V_{0z}^2 - C_{3\varepsilon} N^2 \left(1 - \frac{3\Pi}{k} (1 - R) \right) = \frac{C_{2\varepsilon}}{C} \frac{\varepsilon^2}{k^2}.$$

Учитывая формулы (3.25) для ε^2/k^2 и (3.26) для Π/k , выражающие эти величины через градиентное число Ричардсона Ri , получим, что константы k - ε модели не являются независимыми, а связаны соотношением, зависящим от Ri :

$$C_{1\varepsilon} - C_{3\varepsilon} Ri \left(1 - \frac{6(1-f(Ri))}{f(Ri)} (1-R) \right) = \frac{C_{2\varepsilon}}{C_2} f(Ri).$$

В частности, учитывая асимптотику функции $f(Ri)$ при $Ri \rightarrow \infty$, получим соотношение между константами вида:

$$C_{1\varepsilon}(4-3R) - C_{3\varepsilon} = 3C_{2\varepsilon}(1-R).$$

Эта особенность учитывалась при выборе констант k - ε -модели, использованной при проведении расчетов.

В качестве выражения для турбулентного числа Прандтля в выражении (2.7) использовалась зависимость (3.23), и (2.7) в модифицированном замыкании принимает вид:

$$K_h = \left(\frac{(4-3R)Ri + 1 + \left(((4-3R)Ri + 1)^2 - 4Ri \right)^{\frac{1}{2}}}{2} \right)^{-1} \cdot K_m. \quad (3.30)$$

3.3. Оценка влияния параметризации на процессы перемешивания

Для оценки влияния предложенной параметризации были использованы две конфигурации модели: идеализированная постановка (водоем с прямоугольным сечением, постоянной скоростью и направлением ветра, пренебрежение эффектами коротковолновой радиации) и конфигурация модели для финского озера Куйварви. В обоих случаях сравнивались результаты, полученные при использовании стандартного замыкания и с применением параметризации. Для стандартного замыкания турбулентное число Прандтля – соотношение между коэффициентами турбулентной вязкости и диффузии – было задано постоянным, в модифицированном использовалось выражение (3.23).

В идеализированной постановке использовались параметры, характерные для реальных озер и водохранилищ: глубина 10 метров, температура поверхности 20°C с начальным градиентом $\partial T / \partial z = 1.5^\circ\text{C}/\text{м}$, частота Брента-Вяйсяля (частота плавучести): $N = 4 \cdot 10^{-2} \text{с}^{-1}$.

Значение турбулентного числа Прандтля в стандартном замыкании полагалось равным $Pr_{T_0} = 1.25$. Такое значение согласуется с оценками Pr_{T_0} при $Ri \approx 0$ по данным лабораторных исследований и прямого численного моделирования (Li, 2019; Kays, 1994) и, как правило, используется в расчетах циркуляции во внутренних водоемах с нейтральной (или близкой к ней) стратификацией (см., например, (Goudsmit et al., 2002)).

На рисунке 3.4.показаны профили кинетической энергии турбулентности в различные дни расчета в идеализированной постановке, а на рисунке 3.5 – профили вертикального градиента температуры.

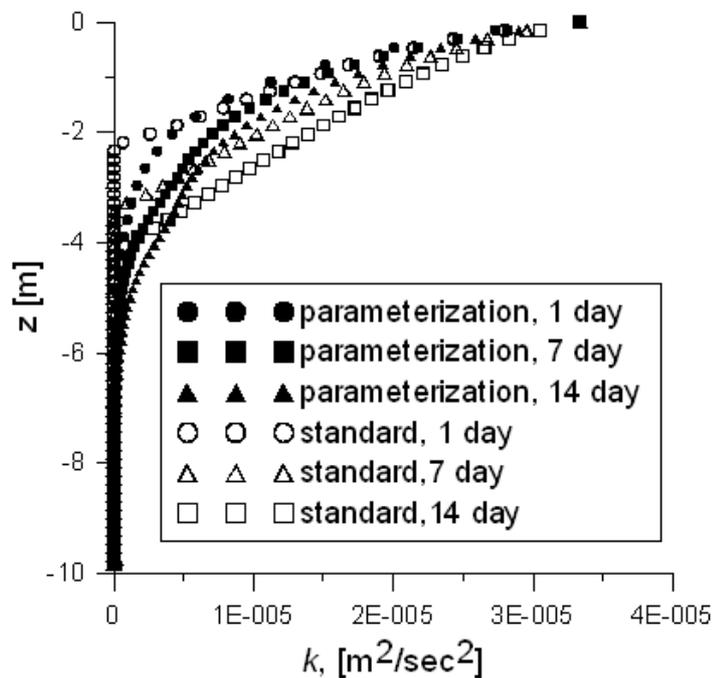


Рис. 3.4. Вертикальное распределение кинетической энергии турбулентности в разные дни расчета с помощью стандартной и модифицированной схем перемешивания в численном эксперименте с идеализированной постановкой (использовалось значение параметра анизотропии, равное 0.2).

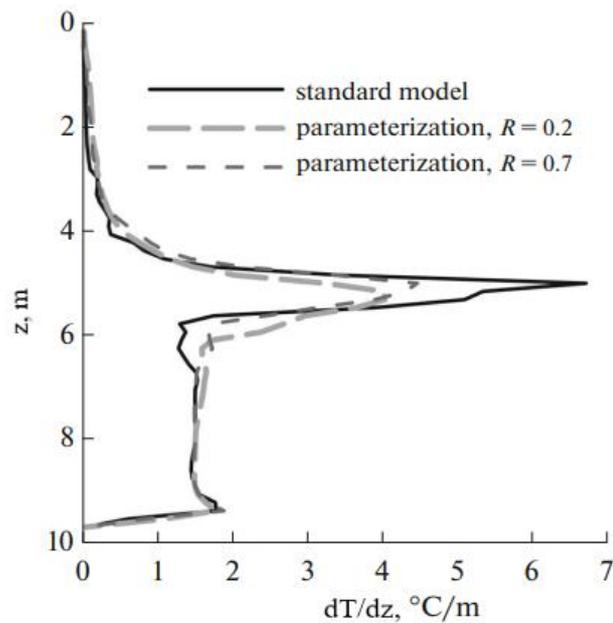


Рис. 3.5. Вертикальное распределение градиента температуры на 14 расчетный день с помощью стандартной и модифицированной схем перемешивания в численном эксперименте с идеализированной постановкой.

На примере озера Куйваярви было исследовано влияние параметризации перемешивания в случае реальных водных объектов. В этой постановке использовались реальные данные атмосферного форсинга (компоненты скорости ветра, потоки коротковолновой радиации, явного и скрытого тепла), полученные путем натуральных измерений в 2013 году (Nordbo et al. 2011, Heiskanen et al. 2015, Mammarella et al. 2015). Был выбран период в 1 сутки в июне, когда за счет интенсивного потока тепла возникали большие значения градиентного числа Ричардсона. При этом в случае использования стандартной модели турбулентность ниже термоклина подавлялась силами плавучести, а молекулярной диффузии было недостаточно для переноса через термоклин. В тоже время для модернизированной модели, учитывающей рост числа Прандтля за счет роста коэффициента турбулентного переноса K_m при больших значениях Ri , перенос энергии через термоклин существовал (Рис. 3.6, Рис 3.7).

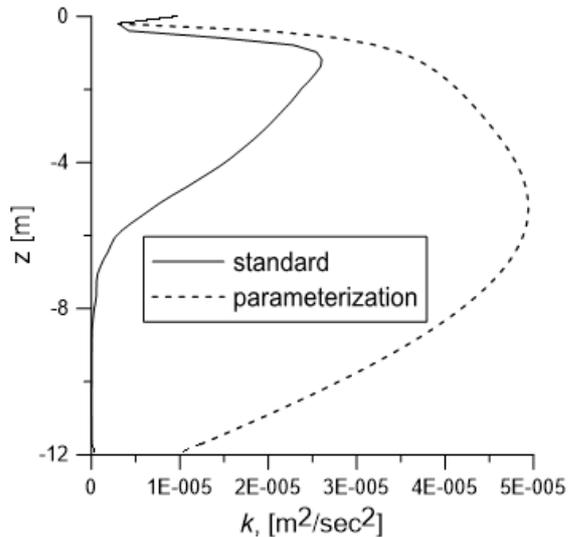


Рис. 3.6. Вертикальное распределение кинетической энергии турбулентности в зависимости от схемы перемешивания в численном эксперименте с привлечением натуральных данных озера Куйваряви.

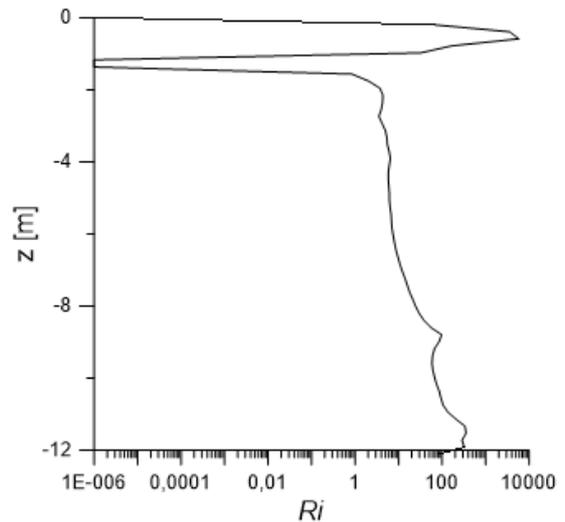


Рис. 3.7. Вертикальный профиль градиентного числа Ричардсона в численном эксперименте с привлечением натуральных данных озера Куйваряви.

3.4. Выводы по Главе 3.

Результаты расчетов с применением модифицированной модели показывают чувствительность перемешивания к параметризации $Pr_T(Ri)$. В процессе численного эксперимента число Ричардсона значительно меняется в диапазоне от ~ 0.001 до $\sim 100-1000$, достигая больших значений уже на небольшой глубине. При этом кинетическая энергия плавно меняется по всей области перемешивания. Важно подчеркнуть, что учет параметризации приводит к сглаживанию всех резких изменений в вертикальных распределениях турбулентной кинетической энергии, градиента температуры и толщины слоя скачка. Полученные результаты связаны с особенностями данной параметризации, из которой следует существование турбулентности при значениях $Ri \gg 1$.

Изменение входных данных при расчете (значение атмосферного форсинга, параметра анизотропии) также влияют на характерные параметры перемешивания. Но эти изменения ожидаемы и не носят принципиального характера для данной модели: меняется время формирования скачка температуры.

Расчеты по стандартной модели с постоянным значением числа Прандтля предполагают наличие критического значения динамического (поточкового) числа Ричардсона, в окрестности которого теряют смысл ряд гипотез полуэмпирической теории турбулентности (Монин и Яглом, 1965).

Следует отметить, что чувствительность численной схемы к используемой параметризации $Pr_T(Ri)$ (особенно в области больших градиентов) представляется важной в задачах воспроизведения концентраций пассивных примесей во внутренних водоемах и описания газообмена с атмосферой. На примере озера Куйваярви показана принципиальная роль параметризации при расчете термодинамики водоема в условиях сформировавшегося термоклина. Показано, что за счет увеличения коэффициента турбулентной диффузии происходит значительное проникновение мелкомасштабной турбулентности ниже термоклина.

Полученные результаты интересны как с точки зрения получения параметризации на основе моделей, учитывающих двустороннюю трансформации турбулентной энергии, и модификации турбулентного замыкания, так и с точки зрения необходимости использования модифицированной схемы в численных моделях внутренних водоемов, в частности, при расчете сезонной и межгодовой динамики.

Уточненный подход к описанию мелкомасштабной турбулентности может быть также применен к задачам, связанным с исследованиями турбулентности в океане и атмосфере.

Глава 4. Исследование сезонности ледяного покрова крупных озер и водохранилищ Русской равнины и его климатических трендов по данным спутников JASON-1,2,3, TOPEX/Poseidon и SARAL

4.1. Алгоритм выявления периодов ледостава и вскрытия льда из анализа яркостных температур

Для моделирования и прогнозирования гидрологических характеристик внутренних водоемов, например, термического режима, необходима процедура задания стартового распределения, эволюция которого будет исследоваться с помощью математических моделей. Подобные данные могут быть получены экспериментально, либо на основе предположения о том, что в большинстве средних и крупных водоемов средней полосы России температурный профиль после вскрытия льда представляет собой 4°C по всей глубине. При этом остается открытым вопрос определения конкретных временных рамок установления периода открытой воды. Спутниковые методы наблюдений за ледяным покровом имеют преимущества, связанные с глобальным охватом, мгновенными наблюдениями за большими акваториями и относительно низкой стоимостью. Однако их использование методов для внутренних водоемов часто ограничено их пространственным разрешением, сравнимым или превышающим размеры водоемов. Спутники с приборами высокого пространственного разрешения часто имеют большие периоды повторения (ICESat), либо качество данных сильно зависит от погодных условий (Landsat). В связи с этим большой интерес представляет использование спутников Jason-1, 2, оснащенных двухчастотными (13,6 ГГц и 5 ГГц) радиолокационными высотомерами и трехканальными (18, 21 и 37 ГГц) микроволновыми радиометрами, т.к. диаметр зоны охвата их высотомеров в Ku-диапазоне составляет около 10 км, а период повторяемости наблюдений – десять дней, что делает их пригодными для наблюдения за крупными и средними внутренними водоемами.

Метод распознавания льда и открытой воды по данным альтиметрических спутников был первоначально разработан для спутника Topex/Poseidon в (Kougaev et al., 2003) и успешно применялся для Каспийского, Аральского и других морей, а также Онежского озера и Байкала (Kougaev et al., 2003; Kougaev et al., 2008). Этот метод основан на совместном анализе двух параметров: коэффициента обратного рассеяния на частоте 13,6 ГГц и среднего значения значений яркостной температуры на частотах 18 и 37 ГГц. Вывод о ледовом режиме можно сделать, когда эти параметры превышают определенный порог. Режимы открытой воды и льда/снега демонстрируют два отчетливых кластера на двумерных гистограммах, показывающих коэффициент обратного рассеяния в Ku-диапазоне (13,6 ГГц) в зависимости от среднего значения яркостной температуры на частотах 18 и 37 ГГц.

На рисунке 4.1 представлены двумерные сезонные гистограммы наблюдений Jason-2 в Ku-диапазоне в зависимости от среднего значения яркостной температуры на частотах 18,7 и 34 ГГц. Показано, что метод хорошо работает для крупных водоемов, таких как Рыбинское и Цимлянское водохранилища, и испытывает значительные трудности для средних водоемов, таких как Горьковское, Куйбышевское, Саратовское и Волгоградское водохранилища. Во многом это связано с малым количеством достоверных данных по коэффициенту обратного рассеяния для не очень крупных водоемов, что обусловлено влиянием суши на форму отраженных альтиметрических импульсов.

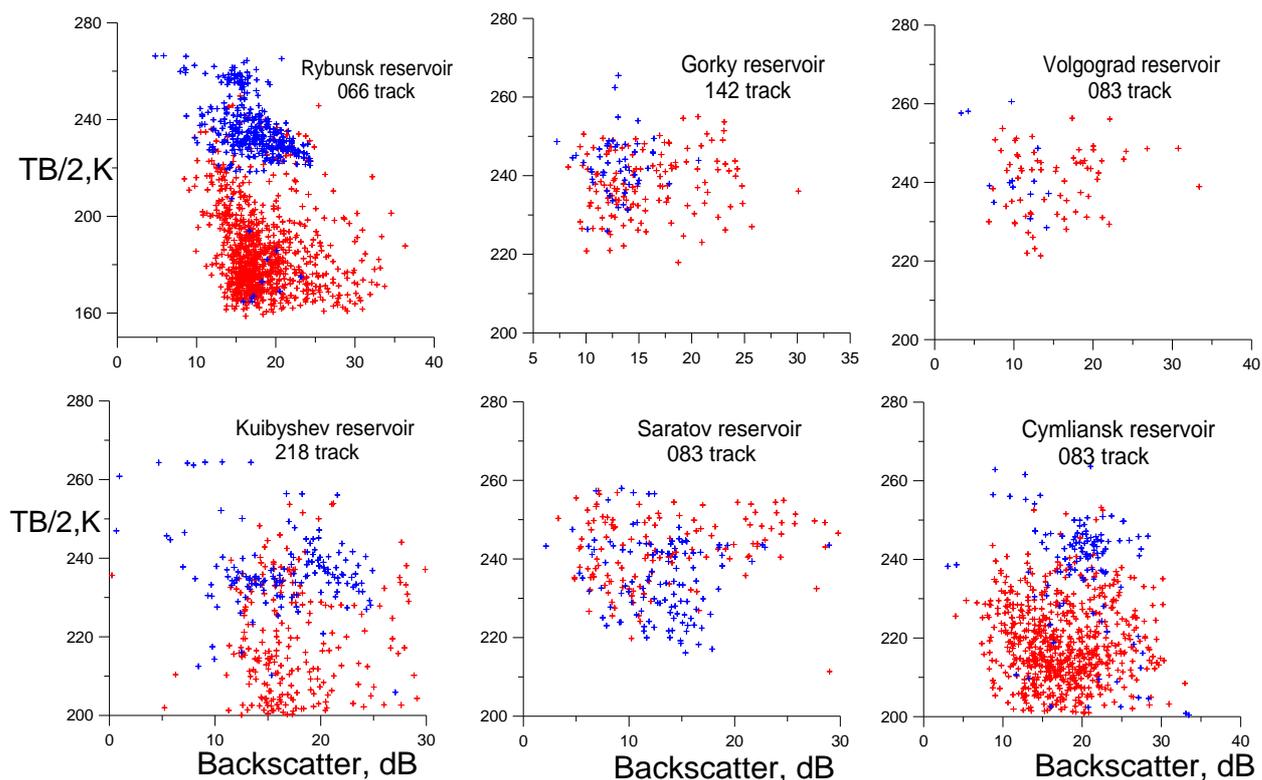


Рис. 4.1. Коэффициент обратного рассеяния (диапазон Ku) в зависимости от среднего значения яркостной температуры (TB/2) на частотах 18,7 и 34 ГГц для летнего (красный) и зимнего (синий) сезонов.

Для средних водоемов предпочтительным является метод (Rybushkina et al., 2013a; 2013b), основанный на анализе разницы яркостных температур суши и воды. В основе данного метода определения дат ледостава и весеннего вскрытия озер и водохранилищ лежит эффект значительного отличия диэлектрических констант и излучательной способности твердой поверхности (включая почву, снег, лед) и открытой воды (см. таблицу 4.1), вызывающий значительные вариации яркостной температуры (т.е. интенсивности принимаемого излучения) вдоль трека, проходящего над водным объектом. При этом учитывается, что излучение от поверхности воды сильно отличается от излучения от суши даже при одинаковой термодинамической температуре за счет сильного отличия излучательной способности воды и

земли (почвы, растительности): поверхность льда имеет гораздо более высокую яркостную температуру, чем поверхность воды, что позволяет их различить.

Таблица 4.1 Значения диэлектрических констант и излучательной способности.

	Диэлектрическая постоянная для 18.7 ГГц	Излучательная способность для 18.7 ГГц	Диэлектрическая постоянная для 34 ГГц	Излучательная способность для 34 ГГц
Чистая вода	60+35 i	0.37	20+33 i	0.43
Чистый лед	3.1+0.001 i	0.92	3.1+0.001 i	0.92

Яркостная температура, измеренная спутниковым радиометром в надир, выражается следующей формулой:

$$T_B = T_{surf} \varepsilon_e e^{-\tau(0,H)} + T_{atm_{down}} (1 - \varepsilon_e) e^{-\tau(0,H)} + T_{atm_{up}},$$

где ε_e – излучательная способность поверхности, T_{surf} – термодинамическая температура поверхности, $T_{atm_{down}}$ и $T_{atm_{up}}$ выражаются как:

$$T_{atm_{down}} = \int_0^H T(z) \alpha(z) e^{-\tau(0,z)} dz,$$

$$T_{atm_{up}} = \int_0^H T(z) \alpha(z) e^{-\tau(z,H)} dz,$$

а $\tau(z_1, z_2) = \int_{z_1}^{z_2} \alpha(z) dz$ – оптическая толщина слоя атмосферы от z_1 до z_2 .

Для неоднородной поверхности с переменной излучательной способностью и термодинамической температурой (как для внутреннего водоема и окружающей среды) яркостная температура, принимаемая на спутнике, движущемся в направлении x со скоростью v , может быть рассчитана как функция координаты вдоль трассы спутника vt :

$$T_B^i = \iint_S T_B(x - vt, y) G(x, y) dS.$$

Здесь $G(x, y)$ – диаграмма направленности приемной антенны радиометра.

Разница излучательной способности воды и земли настолько велика, что снижение яркостной температуры на водоеме проявляется в принимаемом сигнале даже для небольших водоемов, ширина которых значительно меньше контура диаграммы направленности антенны. Преимуществом альтиметрических данных является то, что сигнал представлен с разрешением 5 км, и снижение яркостной температуры будет зафиксировано и для «узких» водоемов. Это иллюстрируют оценки изменения по трассе яркостной температуры, которые были сделаны для двух примеров водоемов: Горьковского (15 км, «узкое») и Рыбинского (60 км, «широкое») водохранилищ. Ширина диаграммы направленности антенны: 50 км. На рис. 4.2 и 4.3 показано изменение яркостной температуры на 18.7 и 34 ГГц вдоль трека, пересекающего Рыбинское и Горьковское водохранилища. Очевидно, что модель работает хорошо и демонстрирует выраженное изменение яркостной температуры вдоль трассы, когда поверхность воды свободна ото льда вода. При расчетах принималась излучательная способность для воды 0.37, для суши 0.82. Зимой в присутствии льда на поверхности воды и снежного покрова на суше излучательные способности поверхности озера и земли близки. Тогда изменение яркостной температуры вдоль трассы спутника незначительно. Это подтверждается формой сигнала, полученной на спутнике Jason-2 для Горьковского и Рыбинского водохранилищ. Соответствующий ледовый режим подтверждается изображением в видимом диапазоне, полученным со спутника Landsat.

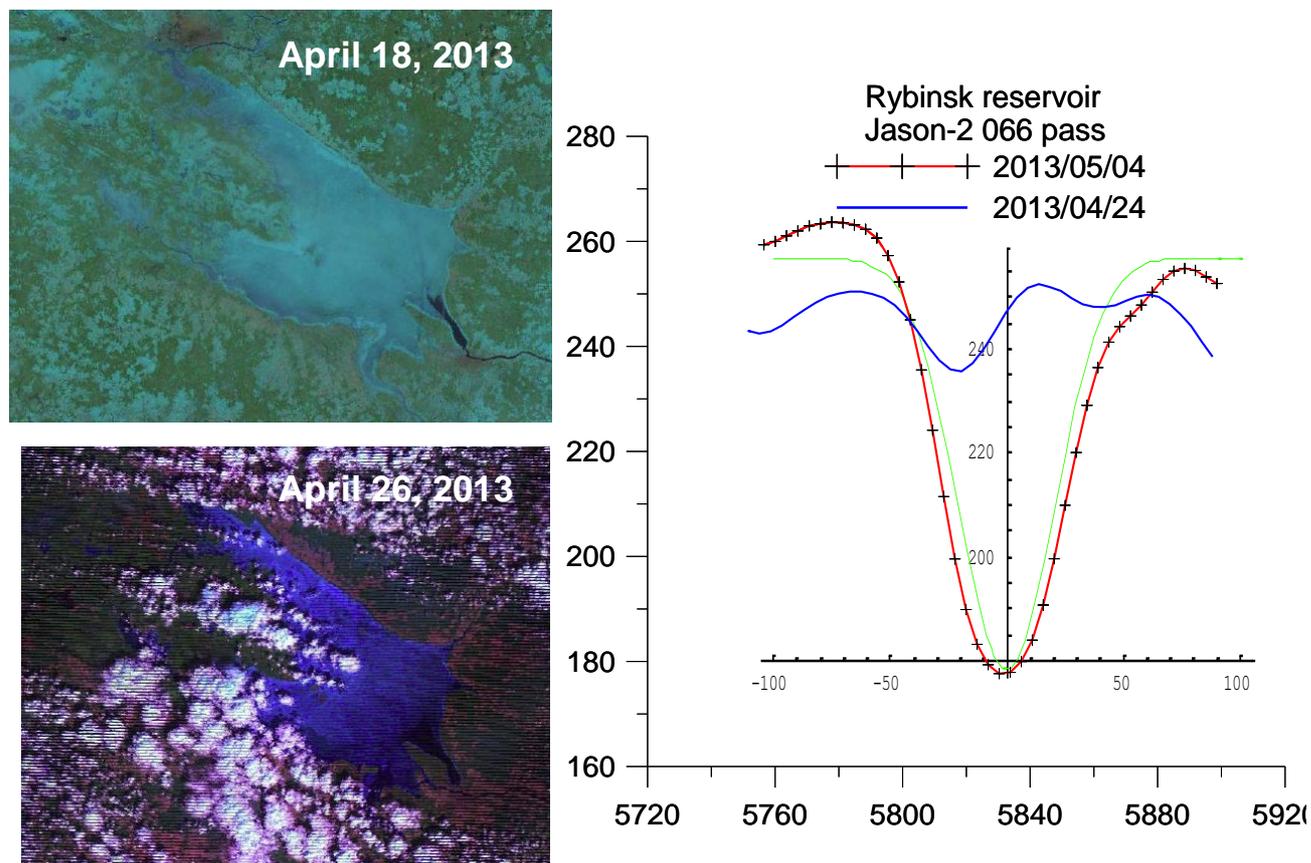


Рис. 4.2. Изменение яркостной температуры на 18.7 и 34 ГГц вдоль трека Jason-2, пересекающего Рыбинское водохранилище 18 и 26 апреля 2013 г. Зеленой линией обозначен аналитический результат по формулам выше.

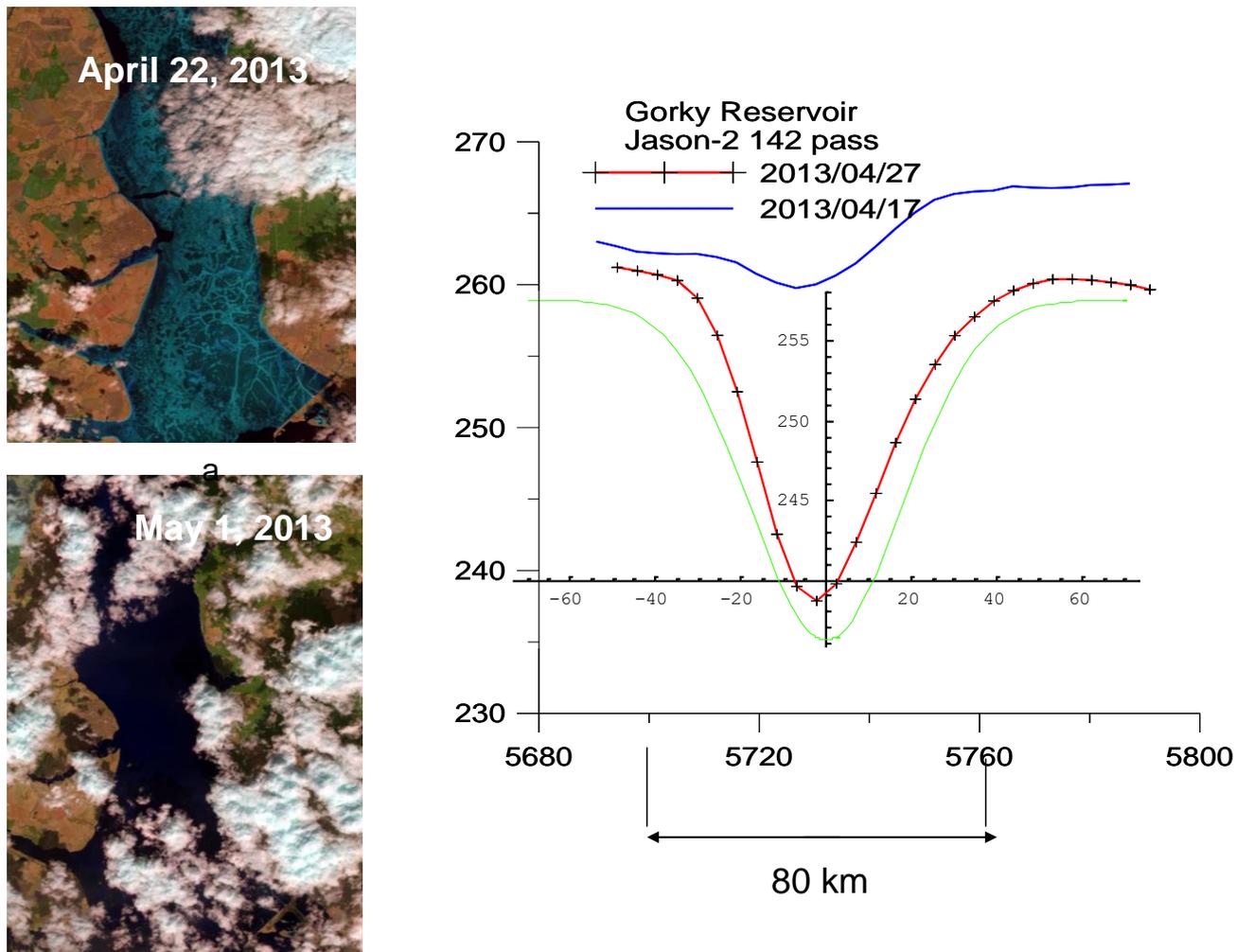


Рис. 4.3. Изменение яркостной температуры на 18.7 and 34 ГГц вдоль трека Jason-2, пересекающего Горьковское водохранилище 22 апреля и 1 мая 2012 г. Зеленой линией обозначен аналитический результат по формулам выше.

Вариации средней яркостной температуры вдоль трассы спутника были изучены для пяти водохранилищ на Волге и одного водохранилища на реке Дон. Треки спутников Jason-1 и Jason-2, пересекающие исследованные водохранилища, показаны на рисунке 4.4

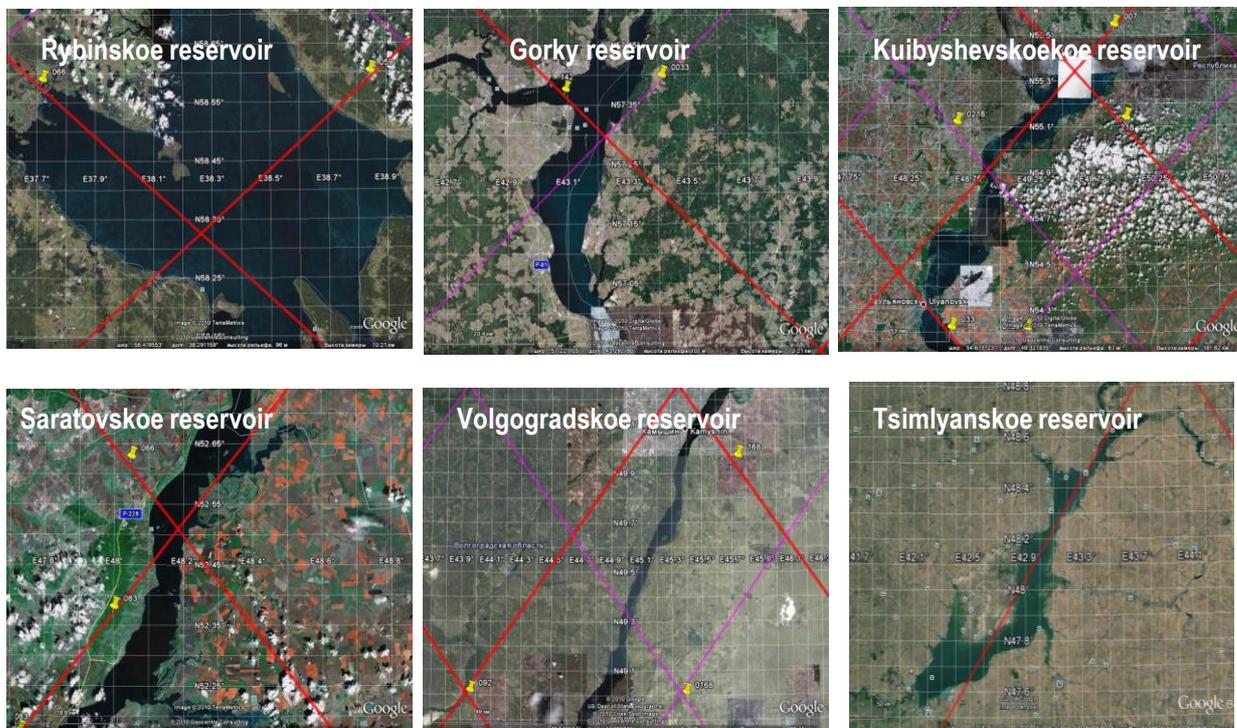


Рис. 4.4. Треки спутников Jason-1 и Jason-2, пересекающие водохранилища на реках Волга и Дон.

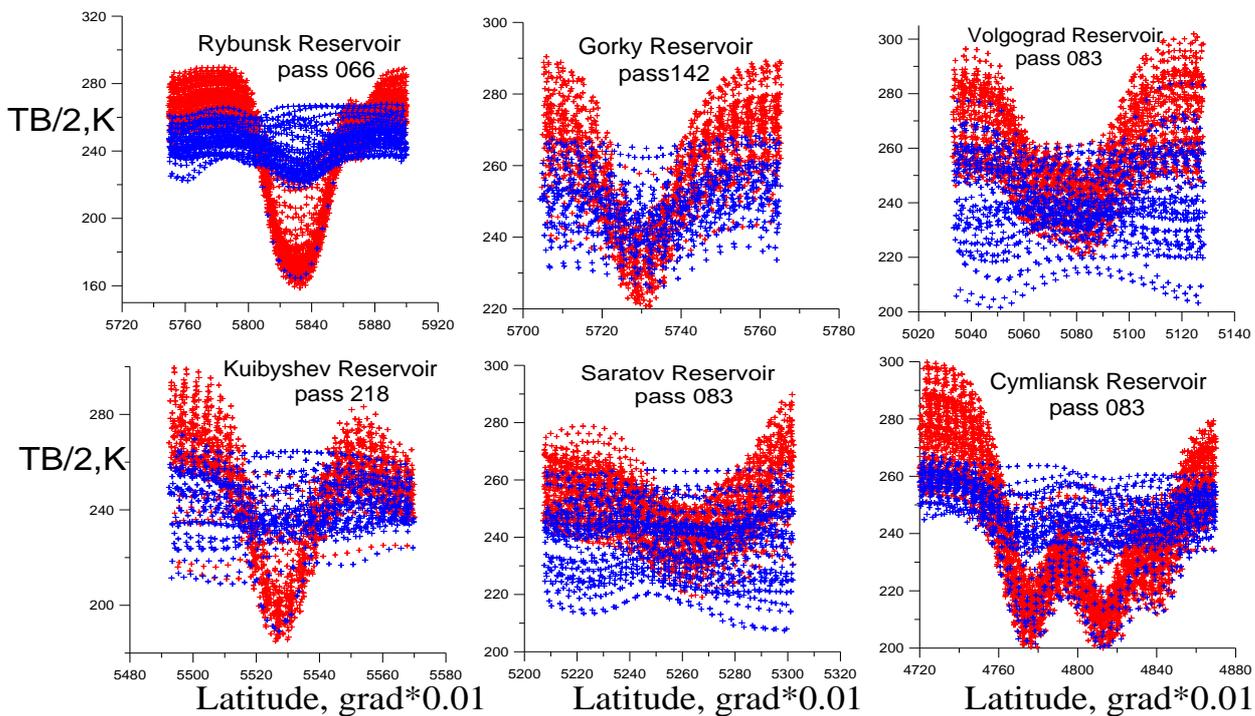


Рис. 4.5. Изменение средней яркостной температуры ($TB/2$) вдоль трека Jason-2 на частотах 18,7 и 34 ГГц летом (обозначено красным) и зимой (обозначено синим). Спады на летних кривых соответствуют акватории.

На рисунке 4.5 показаны вариации средней яркостной температуры вдоль трека на частоте $18,7$ и 34 ГГц $TB / 2 = (TB_{18,7} + TB_{34}) / 2$ летом (красный) и зимой (синий) для шести

водохранилищ. Очевидны сильное изменение яркостной температуры в отсутствие льда и слабая зависимость в присутствии льда.

Был предложен простой алгоритм для определения времени осеннего замерзания и весеннего таяния на основе этих результатов. Временные ряды разницы максимальной и минимальной яркостных температур на частоте 34 ГГц по данным Jason-2 представлены на рисунке 4.6 для шести водохранилищ. Даты смены ледового режима выражены как резкие скачки этой величины. Для проверки применимости алгоритма были сопоставлены времена таяния и замерзания, полученные из спутниковых данных, с данными наземных наблюдений по отчетам Российского регистра гидротехнических сооружений. В отчетах имеются специальные отметки о датах некоторых событий, таких как «замерзание», «блинчатый лед», «полюнья», «таяние» и т. п. На рисунке черные символы соответствуют явлениям, сопровождающим осеннее замерзание, оранжевые - явлениям, сопровождающим весеннее таяние.

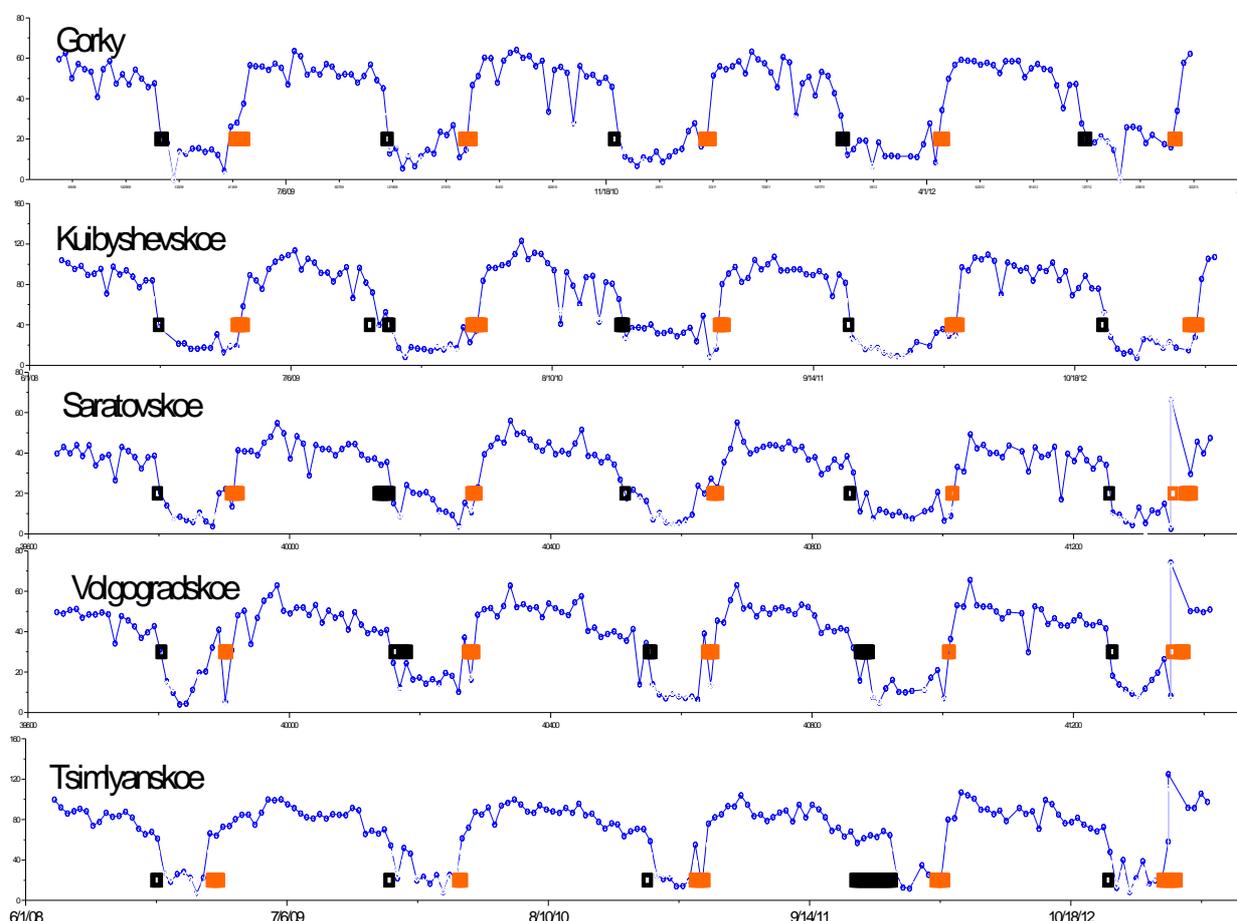


Рис. 4.6. Временные ряды разницы максимальной и минимальной яркостных температур на частоте 34 ГГц по данным Jason-2 и отмеченные наблюдаемые ледовые явления, такие как «замерзание», «блинчатый лед», «полюнья», «таяние» и др. по данным Российского Регистра гидротехнических сооружений.

Помимо Jason и Torex/Poseidon, с 2013 года стала доступна еще одна альтиметрическая миссия - SARAL/AltiKa. У этого спутника другая изомаршрутная программа, а данные имеют

более высокое разрешение (2 км). Измерительный модуль SARAL включает в себя систему сбора информации Argos-3 и радарный высотометр AltiKa (Ка-диапазон, 35.75 ГГц). На рисунке 4.7 показаны треки SARAL \ AltiKa для Рыбинского, Горьковского; Куйбышевского и Саратовского водохранилищ. Изменение яркостной температуры вдоль трека спутника SARAL при пересечении водохранилищ в летний и зимний периоды имеют те же закономерности, как и для Jason-1,2: большая разность летом, малая – зимой в присутствии льда (см. рисунок 4.8).

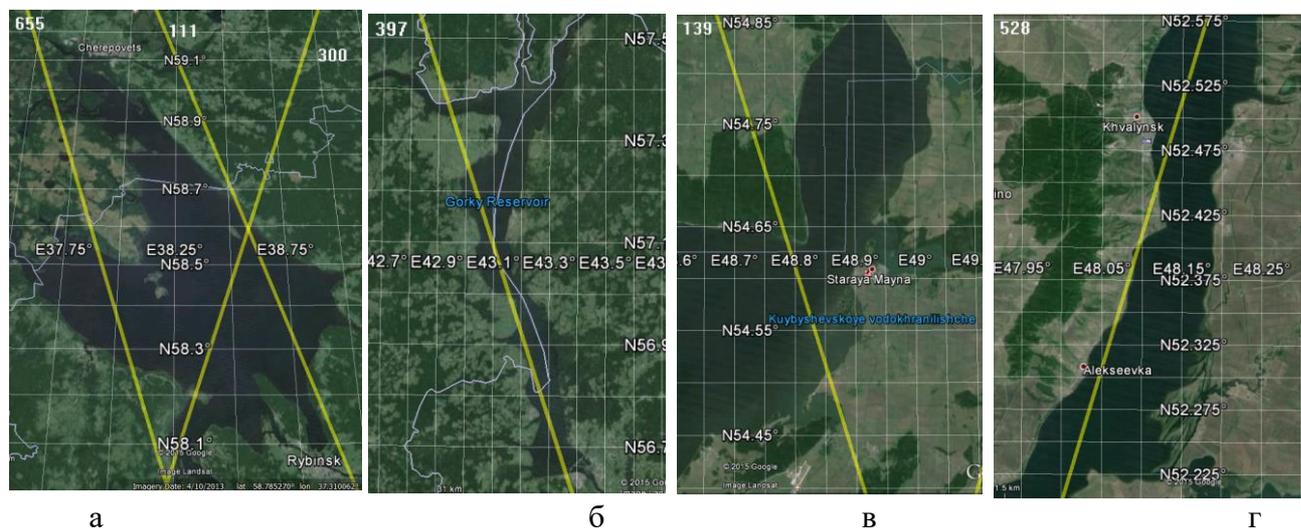


Рис. 4.7. Треки SARAL \ AltiKa для (а) Рыбинского водохранилища, (б) Горьковского водохранилища, (в) Куйбышевского водохранилища, (г) Саратовского водохранилища.

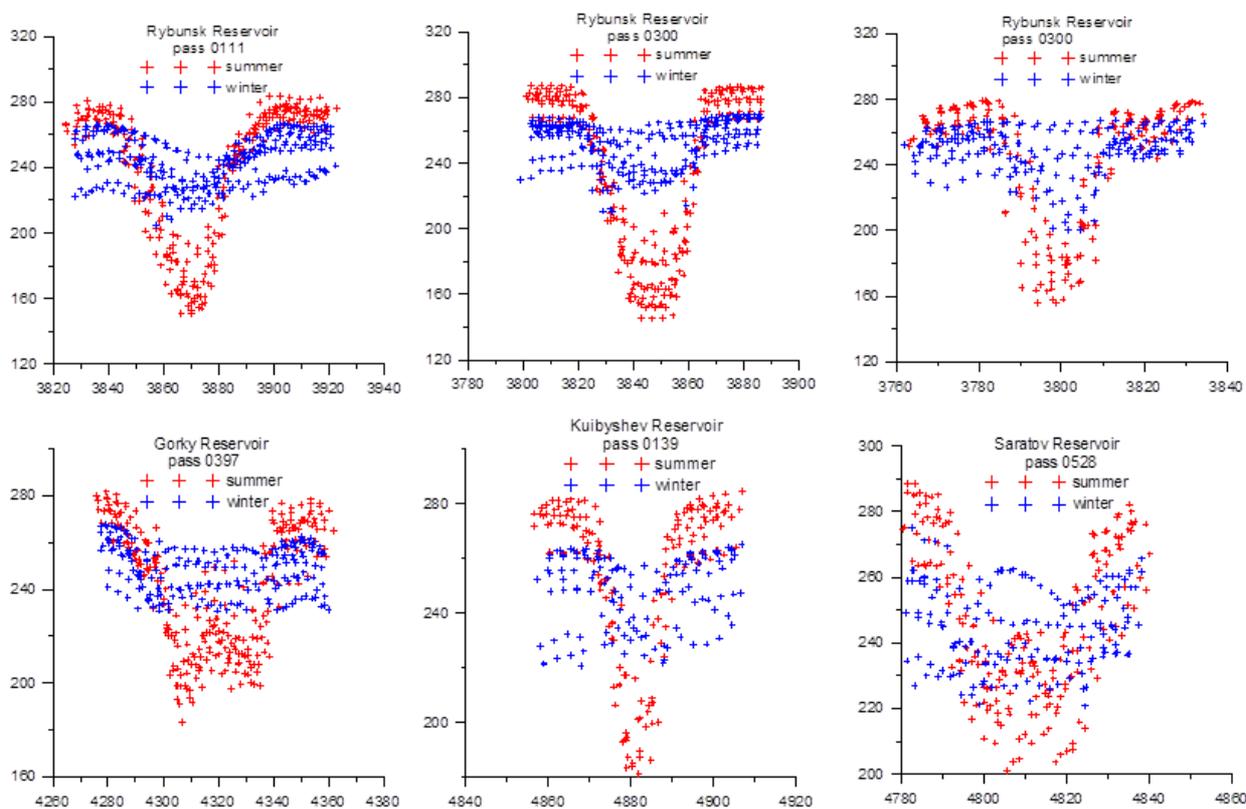


Рис. 4.8. Изменение яркостной температуры вдоль трека спутника SARAL при пересечении водохранилищ в летний (обозначен красным) и зимний (обозначен синим) периоды.

Анализ временных рядов разности яркостных температур, построенных по данным спутника SARAL для четырех волжских водохранилищ, показал, что поведение разницы максимальной и минимальной яркостных температур на частоте 34 ГГц позволяет судить о замерзании водоема и согласуется с данными собственного ледового индикатора (ice_flag) спутника SARAL (рис. 4.9)

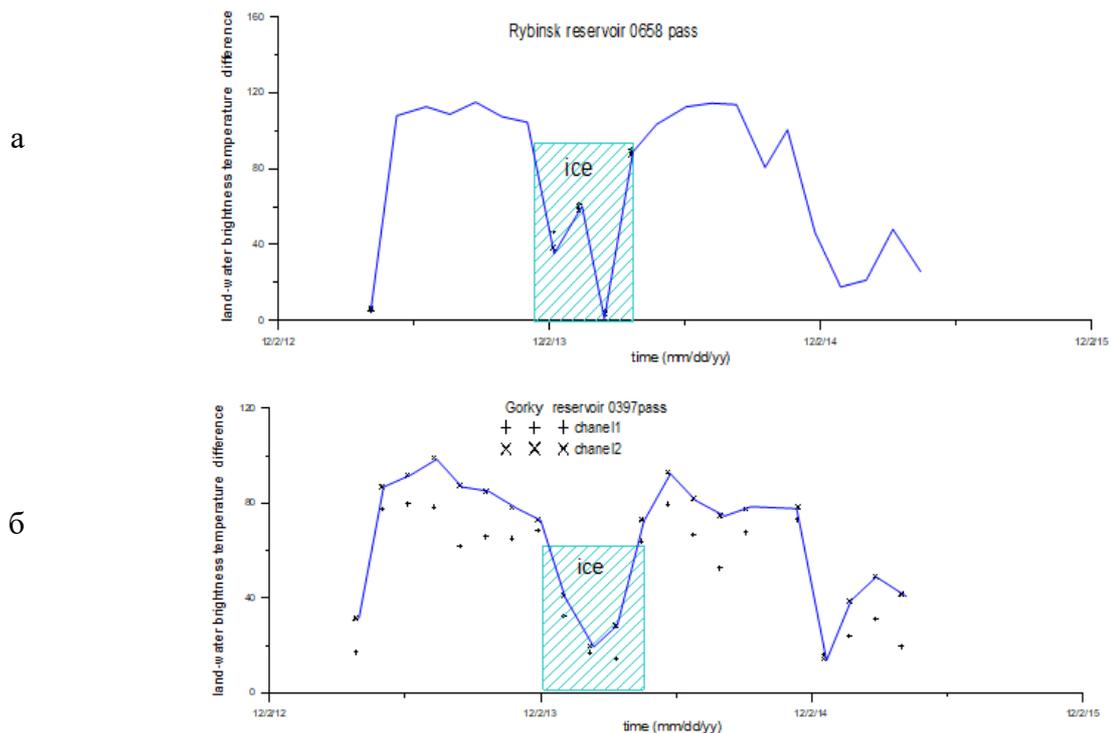


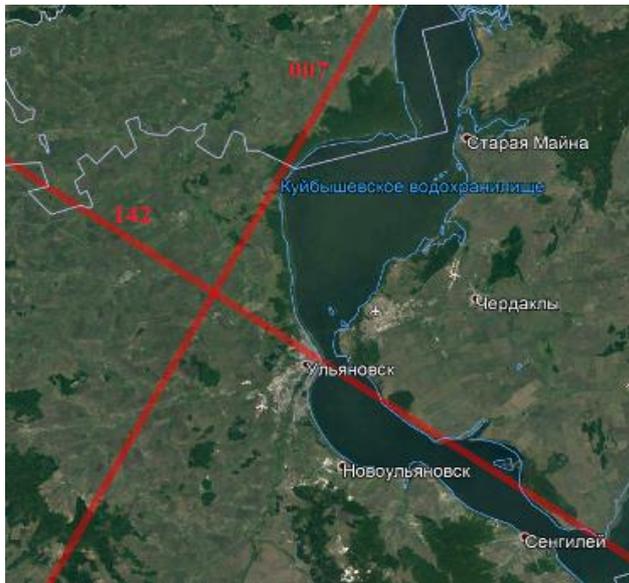
Рис. 4.9. Разность яркостной температуры суши и воды по данным спутника SARAL для (а) Рыбинского водохранилища (трек 0658); (б) Горьковского водохранилища (трек 0397).

4.2. Сопоставление результатов расчетов ледовых характеристик крупнейших водоемов Русской равнины с натурными данными Российского Регистра Гидротехнических Сооружений и выявление климатических трендов

Для проверки применимости алгоритма были выбраны объекты, для которых длины треков, проходящих по акватории водоема, превосходят 10 км (в 2 раза превышает шаг зондирования). В перечень вошли: Кумское водохранилище, Онежское озеро, Ладожское озеро, Чудское озеро, Камское водохранилище, Рыбинское водохранилище, Куйбышевское

водохранилище, Горьковское водохранилище, Шекснинское водохранилище, озера: Нюк, Кожозеро, Сегозеро, Эндозеро, Тулос, Ондозеро, Выгозеро. Для восстановления данных о времени замерзания, периоде ледостава и времени вскрытия льда использовались данные трехканального радиометра (18.7, 23.8 и 34.0 ГГц), устанавливаемого на спутниках для компенсации эффектов, связанных с влиянием атмосферного поглощения на альтиметрические измерения.

Граничные точки трека определялись путем наложения данных с сайта Aviso Altimetry на электронную карту Google Earth (см. рисунок 4.10)). Для анализа использовались точки трека, лежащие внутри определенных границ, а также по две точки за границей с каждой стороны. При этом рассчитывалась разность между максимальным и минимальным значением яркостных температур для каждого зондирования из архива, содержащего данные с 1992 по 2017 г.г. (с 1992 по 2002 использовались данные полученные Torex/Poseidon, с 2002 по 2017 - данные Jason 1, 2, 3; дополненные с 2013 года данными SARAL).



а



б

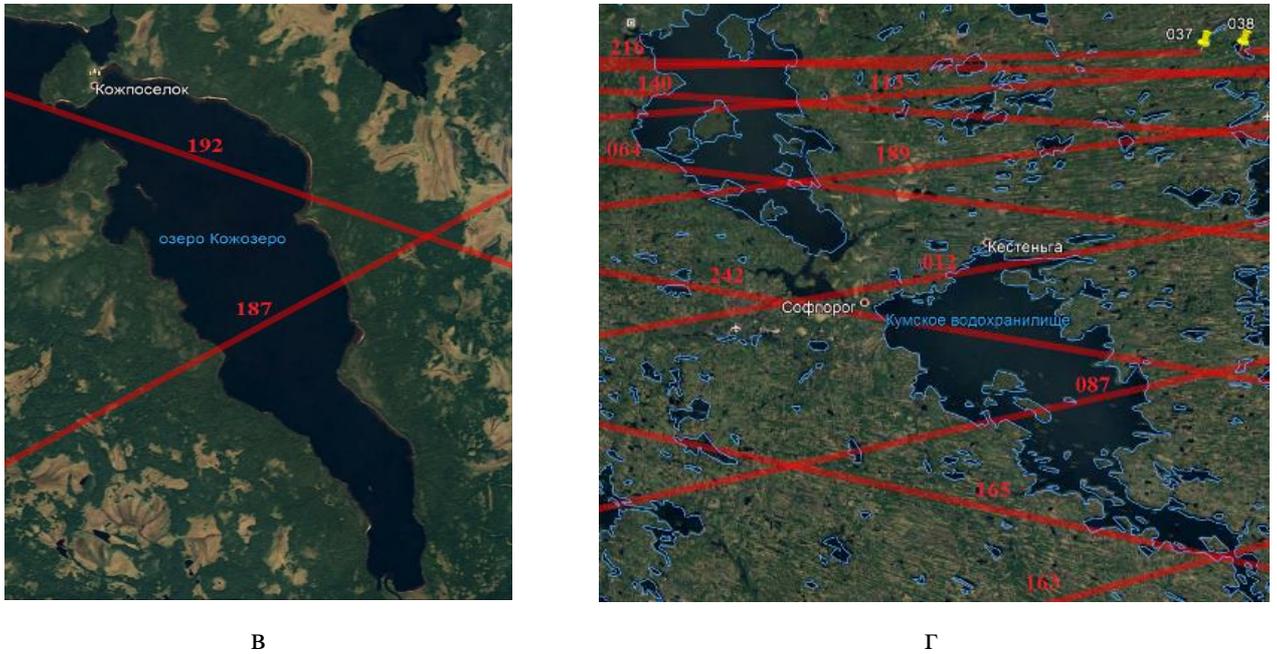


Рис. 4.10. Треки спутников Торех/Poseidon и JASON проходящие через а) Куйбышевское водохранилище, б) Ладожское озеро, в) озеро Кожозеро (Карелия), г) Кумское водохранилище (Карелия).

Информация, полученная с помощью расчетов, была сопоставлена с данными гидропостов для тех водоемов, на которых они есть. Также были определены тренды, позволяющие делать предположения о сроках замерзания и вскрытия льда в последующие годы:

1. для Горьковского водохранилища:

$$Y_{freezing} = -0.319 \cdot X + 44224.538;$$

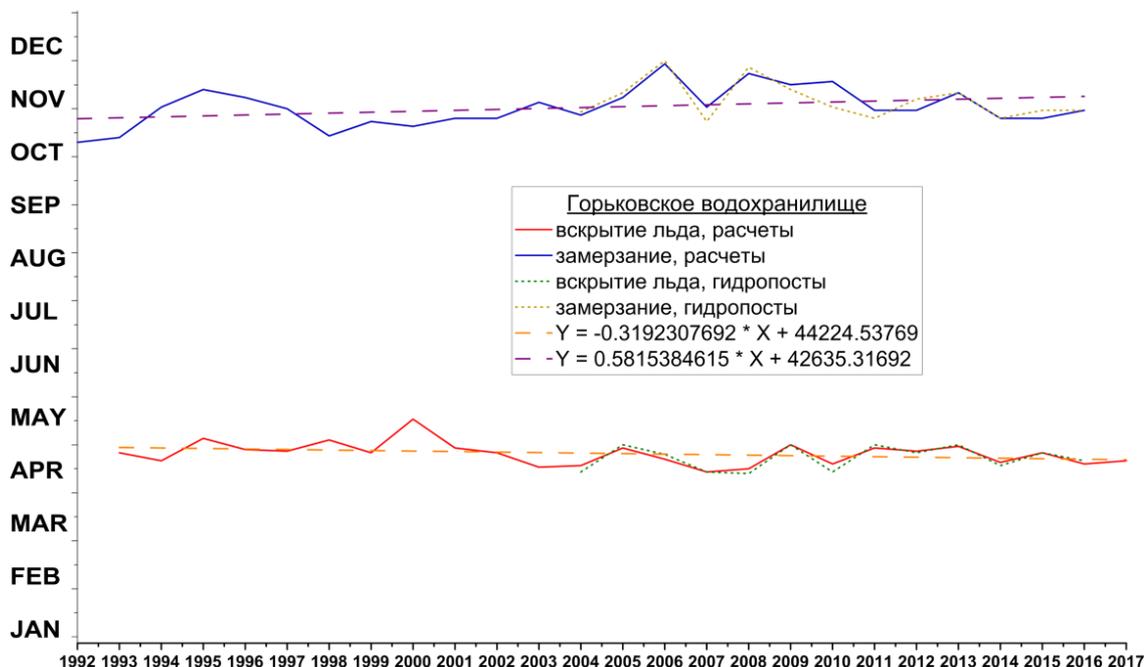
$$Y_{breaking} = 0.518 \cdot X + 42635.317;$$

2. для Куйбышевского водохранилища:

$$Y_{freezing} = -0.513 \cdot X + 44612.319;$$

$$Y_{breaking} = 0.758 \cdot X + 42283.803.$$

Результаты представлены на рисунке 4.11.



а



б

Рис. 4.11 Результаты расчетов периодов замерзания и вскрытия льда с 1992 по 2017 гг. для Горьковского (а) и Куйбышевского (б) водохранилищ по яркостной температуре с привлечением спутниковых данных, сопоставление с данными гидропостов, определение трендов.

Сопоставление с данными наземных наблюдений, взятых с сайта Информационной системы по водным ресурсам и водному хозяйству бассейнов рек России (ИАЦ Регистра и Кадастра), подтвердили хорошую точность метода: сравнение с данными Российского Регистра Гидротехнических Сооружений дает коэффициент корреляции выше 0.9. (рисунок 4.12).

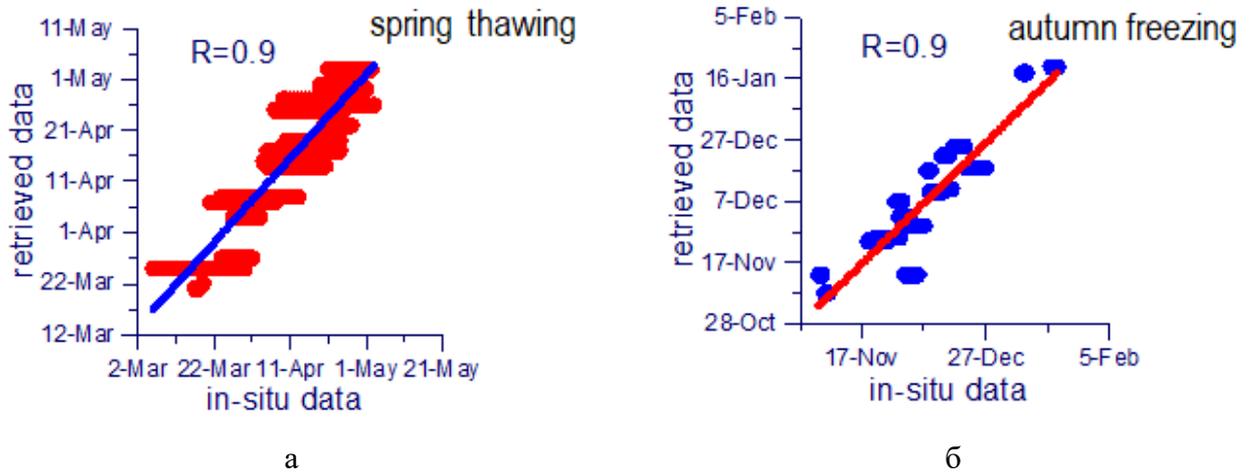


Рис. 4.12. Корреляция спутниковых и натуральных данных Российского Регистра Гидротехнических Сооружений

Зависимости времен замерзания и вскрытия льда, полученные за весь исследуемый период, показали наличие климатического тренда к более позднему замерзанию и более раннему вскрытию, и, как следствие, сокращению времени ледостава (см. рисунок 4.13).

Также были получены следующие выражения для линейных трендов продолжительности ледостава:

1. для Горьковского водохранилища:

$$Y_{ice} = -0.9 \cdot X + 1952.91;$$

95% доверительный интервал (-1.56; -0.23);

2. для Куйбышевского водохранилища:

$$Y_{ice} = -1.27 \cdot X + 2692.01;$$

95% доверительный интервал (-1.96; -0.58);

3. для Ладожского озера:

$$Y_{ice} = -1.08 \cdot X + 2116.42;$$

95% доверительный интервал (-1.79; -0.17);

4. для Рыбинского водохранилища:

$$Y_{ice} = -0.38 \cdot X + 911.86;$$

95% доверительный интервал (-1.33; 0.57),

т.е. в отличие от остальных водных объектов, для Рыбинского водохранилища тренд не является статистически значимым.

Следует отметить, что данные с гидропостов имеются далеко не для всех водоемов (в основном для крупных), а по точечным измерениям трудно судить о характере ледовой обстановки на всей поверхности водоема. Поэтому результаты, полученные на основе данных дистанционного зондирования, позволили улучшить представления о ледовых режимах внутренних водоемов.

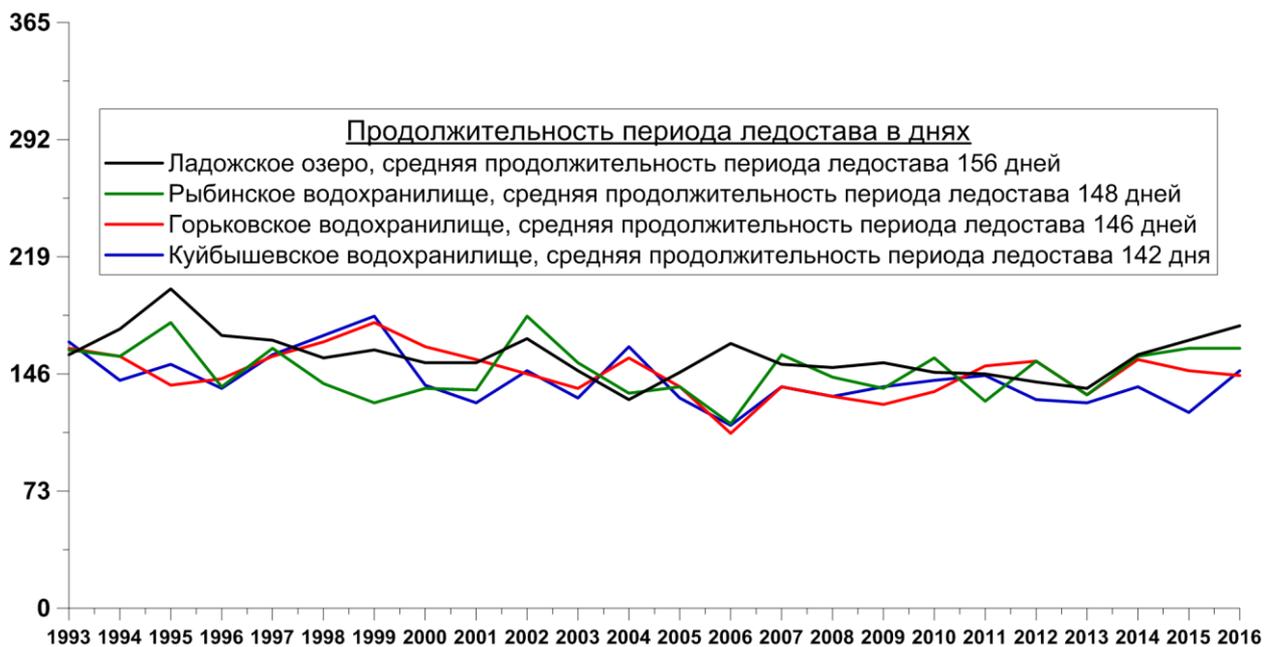


Рис. 4.13. Продолжительность периода ледостава в днях для четырех водных объектов по данным расчетов разностей яркостных температур.

4.3. Выводы по Главе 4.

Предложен простой метод определения времени замерзания и вскрытия внутренних водоемов, основанный на анализе изменения яркостных температур, регистрируемых радиометром альтиметрических спутников при их движении.

Показано, что даже для относительно небольших внутренних водоемов (порядка 5 км шириной) характер этих зависимостей имеет ярко выраженные сезонные изменения. Переход из зимнего режима в летний достаточно резкий, что позволяет определить периоды замерзания и таяния с точностью плюс-минус 5 суток.

Сравнение спутниковых данных с натурными данными Российского Регистра Гидротехнических Сооружений <http://gis.waterinfo.ru> подтверждают применимость

предложенного метода определения время замерзания и вскрытия внутренних водоемов среднего размера.

Анализ временных рядов разности яркостных температур, построенных по данным спутника SARAL для четырех волжских водохранилищ, показал, что поведение этой величины позволяет судить о замерзания водоема и согласуется с данными собственного ледового индикатора (ice_flag) спутника SARAL

Зависимости времени замерзания и вскрытия льда, полученные за весь исследуемый период (1992–2017 гг.), продемонстрировали наличие климатического тренда к более позднему замерзанию и более раннему вскрытию, и, как следствие, сокращению времени ледостава на 10-15 суток за 25 лет.

Информация о климатическом тренде и временные рамки смены ледовых режимов, полученные с помощью данных дистанционного зондирования, могут быть использованы для задания стартового температурного распределения сразу после вскрытия льда при моделировании и прогнозировании гидрологических характеристик внутренних водоемов без привлечения дополнительных измерений.

Глава 5. Разработка трехмерной численной модели биохимических процессов во внутренних водоемах

5.1. Краткие сведения о биогеохимии парниковых газов, их производстве и потреблении.

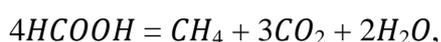
Водоемы суши представляют собой природные системы, чувствительные к изменениям климата и при этом играющие непосредственную роль в этих изменениях. В значительной степени такое двустороннее влияние определяется биохимическими примесями, среди которых особую роль играют растворенные газы, в частности, парниковые: метан и углекислый газ.

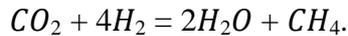
Основной источник углекислого газа в воде - это разложение органического вещества - как аллохтонного (поступающего с водосбора), так и автохтонного (продуцируемого в самом водоёме) происхождения. При этом диоксид углерода будет конечным продуктом разложения как при аэробной, так и при анаэробной деструкции. Его содержание в воде оказывает значительное влияние на карбонатное равновесие, ключевым показателем которого является рН. При значениях рН близких к нейтральным диоксид углерода будет представлен в виде растворенного газа, из-за чего может наблюдаться его эмиссия в атмосферу. При более высоких значениях рН, близких к слабощелочным, возможно поступление углекислого газа из атмосферы в водную толщу, так как такие значения водородного показателя свидетельствуют об активном фотосинтезе, при котором растворенный углекислый газ потребляется водорослями и фитопланктоном.

Основной источник метана в водной толще - это анаэробное разложение органического вещества в грунтах: донные отложения содержат мертвый органический материал для переработки археями (*Archaea, Methanoarchaea*) – прокариотными организмами, у которых нет клеточного ядра. Метан является побочным продуктом их метаболизма. Метаногенная среда должна иметь анаэробной и содержать не менее 50% воды, именно поэтому метан активно образуется именно в водоемах и заболоченных территориях. Даже небольшое наличие кислорода в придонных горизонтах может ингибировать деятельность архей (Gruca-Rokosz and Tomaszek, 2015).

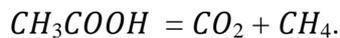
В работе (Степаненко, 2018а) описаны основные механизмы образования метана: водородотрофный, ацетокластический и метилотрофный.

В водородотрофном образовании метана участвуют археи-гидротрофы, которые используют в качестве источника энергии водород, а в качестве источника углерода – углекислый газ. При реакции этих веществ происходит восстановление CO_2 до CH_4 при участии атомов водорода (Hedderich and Whitman, 2006):





Другие же археи в качестве источника углерода используют уксусную кислоту, их тип метаболизма называется ацетотрофным. Уксусная кислота в водоемах образуется за счет деятельности гомоацетогенных бактерий (Diekert and Wohlfarth, 1994). Механизм метаногенеза, основанный на расщеплении уксусной кислоты, носит название ацетокластического:



В метилотрофном образовании метана участвуют метаногены, использующие метилированные соединения (например, метанол или метиламин – органическое производное аммиака). Этим механизмом можно пренебречь при описании пресноводных экосистем (Borrel et al., 2011).

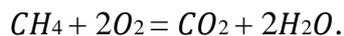
Как правило, для верхней части донных отложений преобладает ацетокластический путь метанообразования, а для более глубоких слоев основной вклад начинает вносить гидрогенотрофный (водородотрофный), и его доля увеличивается с глубиной донных осадков. В озере Байкал почти 100% метана генерируется за счет ацетокластического механизма (Dagurova et al., 2004), а в Боденском озере – за счет водородотрофного (Schulz et al., 1997).

Важным фактором, влияющим на образование метана, является температура среды, поскольку она оказывает влияние на метаболизм архей: так, оптимальное значение температуры для этих микроорганизмов составляет 20-42 градуса Цельсия (Zeikus and Winfrey, 1976; Schulz et al., 1997), то есть выше средних значений температуры в озерных экосистемах. При этом повышение температуры за счет прогрева поверхности с последующим перемешиванием и формированием однородного по глубине температурного профиля вызывает усиление метаногенеза в донных отложениях.

Метан, образованный в донных отложениях, может поступать к поверхности воды в виде двух основных составляющих потока: диффузионного и пузырькового. Диффузионный поток имеет достаточно низкую скорость и зависит, прежде всего, от градиента концентрации растворенного в воде метана по глубине. Главное отличие пузырьковой составляющей потока метана состоит в том, что он достигает поверхности значительно быстрее диффузного и не подвержен окислению. В озерах глубиной больше 10-12 метров имеет место растворение пузырьков газа в водной толще (Ostrovsky et al. 2008), для озер меньшей глубины этот эффект пренебрежимо мал: пузырек «доносит» свою концентрацию газа до поверхности.

Потребление метана микроорганизмами (метанотрофами) осуществляется за счет аэробных (Kaserer, 1905) и анаэробных процессов. В отличие от метаногенов, которые являются археями, метанотрофы относятся к домену (надцарству) бактерий.

К аэробным процессам относится реакция окисления:



Аэробное окисление – очень эффективный механизм; по современным представлениям, он "ликвидирует" 45-100% метана, произведенного донными отложениями (Bastviken et al., 2002). Из-за высокой чувствительности метана к концентрации кислорода в воде, содержание CH_4 увеличивается от поверхности к придонным горизонтам. Исследования на разных водных объектах установили, что распределение метана по глубине обратно распределению кислорода (Bastviken et al. 2008), что было также подтверждено в численных расчетах в настоящей работе.

Анаэробное окисление метана происходит в рамках процессов сульфат-редукции, денитрификации (восстановления нитратов), восстановления железа и марганца (Borrel et al., 2011). Эти процессы необходимо учитывать при описании биогеохимии метана в реках, поскольку ими выносятся с суши необходимые для реакций вещества. При этом к настоящему моменту существует крайне мало количественных данных о подобных процессах, что не позволяет получить кинетические уравнения. Помимо этого, при рассмотрении задачи генерации и потребления метана в озерах и водохранилищах существуют натурные данные, свидетельствующие о том, что анаэробное потребление как минимум на порядок медленнее аэробного (Deutzmann and Schink, 2011).

Оценок эмиссии метана с водохранилищ мира достаточно много, при этом они сильно различаются между собой - от 2 до 122 Тг/год. Такое существенное различие связано с тем, что разные оценки проводились в разное время и в них учитывались разные базы данных по измерениям потоков метана с искусственных водоемов. Потребление метана наиболее эффективно обеспечивается аэробными процессами (окислением), за счет которого "ликвидируется" 45-100% CH_4 , произведенного донными отложениями, потому для оценки выбросов требуется учет взаимодействия метана с кислородом, так же, как для диоксида углерода необходим учет реакция фотосинтеза и дыхания. Концентрация метана в атмосфере невысока, однако вклад метана в создание парникового эффекта, как долгое время считалось, в 25 раз сильнее, чем от углекислого газа. Согласно же последним данным Межправительственной группы экспертов по изменению климата ООН (IPCC, 2014), парниковый потенциал метана ещё опаснее, чем оценивалось раньше. Как следует из доклада за 2014 год, в расчете на 100 лет парниковая активность метана в 28 раз сильнее, чем у углекислого газа, а в 20-летней перспективе — в 84 раза. То есть за 100 лет одна тонна метана удерживает в атмосфере столько же тепла, сколько 28 тонн углекислого газа.

5.2. Описание механизмов генерации, переноса и стока примесей.

5.2.1. Трехмерная модель термогидродинамики замкнутого водоема

В рамках решения задачи корректного описания биогеохимических процессов во внутреннем водоеме была разработана трехмерная численная модель, дополняющая модель термогидродинамики замкнутого водоема, основой которой является осредненная по Рейнольдсу система уравнений термогидродинамики в приближении Буссинеска и гидростатики (Mortikov, 2016; Mortikov et al., 2019; Гладских и др., 2021):

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -A(u) + D_H(u, \lambda_m) + D_z(u, K_m + \nu) - g \frac{\partial \eta}{\partial x} - \frac{g}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial x} \int_z^\eta \rho dz' + fv, \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -A(v) + D_H(v, \lambda_m) + D_z(v, K_m + \nu) - g \frac{\partial \eta}{\partial y} - \frac{g}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial y} \int_z^\eta \rho dz' - fu, \quad (5.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -A(T) + D_H(T, \lambda_h) + D_z(T, K_h + \chi'), \quad (5.4)$$

$$\rho = \rho(T), \quad (5.5)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + (\mathbf{u}_h \cdot \nabla_h) \eta = w. \quad (5.6)$$

Здесь $\mathbf{u} = (u, v, w)$ – вектор скорости, \mathbf{u}_h – горизонтальные компоненты, K_m (λ_m) и K_h (λ_h) – коэффициенты вертикальной (горизонтальной) турбулентной вязкости и температуропроводности соответственно; ν , χ' – коэффициенты молекулярной вязкости и температуропроводности, η – отклонение свободной поверхности от равновесного состояния, z – вертикальная координата, проходящая от дна водоема. Также в системе уравнений (5.1-5.6) $A(q)$ – оператор адвекции:

$$A(q) = \frac{\partial uq}{\partial x} + \frac{\partial vq}{\partial y} + \frac{\partial wq}{\partial z},$$

а $D_H(q, \lambda)$ и $D_z(q, K)$ – операторы горизонтальной и вертикальной диффузии с коэффициентами λ и K соответственно:

$$D_H(q, \lambda) = \frac{\partial}{\partial x} \lambda \frac{\partial q}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \lambda \frac{\partial q}{\partial y},$$

$$D_z(q, K) = \frac{\partial}{\partial z} K \frac{\partial q}{\partial z}.$$

Описания термогидродинамики и биогеохимии объединены в программный комплекс, имеющий ряд преимуществ с существующими в мире аналогами: так, например, в работе (Schmid et al., 2017) для оценок выбросов метана используется комплекс из трех моделей, не объединенных в общую систему (что, по словам авторов работы, приводит к сложностям технического характера). В качестве физической модели используется одномерная, и серьезной проблемой является количественная оценка вертикальной турбулентной диффузии, что приводит к неточностям в определении пространственной и временной изменчивости концентрации метана и оценках его выброса в атмосферу. В (Chen et al., 2019) предложена трехмерная модель для изучения выбросов углекислого газа из субтропического водоема. В (Цветова, 2017) представлены результаты моделирования пузырькового метана для озера Байкал.

Численная модель, описанная в настоящей главе, является достаточно универсальной как с точки зрения описываемых веществ, так и с точки зрения исследуемых объектов. В частности, могут быть подробно изучены как очень крупные водоемы, так и озера среднего размера, которые также являются важнейшим элементом климатической системы.

5.2.2. Общий вид уравнения переноса, диффузии и реакций

Описание биогеохимических процессов включает в себя уравнения для расчета концентраций и потоков биохимических веществ. Уравнения описывают перенос, диффузию и реакции для таких веществ как: метан (CH_4), кислород (O_2), углекислый газ (CO_2), живые и отмершие частицы фито- и зоопланктона и т.д., и имеют вид:

$$\frac{\partial C_{(.)}}{\partial t} + \left[\frac{\partial u_i C_{(.)}}{\partial x_i} + \frac{\partial w C_{(.)}}{\partial z} \right] = \left[\frac{\partial}{\partial x_i} (\lambda_b + \chi_b) \frac{\partial C_{(.)}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial z} (K_b + \chi_b) \frac{\partial C_{(.)}}{\partial z} \right] + R(.), \quad (5.7)$$

где $C_{(.)}$ – концентрации веществ, K_b и χ_b – коэффициенты турбулентной и молекулярной диффузии соответственно, а член $R(.)$ описывает сколько молекул того или иного вещества было добавлено к раствору или извлечено из него в результате реакций.

При интегрировании системы уравнений переноса биохимических примесей используется полунявный метод и схема расщепления для разнесения расчета динамических

тенденций и тенденций, связанных с реакциями веществ. Реализация горизонтального и вертикального переноса примесей основана на численных схемах, используемых в модели для переноса скаляров: полей температуры и солености. В частности, модель допускает использование как конечно-разностных аппроксимаций второго и четвертого порядка точности, обеспечивающих консервативность для первых и вторых моментов (Morinishi et al., 1998), так и монотонных схем до третьего порядка точности (Leveque, 1996; Holland et al., 1998). Процессы взаимодействия веществ включают в себя:

- аэробное окисление метана в водной толще;
- фотосинтез;
- дыхание;
- биохимическое потребление кислорода (БПК) в водной толще (BOD – biochemical oxygen demand) – окисление органических соединений в теле водоёма;
- биохимическое потребление кислорода в донных отложениях (SOD – sedimentary oxygen demand) – сток кислорода на окисление органических соединений в донных отложениях;
- отмирание фито- и зоопланктона.

Модель реализована в трех вариантах детализации:

- описание эмиссии и взаимодействия метана и кислорода;
- полное описание динамики и взаимодействия растворенных газов: метана, кислорода и углекислого газа; при этом предполагается, что растворенный углекислый газ всегда находится в карбонатном равновесии, так что он входит в концентрацию растворенного неорганического углерода, и переменная, описывающая эту концентрацию, отражает количество атомов углерода в молекулах CO_2 , добавленных (или потерянных) к раствору из (в) атмосферы, дышащих организмов или разлагающихся органических веществ;
- расширенная модель газообмена и вклада озер в углеродный цикл: помимо неорганического углерода, рассчитывается также растворенный органический углерод и твердый органический углерод (за счет концентрации живых и отмерших частиц фито- и зоопланктона).

5.2.3. Описание газообмена

На границе вода-атмосфера для растворенных газов задается граничное условие:

$$\frac{K_b}{h} \frac{\partial C_{(z)}}{\partial \xi} \Big|_{z=0} = F_{atm}, \quad (5.8)$$

Где K_b – коэффициент диффузии для пассивной примеси, h – глубина водоема, F_{atm} – диффузионный поток в атмосферу, определяемый соотношением: $F_{atm} = k_{ge}(C|_{z=0} - C_{ae})$. Здесь C_{ae} – равновесная с концентрацией в атмосфере концентрация растворенного газа в воде, рассчитываемая по закону Генри, k_{ge} – коэффициент газообмена с размерностью скорости:

$$k_{ge} = k_{600} \sqrt{\frac{600}{Sc(T)}}, \quad (5.9)$$

$Sc(T)$ – число Шмидта, значение которого зависит от рассматриваемого газа и температуры. Опорная величина k_{600} представляет собой, в сущности, тот же коэффициент газообмена для углекислого газа при температуре среды 20 градусов Цельсия: число Шмидта в этом случае равно 600.

Существуют различные подходы к параметризации k_{600} . В ряде случаев используются либо консервативные значения, либо уравнения, в основе которых лежит скорость ветра (см, напр., (Cole and Caraco, 1998)), при этом пренебрегаются эффекты, от которых зависит турбулентность на границе раздела вода-воздух, как, например, турбулентность от теплопотерь, которая возникает, когда потоки плавучести отрицательны. При этом турбулентность от теплопотерь часто превосходит таковую за счет ветрового перемешивания во многих небольших озерах по всему миру (MacIntyre and Melack, 2009). Стратификация, которая ведет к подавлению турбулентности, также не учитывается в «ветровых» моделях. В настоящей работе для расчета k_{600} использовалась модель обновления поверхности (MacIntyre et al., 2010; Heiskanen et al., 2014), которая явно учитывает весь набор процессов, влияющих на турбулентность около границы раздела воздух-вода. Модель основана на гипотезе, что скорость газообмена между водой и атмосферой определяется скоростью поступления порций растворенного газа к поверхности воды из толщи перемешанного слоя за счет турбулентных вихрей (Dankwerts, 1951):

$$k_{600} = \frac{C_{1,SR} \sqrt[4]{\varepsilon|_{z=0} \cdot \nu}}{\sqrt{600}}. \quad (5.10)$$

Константа $C_{1,SR} = 0.5$, а скорость диссипации ТКЭ рассчитывается согласно модели турбулентности.

Расчет k_{600} также может быть произведен на основе оценки газового потока методом eddy covariance (ковариации вихрей), при котором получают осредненные значения за 30-минутные интервалы, что позволяет рассчитать k_{600} на масштабе времени изменения

метеорологического воздействия, термической структуры поверхностного слоя озер и океанов, и турбулентности на границе раздела вода-воздух (Wanninkhof et al., 2009). В (MacIntyre et al., 2010) подтверждено хорошее совпадение между значениями k_{600} , полученным с помощью eddy covariance, и рассчитанным из модели обновления поверхности; а также приведено согласие с результатами (Zappa et al., 2007).

На границе вода-грунт поток метана, согласно данным измерений для озер, постоянный: $F_{bot_{CH_4}} = 3 \cdot 10^{-7}$ моль/(м²·с). Это суммарный поток, не разделенный на диффузионный и пузырьковый компоненты. Дело в том, что вклад в поток, определяемый переносом пузырьками, описать в трехмерной постановке достаточно сложно: Для корректного учета вклада в поток, определяемого переносом пузырьками, необходимо либо решать задачу о движении пузырька в трехмерной постановке, либо использовать параметризацию, например, (Liang et al., 2013). С другой стороны, влиянием пузырьков на изменение концентрации растворенного в воде газа можно пренебречь в случае водоемов, глубина которых не превышает 10-12 метров (Степаненко, 2018а), и на настоящем этапе автором рассматриваются именно такие озера и водохранилища. Эффект растворения газов на границе пузырек-раствор в них несущественен: ввиду того, что скорость пузырькового потока много выше скорости диффузионного, каждый пузырек переносит концентрацию газа напрямую в атмосферу. Также стоит отметить факт, что донный поток метана задается по немногочисленным эмпирическим данным, недостаточным для параметризации отдельных компонентов потока. Ввиду всего вышесказанного можно заключить, что к настоящему моменту и в рамках рассматриваемой автором задачи разделение описания на диффузионный и пузырьковый компоненты, вероятнее всего, не улучшит оценки потоков метана в атмосферу, а описание концентрации в толще воды зависит исключительно от корректных количественных оценок донного потока, что не отменяет необходимости отдельного описания модели пузырька в дальнейших исследованиях с применением разработанной модели.

5.2.4. Описание реакций

Реализация реакций эквивалентна реализации в одномерной модели LAKE 3.0, разрабатываемой также при участии автора работы, и подробно описана в (Степаненко, 2018а), потому остановимся лишь на некоторых аспектах.

Реакция окисления метана описывается в модели с помощью кинетики Михаэлиса-Ментен - уравнения наиболее известной модели ферментативной кинетики, описывающего зависимость скорости реакции, катализируемой ферментом, от концентрации субстрата (Michaelis and Menten, 1913):

$$V_R = V_{Rmax} \frac{C_S}{K_{hs} + C_S}. \quad (5.11)$$

Здесь V_R – скорость реакции, показывающая, как изменяются концентрации веществ или продукт за единицу времени и имеющая размерность моль/м³·с; V_{Rmax} – максимальная скорость реакции, C_S – концентрация субстрата, K_{hs} – константа Михаэлиса (константа полунасыщения), она равна концентрации субстрата, при которой скорость реакции составляет половину от максимальной. По определению константа Михаэлиса находится из соотношения (Биохимия, 2004):

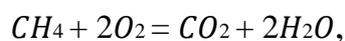
$$K_{hs} = \frac{K_{-1} + K_2}{K_1},$$

где K_{-1} есть константа скорости реакции распада фермент-субстратного комплекса на фермент и исходный субстрат, K_1 – константа скорости реакции образования фермент-субстратного комплекса, и K_2 – константа скорости реакции распада фермент-субстратного комплекса на фермент и продукт (см. ниже вывод уравнения для скорости реакции). На практике для значений констант полунасыщения используются, как правило, данные измерений (например, (Lidstrom and Somers, 1984; Liikanen et al., 2002)). Вывод уравнения (5.5) приведен в (Briggs and Haldane, 1925).



Рис 5.1. Теоретический график зависимости скорости ферментативной реакции от концентрации субстрата при постоянной концентрации фермента. Обозначение K_m используется для константы Михаэлиса (K_{hs} в настоящей работе). Здесь: (а) - реакция первого порядка (при $C_S < K_{hs}$ скорость реакции пропорциональна концентрации субстрата); (б) - реакция смешанного порядка; (в) - реакция нулевого порядка, когда $V_R = V_{Rmax}$, и скорость реакции не зависит от концентрации субстрата. (Березов и Коровкин, 1998).

В процессе реакции фермент взаимодействует с субстратом, в результате чего образуется фермент-субстратный комплекс, который затем распадается с высвобождением продукта реакции. Рассмотрим реакцию окисления метана в терминах ферментативной кинетики. Итак, химическое уравнение этой реакции имеет вид:



где продуктом является углекислый газ, а кислород и метан образуют фермент-субстратный комплекс. При этом в водоемах, насыщенных кислородом, метан описывается как субстрат, а кислород - как фермент, вступающий во взаимодействие с субстратом и влияющий на его концентрацию, при этом концентрация кислорода остается высокой и не претерпевает существенных изменений. Так называемое упрощенное уравнение Михаэлиса-Ментен в этом случае имеет вид:

$$O_{CH_4(simplified)} = V_{Oxmax} \frac{C_{CH_4}}{K_{hs,CH_4} + C_{CH_4}},$$

Также в модели реализовано полное уравнение Михаэлиса-Ментен. В этом случае и метан, и кислород рассматриваются в качестве субстрата (и фермента), и обеспечивается приближение скорости окисления метана к нулю при малом содержании кислорода:

$$O_{CH_4(full)} = V_{Oxmax} \frac{C_{CH_4}}{K_{hs,CH_4} + C_{CH_4}} \frac{C_{O_2}}{K_{hs,O_2} + C_{O_2}},$$

где $K_{hs,CH_4} \approx K_{hs,O_2}$ (согласно (Watson et al., 1997; Lidstrom and Somers, 1984)), а значения константы полунасыщения и максимальной скорости реакции задаются в соответствие с измерениями (Lidstrom and Somers, 1984; Liikanen et al., 2002).

Для описания донного потока кислорода используется также кинетика Михаэлиса-Ментен. Формулировка донного потребления (sedimentary oxygen demand) предложена в (Walker and Snodgrass, 1986) и представляет собой следующее выражение:

$$F_{SOD} = V_{Orox_{max}} \frac{C_{O_2}}{K_{O_2, SOD} + C_{O_2}} + k_c C_{O_2},$$

где величины $V_{Orox_{max}}$ (пропорциональна максимальной скорости окисления органики в отложениях и имеет размерность моль/м²·с) и k_c (коэффициент переноса с размерностью «классической» скорости, м/с) полагаются зависящими от температуры среды.

Рассмотрим также расчет плотности хлорофилла-а, которая используется в расчетах реакций (например, фотосинтеза и дыхания), а также при параметризации коэффициента экстинкции проникающей коротковолновой радиации. Для описания зависимости ρ_{chl-a} от глубины используется схема, предложенная (Stefan and Fang, 1994):

$$\rho_{chl-a} = \rho_{chl-a_0} N(H_a - z),$$

где N – функция Хевисайда, H_a – глубина активного слоя, максимальное значение между глубиной перемешанного слоя и глубиной фотического слоя – уровнем, на котором интенсивность фотосинтетически активной радиации (ФАР) достигает 10% от ее значения на поверхности воды. Для расчета интенсивности ФАР используется ее отношение к интенсивности потока коротковолновой солнечной радиации (Степаненко, 2018а). Концентрация хлорофилла-а в активном слое ρ_{chl-a_0} определяется трофическим статусом озера – то есть, его биопродуктивностью - и составляет: $2 \cdot 10^{-3}$ мг/л – для олиготрофных озер (например, озеро Байкал, Ладожское и Онежское озера), $6 \cdot 10^{-3}$ мг/л – для мезотрофных озер (Саратовское, Рыбинское, Куйбышевское, Горьковское водохранилища) и $15 \cdot 10^{-3}$ мг/л – для эвтрофных водоемов (Чебоксарское водохранилище).

Что же касается коэффициента экстинкции, следует отметить, что в случае расчетов циркуляции водоема на больших временных интервалах, охватывающих изменчивость на годовых масштабах и более, необходим учет изменения прозрачности воды. Согласно (Heiskanen et al., 2015), изменения коэффициента поглощения излучения толщей воды связаны с вертикальным распределением концентраций органических веществ, влияющих на оптическую проницаемость среды. Для такого случая в трехмерной модели реализована параметризация, учитывающая влияние распределения примесей на проницаемость, в частности, концентрации хлорофилла-а (Parsons et al., 1984):

$$k_{ext} = 0.04 + 0.0088 \cdot \rho_{chl-a} + 0.054 \cdot (\rho_{chl-a_0})^{2/3},$$

где первый член выражает коэффициент экстинкции для чистой воды, а второй и третий – поправку на изменение проницаемости среды за счет наличия фитопланктона.

Для исследований циркуляции на временных масштабах, не превышающих сезон, задается постоянное значение, например, для численного исследования Горьковского водохранилища в летние периоды 2014 и 2017 гг. значение задавалось равным 2.5 м^{-1} , что соответствует данным (Arst et al., 2008) для озер Финляндии и Эстонии и (Горбунов, 2011) для водоемов Волжско-Камского бассейна. Это значение также согласуется с результатами, полученными для Горьковского водохранилища по измерениям глубины прозрачности воды диском Секки, которые проводились при участии автора в 2014-2017 (Сергеев и др., 2020).

5.3. Верификация модели на примере описания взаимодействия метана и кислорода.

В настоящем разделе приведено описание верификации трехмерной модели: тестирования на предмет ее корректной работы с точки зрения физико-математических и биохимических закономерностей. К настоящему моменту нет достаточного количества натуральных данных о трехмерных полях концентрации примесей и пространственной изменчивости потоков газов для различных водоемов. Верификация проводилась на основе сопоставления с одномерной моделью LAKE 3.0 и учета физических эффектов, связанных с трехмерным описанием, используемым в настоящей модели. Следует отметить, что валидация модели, то есть то, насколько корректно она воспроизводит натурные данные конкретных водных объектов, является предметом дальнейших исследований.

Модель LAKE 3.0 была протестирована (Степаненко, 2018а) с привлечением данных измерений, проведенных на озерах Щучье (Северо-Восточная Сибирь) и Куйвяярви (Южная Финляндия). Очевидно, что в рамках одномерной по вертикали модели невозможно воспроизвести горизонтальную изменчивость потоков в пределах озера, поэтому задача состояла в получении совпадения между значениями рассчитанного среднего по поверхности озера суммарного за год количества метана, выделяемого в атмосферу, к величине, полученной с помощью измерений. Также были сопоставлены измеренные и рассчитанные профили вертикального распределения растворенного кислорода, метана и углекислого газа. Модель в целом корректно воспроизвела основные особенности распределения, а ошибки связаны с описанием вертикальной диффузии газов, генерации турбулентной кинетической энергии в термоклине (достаточной для того, чтобы коэффициент турбулентной диффузии заметно превышал молекулярный аналог) и эффектов, связанных с перераспределением массы и горизонтального градиента давления под влиянием ветрового нагона, и возможного вклада этих

эффектов в турбулентность. Эти недостатки и планировалось скорректировать с применением трехмерного описания.

На первом этапе верификации необходимо было удостовериться, что в отсутствие факторов, формирующих трехмерную циркуляцию, модели воспроизводят описание термогидродинамики и биогеохимии идеализированного внутреннего водоема схожим образом.

С применением одномерной и трехмерной моделей был проведен численный эксперимент на основе модельной реализации классического лабораторного эксперимента Като-Филлипса (Kato and Phillips, 1969), результаты которого служат основным материалом для калибровки турбулентных замыканий для сдвиговых течений в стратифицированной жидкости.

В эксперименте Като-Филлипса рассматривается однородная по горизонтали стратифицированная жидкость, а вертикальные границы отсутствуют. Начальный профиль температуры является линейным, а единственным источником турбулентности считается ветер, обеспечивающий постоянный поток импульса на поверхности. В классической постановке, описанной в статье (Kato and Phillips, 1969), рассматривался кольцевой резервуар, на поверхности которого создавалось напряжение трения в направлении по окружности. Внутренний и внешний диаметры составляли 152.4 см и 106.7 см соответственно, таким образом, ширина канала была равна 22.8 см. Глубина резервуара составляла 28 см.

Результаты данного эксперимента хорошо описывает теоретическая формула для изменения толщины перемешанного слоя во времени (Price, 1970):

$$h_{ML}(t) = \frac{C \cdot u^* \sqrt{t}}{\sqrt{N(t=0)}}, \quad (C \sim 1.05), \quad (5.12)$$

где h_{ML} – толщина перемешанного слоя, u^* – скорость трения на поверхности ($u^* = \sqrt{\tau/\rho_0}$).

В рамках сопоставления представлялось важным, чтобы вертикальное перемешивание в трехмерной и одномерной моделях описывалось схожим образом. Так, при записи систем (2.1-2.3) и (5.1-5.6) предположена также справедливость градиентного приближения для описания турбулентных потоков, и в обоих случаях использовалось стандартное k - ϵ замыкание, описанное системой (2.4-2.7).

Значения эмпирических констант в k - ϵ замыкании одномерной и трёхмерной моделей согласованы с приведенными в статье (Stepanenko, 2016), их выбор обосновывается, например, в работах (Burchard, 2002; Burchard and Bolding, 2001). Отметим, что турбулентное число Прандтля принято константой $Pr_t = K_m/K_h = 1.25$, а константа $C_{3\epsilon}$, определяющая изменение скорости диссипации под действием сил плавучести, полагалась равной 1.14 при $B > 0$, и -0.4 при $B < 0$.

Для численной реализации эксперимента Като-Филлипса уравнения одномерной и трёхмерной моделей были дополнены следующими граничными условиями на дне:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=H} = 0, \quad \left. \frac{\partial v}{\partial z} \right|_{z=H} = 0, \quad w = 0,$$

и на поверхности:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial v}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad -\rho(K_m + \nu) \left. \frac{\partial u}{\partial z} \right|_{z=0} = \tau.$$

В трёхмерной модели задавались условия периодичности по горизонтальным координатам.

Также были заданы следующие параметры:

- глубина водоема: 10 м,
- время расчета: 7 либо 30 дней,
- начальный градиент температуры: $\partial T / \partial z = 1.5^\circ \text{C/м}$, что соответствует частоте Брента-Вяйсяля (частоте плавучести) $N = 4 \cdot 10^{-2} \text{c}^{-1}$,
- постоянный поток импульса на поверхности: $\tau = 10^{-2} \text{Н/м}^2$,
- сила Кориолиса не учитывается.

Обе модели в рамках численной реализации классического эксперимента Като-Филлипса продемонстрировали хорошее согласие с аналитическим решением (см. рисунок 5.2), из чего можно заключить, что описание динамики в моделях совпадает и является корректным.

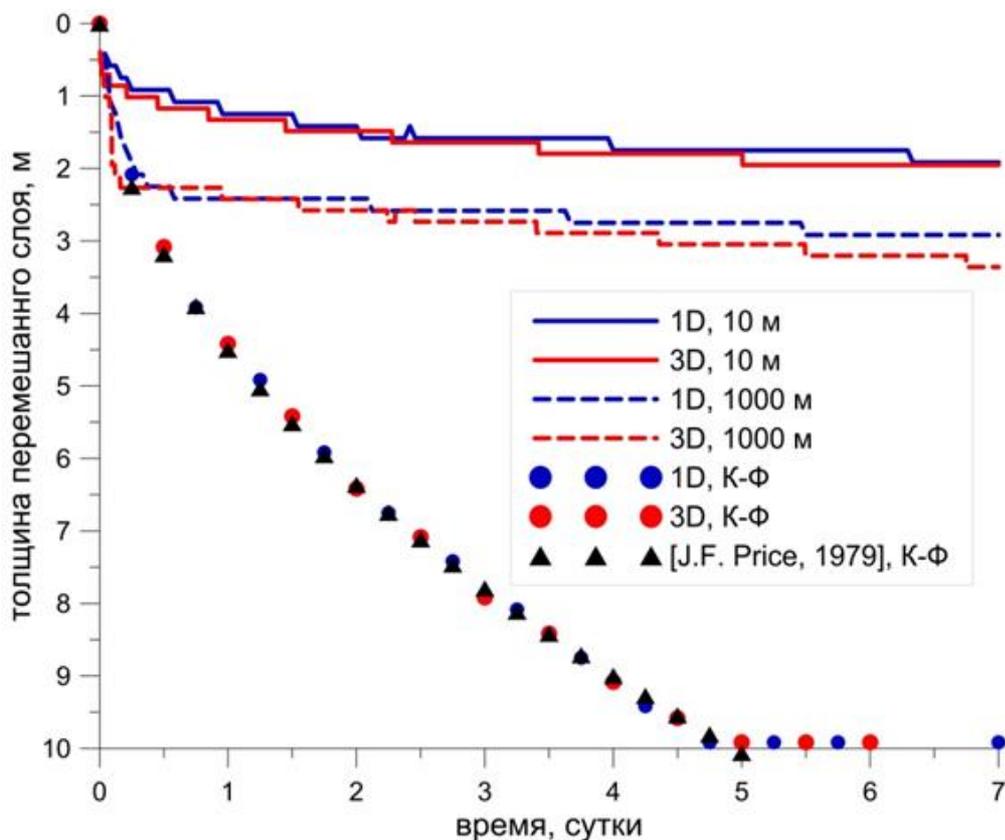
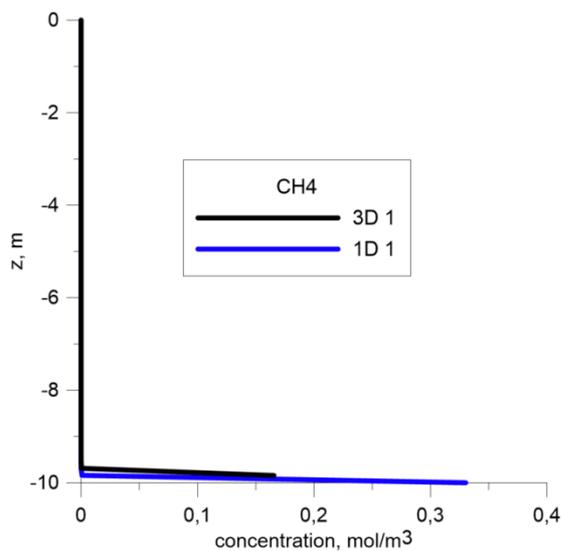
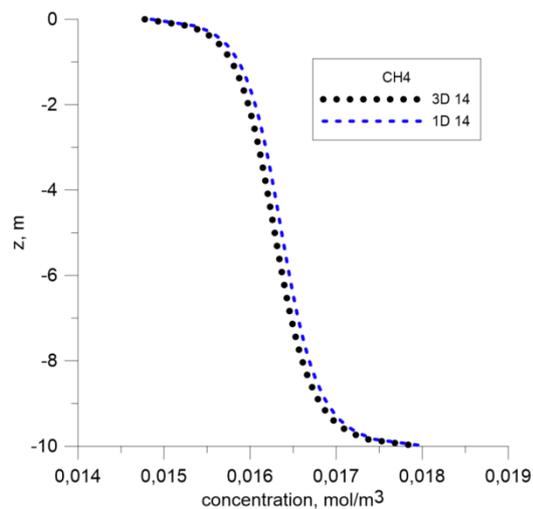


Рис. 5.2. Изменение толщины перемешанного слоя со временем при расчётах конечных водоемов и в классическом эксперименте Като-Филлипа

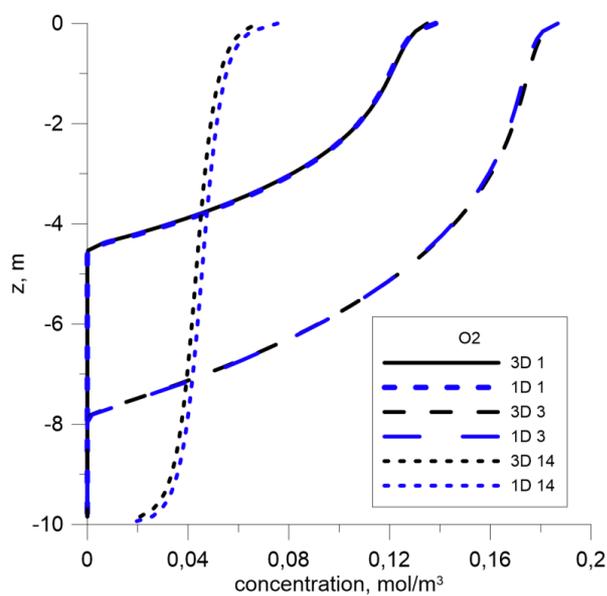
Для описания биохимии модели были дополнены следующими условиями: постоянный поток метана и нулевая концентрация кислорода на нижней границе, а также потоки на верхней границе согласно формуле (5.2). Трёхмерная модель в качестве данных, полученных в результате расчетов, предоставляет вертикальные профили, осредненные по горизонтали, а также двумерные и трехмерные поля. Для сопоставления с одномерной моделью целесообразно рассматривать вертикальные профили, получаемые с помощью трехмерной модели. Результаты приведены на рисунке 5.3.



(a)



(б)



(в)

Рис. 5.3. Вертикальное распределение кислорода и метана, рассчитанное с применением трехмерной и одномерной моделей в рамках численной реализации эксперимента Като-Филлипса: а) через одни расчетные сутки после начала эксперимента, CH_4 , б) 14 суток, CH_4 , в) 1, 3 и 14 суток, O_2 .

Получено точное совпадение между моделями, а единственное различие, связанное с максимальной концентрацией метана вблизи дна на рисунке 5.3(а) объясняется различиями в вычислительной сетке: в трехмерной модели значения скаляров определяются в центре ячеек, а в одномерной модели LAKE – на гранях.

На втором этапе верификации серия экспериментов постановка Като-Филлипса была дополнена вертикальными стенками так, что горизонтальные размеры водоема составляют 1000×1000 метров (при сопоставлении описания термогидродинамики был также рассмотрен случай водоема 10×10 метров для оценки эффектов, связанных с размерами водоема), при этом водоем имеет прямоугольное сечение, т.е. форму параллелепипеда. Здесь нас интересовали различия между одномерной и трехмерной моделями.

Для серии экспериментов с наличием вертикальных стенок трехмерная модель была дополнена боковыми граничными условиями:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=-L_x/2, L_x/2} &= 0, & \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=-L_y/2, L_y/2} &= 0, \\ u \Big|_{x=-L_x/2, L_x/2} &= 0, & v \Big|_{y=-L_y/2, L_y/2} &= 0, \\ \frac{\partial \eta}{\partial x} \Big|_{x=-L_x/2, L_x/2} &= 0, & \frac{\partial \eta}{\partial y} \Big|_{y=-L_y/2, L_y/2} &= 0. \end{aligned}$$

В одномерной модели боковые граничные условия не задаются, для учета эффектов, связанных с перераспределением массы и градиента давления в замкнутом водоеме под влиянием ветрового нагона используется параметризация (Степаненко, 2016).

Динамика изменения толщины перемешанного слоя приведена выше на рисунке 5.2, показано, что, несмотря на, в общем, хорошее согласие, одномерная модель незначительно занижает толщину перемешанного слоя уже на масштабах одной расчетной недели. Рисунок 5.2 также демонстрирует, что динамика толщины перемешанного слоя h_{ML} существенно зависит от горизонтальных размеров водоема, и чем больше водоем, тем ближе она становится к результату классического эксперимента Като-Филлипса, где вертикальные стенки отсутствуют. Ограничение h_{ML} при наличии вертикальных стенок объясняется тем, что в водоёме в этом случае возникает градиент гидростатического давления, действующий противоположно потоку импульса из атмосферы. Это приводит к установлению квазистационарной циркуляции в перемешанном слое. В бесконечном по горизонтали слое воды (эксперимент Като-Филлипса) горизонтальный градиент давления не возникает, поток импульса из атмосферы приводит к монотонному и неограниченному увеличению максимальной скорости в перемешанном слое, что, в свою очередь, способствует быстрому росту h_{ML} .

В численных экспериментах для прямоугольных водоемов с различными горизонтальными размерами проведен также анализ вертикального распределения температуры, скорости течения и коэффициента турбулентной вязкости. Сопоставление вертикального распределения температуры приведено на рисунке 5.4 (а, б).

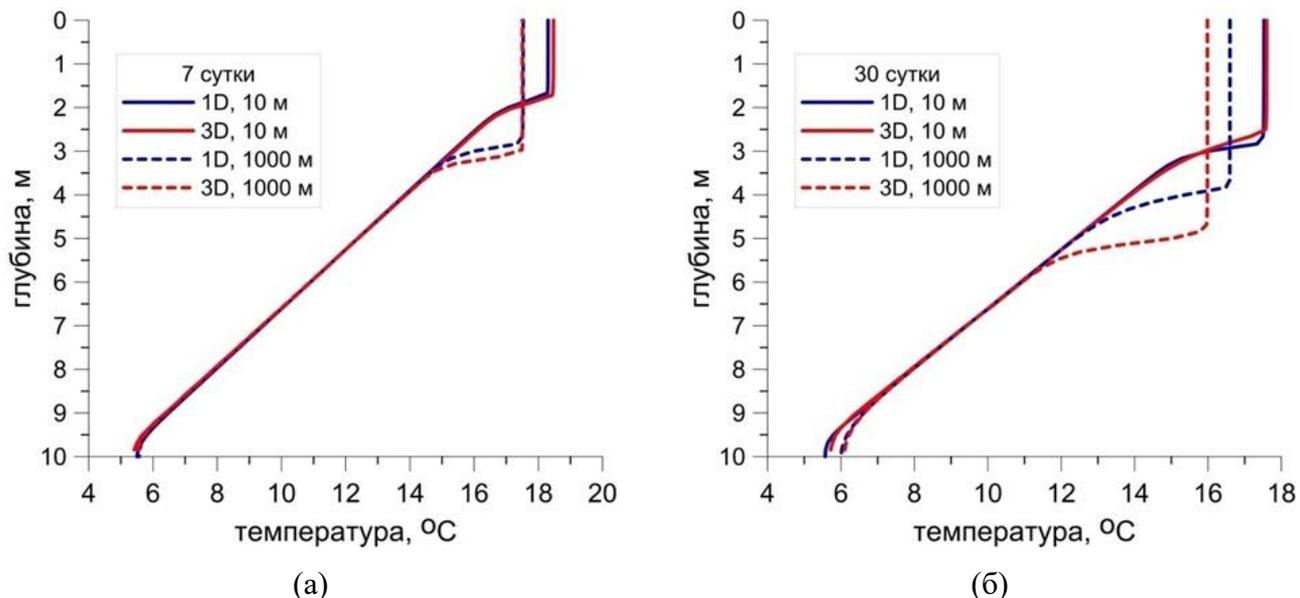


Рис. 5.4. Вертикальное распределение температуры на 7 день расчета (а), на 30 день расчета (б) по одномерной и трехмерной моделям.

Продемонстрировано хорошее согласие между моделями на временных масштабах в несколько дней. Различия на больших временных интервалах (30 дней и более) для водоема длиной 1000 м могут быть связаны с особенностями моделей: одномерная модель построена на осреднении трехмерных уравнений, а параметризация градиента давления учитывает гравитационные колебания только первой горизонтальной моды (Степаненко, 2016). Примечательно при этом, что для водоема длиной 10 метров и на 30 день две модели дают практически идентичный профиль температуры. Это позволяет предположить, что для водоема длиной 1000 м, что является типичным размером для реальных озер и водохранилищ, в трехмерной модели большая часть кинетической энергии содержится в гармониках, отличных от первой, по сравнению со случаем меньшего водоема. Таким образом, первая горизонтальная мода в одномерной модели хуже описывает поле скорости, и это приводит к менее точному воспроизведению вертикального турбулентного обмена и скорости заглубления перемешанного слоя.

Помимо распределения температуры, проанализировано также вертикальное распределение скорости течения (рисунок 5.5 (а, б)).

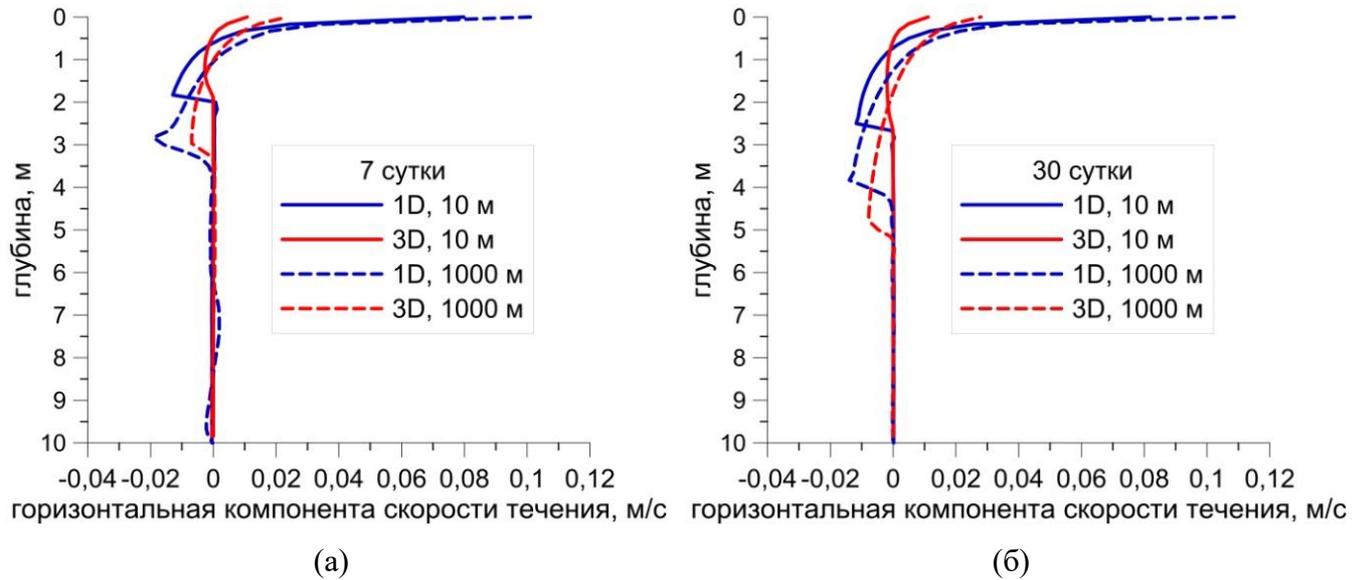
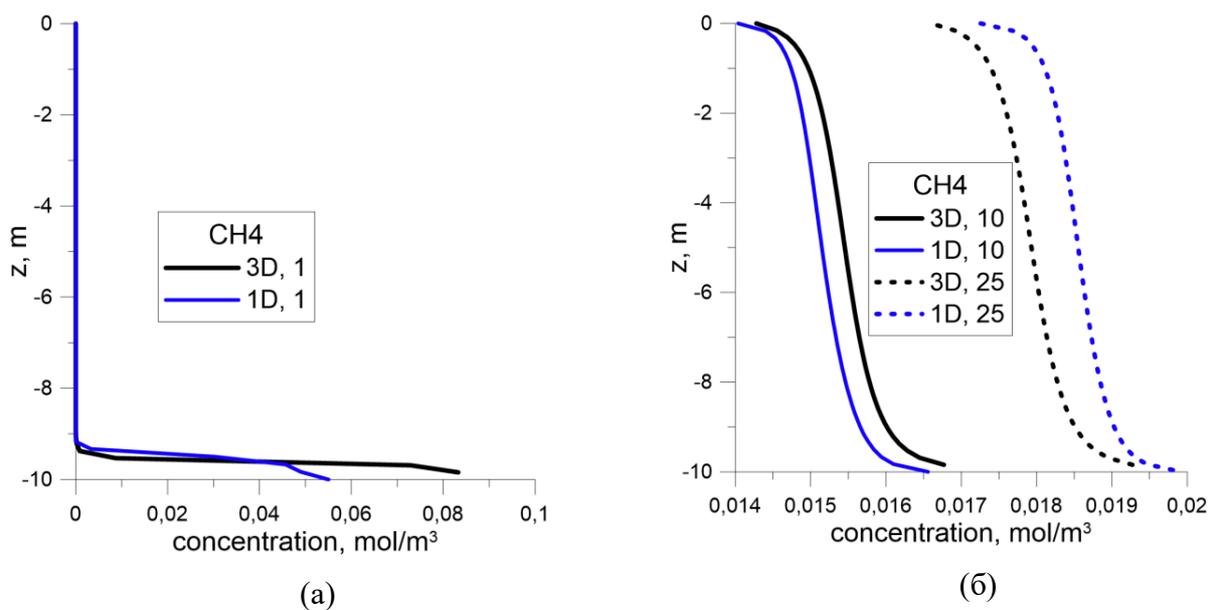


Рис. 5.5 Вертикальное распределение горизонтальной скорости на 7 день расчета (а), на 30 день расчета (б).

В профилях скорости наблюдается противотечение в нижней части перемешанного слоя, связанное с градиентом давления, направленным против скорости ветра, а сама структура течения является квазистационарной. В термоклине наблюдаются гравитационные колебания, амплитуда которых подавляется горизонтальной вязкостью.

Наконец, были сопоставлены профили вертикального распределения концентраций примесей.



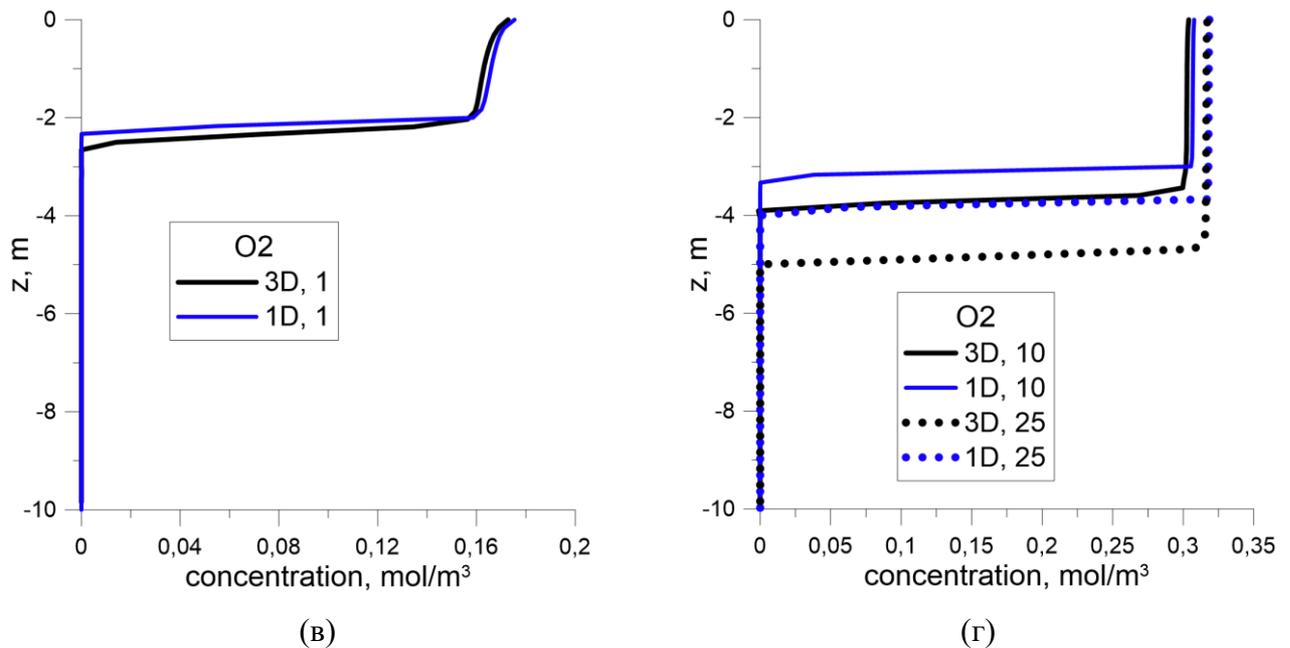


Рис. 5.6. Вертикальное распределение кислорода и метана, рассчитанное с применением трехмерной и одномерной моделей в рамках численной реализации идеализированного водоема конечных размеров: а)) через одни расчетные сутки после начала эксперимента, CH₄, б) 10 и 25 суток, CH₄, в) 1 сутки, O₂, г) 10 и 25 суток, O₂.

Несмотря на в целом близкое согласие результатов расчетов в одномерной и трехмерной постановках, наблюдается ряд различий. В частности, одномерная модель занижает глубину верхнего перемешанного слоя водоема по сравнению с трехмерной моделью за счет того, не воспроизводит вертикальные циркуляции, переносящие импульс между границами верхнего перемешанного слоя. В трехмерной же модели такой перенос описывается и приводит к усилению сдвига скорости, более быстрому росту толщины перемешанного слоя и насыщению этого слоя кислородом, вступающим с метаном в реакцию окисления и тем самым снижая его концентрацию в толще воды.

Можно заключить, что в установившемся течении вертикальное распределение концентраций в моделях оказывается близким; различия связаны с деталями численной реализации, небольшим занижением одномерной моделью глубины перемешанного слоя, а также с развитием придонного турбулентного слоя в одномерной модели из-за параметризации гравитационных колебаний. Различия между моделями растут со временем при постоянном внешнем форсинге. Таким образом, одномерная модель позволяет воспроизводить диффузию и перенос биохимических примесей для условий летней стратификации в близком согласии с трёхмерной моделью, где горизонтальная изменчивость прогностических величин воспроизводится явно, при этом на временных масштабах, составляющих сезон и более, целесообразно применение трехмерной модели для наиболее корректных оценок вклада водоемов в глобальные циклы и, в частности, в парниковый эффект.

Следует отметить, что наиболее важной характеристикой при исследовании метана является поток этого газа в атмосферу, поскольку увеличение содержания метана в атмосфере способствует усилению парникового эффекта, так как метан интенсивно поглощает тепловое излучение Земли. Временной ряд значений потока метана в атмосферу, полученных с использованием трехмерной модели в рамках эксперимента Като-Филлипса, дополненного расчетом биогеохимии, представлен на рисунке 5.7 показано установление стационарного значения, равного заданному потоку метана $F_{botCH_4} = 3 \cdot 10^{-7}$ моль/(м²·с),

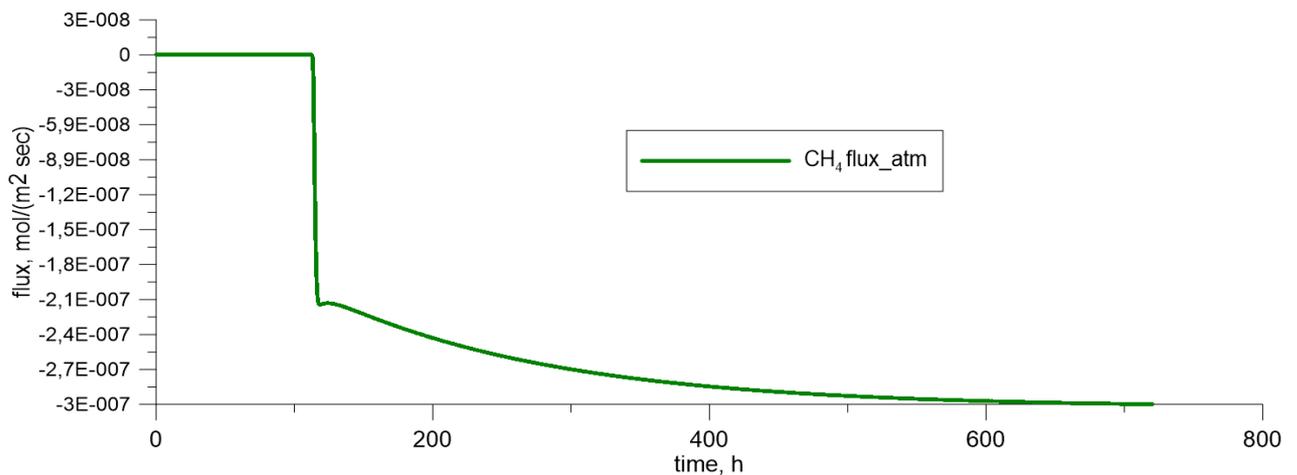


Рис. 5.7. Временной ряд значений потока метана в атмосферу, полученный в постановке Като-Филлипса в рамках расчетов трехмерной моделью биогеохимии внутреннего водоема

В модели реализована возможность учета рельефа дна. Для представления рельефа используется метод погруженной границы (Mittal and Iaccarino, 2005) на основе определения граничных условий в фиктивных ячейках. Были рассмотрены простейшие конфигурации рельефа: параболическая форма («чашка»), выпуклость в виде гауссианы («шапка») и плоское дно в замкнутом водоеме с заданными граничными условиями для растворенных газов. Показано, что распределение концентраций примеси как по вертикали, так и по горизонтали, является неоднородным, вследствие распределения источников на наклонном дне (см. рисунки 5.6, 5.7). Как было отмечено в начале, из-за высокой чувствительности метана к концентрации кислорода, его содержание увеличивается от поверхности к придонным горизонтам, и, следовательно, при наличии наклонного дна, например, параболической формы более высокая концентрация наблюдается в тех областях, где глубина меньше. Данные измерений, свидетельствующие о том, что распределение метана по глубине обратно распределению кислорода (Bastviken et.al. 2008), также подтверждено в численных расчетах, результаты которых приведены на рисунках 5.8 и 5.9.

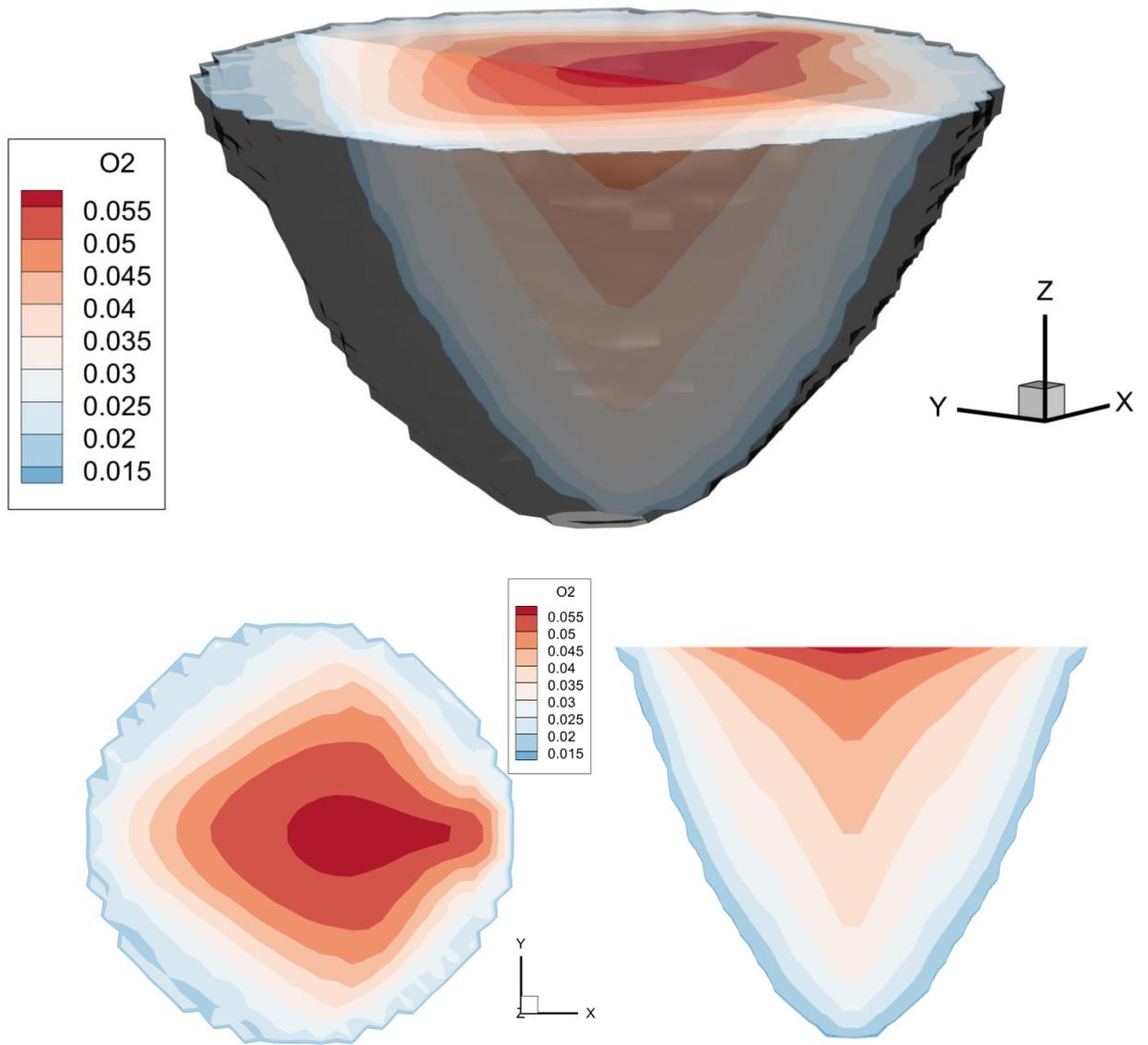


Рис. 5.8. Распределение концентрации кислорода вблизи поверхности водоема и на вертикальном сечении.

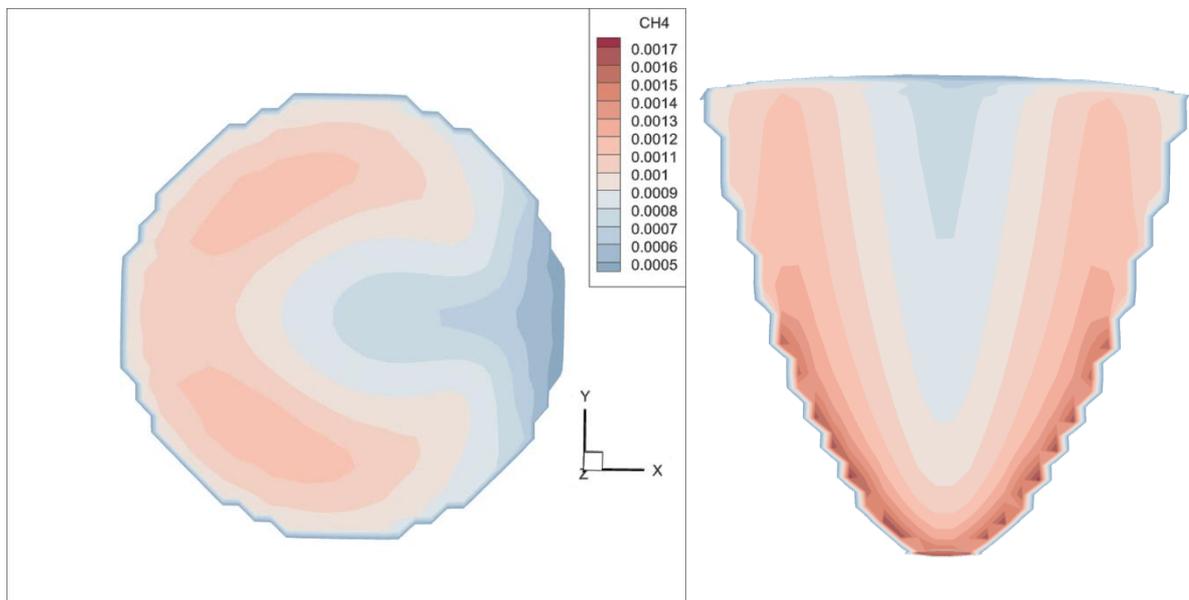
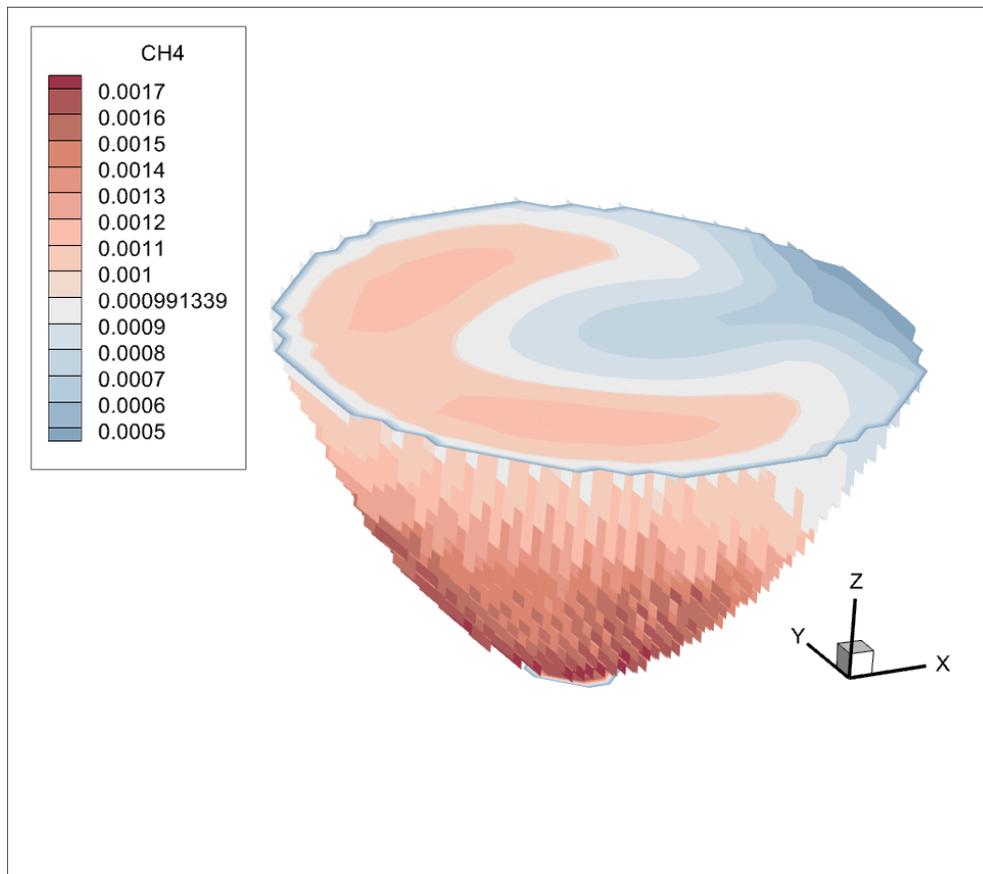


Рис. 5.9. Распределение концентрации кислорода вблизи поверхности водоема и на вертикальном сечении.

Помимо примитивных конфигураций рельефа дна, в модели реализована возможность задания карты глубин реального водоема и данных атмосферного форсинга. Так были

проведены тестовые расчеты циркуляции Горьковского водохранилища (рисунок 2.13). Таким образом, разработанная модель планируется к широкому применению для исследования характеристик средних и крупных водоемов Русской равнины, включая, например, Горьковское водохранилище, Чебоксарское водохранилище, Онежское озеро и т.д. На основе результатов, полученных с применением настоящей модели, планируется разработка параметризаций потоков биохимических веществ (в частности, парниковых газов), поступающих из внутренних водоемов в атмосферу, для включения в климатические модели с целью корректного описания роли водоемов в глобальных геохимических циклах, что позволит, как следствие, уточнить оценки будущих изменений климата.

5.4. Выводы по Главе 5.

В Главе 5 представлена разработанная автором трехмерная модель генерации, переноса и стока биогеохимических примесей в водоемах суши, дополняющая модель термогидродинамики замкнутого водного объекта. Уравнение для расчета концентраций примесей имеет вид переноса-диффузии-реакций, при этом для описания реакций используется уравнение кинетики Михаэлиса-Ментен. Верификация разработанной модели проводилась на основе сопоставления с одномерной моделью LAKE 3.0, верифицированной на основе данных измерений, и учета физических эффектов, связанных с трехмерным описанием, используемым в предлагаемой автором модели. С помощью численной реализации классического лабораторного эксперимента Като-Филлипса, дополненной граничными условиями для растворенных газов, подтверждено, что в отсутствие эффектов, связанных с трехмерной циркуляцией, термогидродинамика и биогеохимия воспроизводятся в моделях схожим образом. Серия численных экспериментов по исследованию этих процессов в идеализированных водоемах конечного размера подтвердила, что трехмерное описание корректирует недостатки одномерного подхода, связанные с описанием вертикальной диффузии газов, генерации турбулентной кинетической энергии в термоклине (достаточной для того, чтобы коэффициент турбулентной диффузии заметно превышал молекулярный аналог) и эффектов, связанных с перераспределением массы и горизонтального градиента давления под влиянием ветрового нагона.

Отметим, что разработанная модель биогеохимии внутреннего водоема допускает дальнейшую детализацию: так, к примеру, переменные, описывающие концентрации живых и отмерших частиц фито- и зоопланктона, могут быть представлены как суммы концентраций видового состава планктона для конкретного водного объекта (например, для Горьковского водохранилища это диатомовые водоросли и цианобактерии). В таком случае член, отвечающий за параметризацию реакций, должен быть дополнен в соответствии с биологическими

особенностям рассматриваемых видов: необходим учет факторов, влияющие на их распространение и отмирание (например, концентрации газов и интенсивность их потоков, проникающая солнечная радиация с учетом поправки на коэффициент экстинкции за счет влияния, например, хлорофилла-а, температура воды, тип стратификации и т.д.). При этом важно понимать, что при расширении функциональной составляющей модели увеличиваются время расчета и требования к вычислительным ресурсам, а также теряется универсальность (применимость к как можно более широкому перечню внутренних водных объектов). Тем не менее, для решения биогеохимических задач конкретного водоема целесообразно производить дальнейшую детализацию, например, по видовой составляющей планктона.

Заключение

В настоящей работе рассмотрена задача численного исследования термогидродинамических и биогеохимических процессов, протекающих во внутренних водоемах, и корректного воспроизведения этих процессов в рамках математического моделирования с применением новых подходов к описанию турбулентности как важнейшего фактора, влияющего на всю совокупность гидрологических, физических и биохимических характеристик вод суши. Приведем основные результаты исследования и обозначим направления дальнейшего развития:

Результаты исследования

1. На основе результатов численного исследования с применением одномерной модели LAKE, данных глобального метеорологического реанализа и уточненного описания ветрового воздействия на процессы перемешивания показано, что одномерная модель достаточно точно воспроизводит эволюцию вертикальной термической структуры внутреннего водоема среднего размера на масштабе порядка сезона (весь период открытой воды).

2. Предложена, разработана и программно реализована модификация $k-\epsilon$ схемы перемешивания, позволяющая уточнить влияние плотностной стратификации и сдвига скорости на турбулентный перенос импульса и скалярных субстанций в толще воды, в частности, через термоклин. Использование параметризации позволило показать существование турбулентности при значениях градиентного числа Ричардсона выше критического. Подтверждена принципиальная роль предложенной модификации замыкания при расчете термодинамики водоема в условиях сформировавшегося термоклина.

3. Для исследований времени замерзания и вскрытия внутренних водоемов, а также продолжительности ледостава, предложена методика анализа данных пассивного микроволнового зондирования, производимого с помощью инструментов, размещенных на спутниках Jason 1,2,3, Torex/Poseidon и SARAL. В основе методики лежит расчет разности яркостных температур вдоль трека, пересекающего водоем. Продемонстрировано наличие климатического тренда к более позднему замерзанию и более раннему вскрытию льда, и, как следствие, сокращению времени ледостава на 10-15 суток за 25 лет.

4. Предложена, разработана и реализована трехмерная модель генерации, переноса и стока биогеохимических примесей (растворенных газов и твердого углерода) в водоемах суши, дополняющая модель термогидродинамики замкнутого водного объекта. Модель позволяет воспроизвести концентрации примесей и потоки газов в атмосферу, в том числе, с учетом горизонтальной изменчивости, и ее использование даст возможность уточнить оценки вклада озер и водохранилищ в глобальный углеродный цикл Земли.

Список литературы

1. Abbasi A., Annor F.O., Giesen N.V. Investigation of temperature dynamics in small and shallow reservoirs, case study: Lake Binaba, Upper East Region of Ghana // *Water*. 2016. V.8, №3.P. 84.
2. Abbasi, A., Annor, F. O., Giesen, N. V. Investigation of temperature dynamics in small and shallow reservoirs, case study: Lake Binaba, Upper East Region of Ghana // *Water* 8(3), p. 84 (2016), doi:10.3390/w8030084.
3. Arah J.R.M., Stephen K.D. A model of the processes leading to methane emission from peatland // *Atmospheric Environment*.— 1998.—oct.— Vol. 32, no. 19.— P. 3257–3264.
4. Arst H., Erm A., Herlevi A., Kutser T., Lepparanta M., Reinart A., Virta J. Optical properties of boreal lake waters in Finland and Estonia // *Boreal Environment Research*.— 2008.— Vol. 13, no. 2.— P. 133–158.
5. Babajimopoulos C., Papadopoulos F. Mathematical prediction of thermal stratification of Lake Ostrovo (Vegoritisi), Greece // *Water Resources*, 1986, 22(11). pp. 1590–1596.
6. Bastviken David, Ejlertsson Jorgen, Tranvik Lars. Measurement of Methane Oxidation in Lakes: A Comparison of Methods // *Environmental Science & Technology*.— 2002.— Vol. 36, no. 15.— P. 3354–3361.— URL: <http://dx.doi.org/10.1021/es010311p>.
7. Bastviken David, Cole Jonathan J, Pace Michael L, de Bogert Matthew C. Fates of methane from different lake habitats: Connecting whole-lake budgets and CH₄ emissions // *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*.— 2008.— Vol. 113, no. G2.— P. G02024.
8. Bazhin N.M. Gas transport in a residual layer of a water basin // *Chemosphere - Global Change Science*. — 2001. — Vol. 3, no. 1. — P. 33 – 40.
9. Bazhin N.M. Theoretical consideration of methane emission from sediments // *Chemosphere*. — 2003. — jan. — Vol. 50, no. 2. — P. 191–200.
10. Bertin F. Energy dissipation rates, eddy diffusivity, and the Prandtl number: An in situ experimental approach and its consequences on radar estimate of turbulent parameters radio science / F. Bertin, J. Barat, R. Wilson // *J. Radio Sci.* – 1997. – Vol. 32, N 2. – P. 791–804.
11. Blumberg, A. F. and G. L. Mellor, A description of a three-dimensional coastal ocean circulation model. *Three-Dimensional Coastal ocean Models*, edited by N. Heaps, 208 pp., American Geophysical Union., 1987
12. Borrel Guillaume, J'éz'equel Didier, Biderre-Petit Corinne, Morel-Desrosiers Nicole, Morel Jean-Pierre, Peyret Pierre, Fonty G'érard, Lehours Anne-Catherine. Production and consumption of methane in freshwater lake ecosystems. // *Research in microbiology*.— 2011.— Vol. 162, no. 9.— P. 832–847

13. Briggs G.E., Haldane J.B.S. A note on the kinematics of enzyme action // *Biochem J.* — 1925. — Т. 19, вып. 2. — С. 338–339
14. Burchard H. Applied turbulence modelling in marine waters. // Berlin: Springer-Verlag Berlin Heidelberg. 2002. 218 p.
15. Burchard H., Bolding K. Comparative analysis of four second-moment turbulence closure models for the oceanic mixed layer // *J. Phys. Oceanogr.* 2001. V. 31. P. 1943-1968.
16. Burchard, H. and Deleersnijder, E. (2001). Stability of algebraic non-equilibrium second-order closure models. *Ocean Modelling*, 3:3350.
17. Burchard, H. (2002), Applied turbulence modelling in marine waters, Vol. 100.
18. Chen Z., Huang P., Zhang Z. Interaction between carbon dioxide emissions and eutrophication in a drinking water reservoir: A three-dimensional ecological modeling approach // *Science of The Total Environment.* – 2019. – Т. 663. – С. 369-379.
19. Dagurova O. P., Namsaraev B. B., Kozyreva L. P., Zemskaya T. I., Dulov L. E. Bacterial Processes of the Methane Cycle in Bottom Sediments of Lake Baikal // *Microbiology.*— 2004.— Vol. 73, no. 2.— P. 202–210.
20. Dankwerts P.V. Significance of liquid-film coefficients in gas absorption // *Industrial and Engineering Chemistry.*— 1951.— Vol. 43, no. 6.— P. 1460– 1467.
21. Deemer B., Harrison A., Li S., Beaulieu J., Delsontro T. et.al. (2016) Greenhouse Gas Emissions from Reservoir Water Surfaces: A New Global Synthesis, Springer. *BioScience*, 66, 11, 949 – 964
22. Deltares, 2017a. Hydro-morphodynamics: User Manual. Deltares, the Netherlands
23. Deltares, 2017b. D-water Quality Processes Library Description: Technical Reference Manual. Deltares, The Netherlands
24. Deltares, 2017c. Water Quality and Aquatic Ecology: User Manual. Deltares, The Netherlands
25. Deutzmann Jorg S, Schink Bernhard. Anaerobic oxidation of methane in sediments of Lake Constance, an oligotrophic freshwater lake. // *Applied and environmental microbiology.*— 2011.— Vol. 77, no. 13.— P. 4429–4436.
26. Diekert Gabriele, Wohlfarth Gert. Metabolism of homoacetogens // *Antonie van Leeuwenhoek.*— 1994.— Vol. 66, no. 1-3.— P. 209–221.
27. Downing J.A et al. The global abundance and size distribution of lakes, ponds, and impoundments// *Limnology and Oceanography.* 2006.V. 51, №5. P. 2388–2397
28. Esau I. Large-eddy simulations of geophysical turbulent flows with applications to planetary boundary layer research / I. Esau // *Proceedings of 5th conference on computational mechanics «MekIT'09»*, Trondheim, 26–27 May. 2009, Tapir Academic Press. – 2009. – P. 7–37.
29. F. Soleymani, On a bi-parametric class of optimal eighth-order derivative-free methods, *International Journal of Pure and Applied Mathematics*, vol. 72, pp. 27–37, 2011.

30. Fang Xing, Stefan Heinz G. Simulations of climate effects on water temperature, dissolved oxygen, and ice and snow covers in lakes of the contiguous U.S. under past and future climate scenarios // *Limnology and Oceanography*. — 2009. — nov. — Vol. 54, no. 6part2. — P. 2359-2370.
31. Forster, P., V. Ramaswamy, P. Artaxo, et. al. (2007) Changes in atmospheric constituents and in Radiative Forcing. In: *Asses. Report of the IPCC*, Cambridge University Press, Cambridge, 129 – 217
32. Fröhlich J., von Terzi D. Hybrid LES/RANS methods for the simulation of turbulent flows // *Progress in Aerospace Sciences*. 2008. Vol. 44, No 5. P. 349–377.
33. Gladskikh, D. S., Kuznetsova, A. M., Baydakov, G. A., & Troitskaya, Y. I. (2022). Numerical Simulation of the Thermal Regime of Inland Water Bodies Using the Coupled WRF and LAKE Models. In *Processes in GeoMedia—Volume IV* (pp. 317-325). Springer, Cham.
34. Goita, K., Walker, A. E. and B. E. Goodison, "Algorithm development for the estimation of snow water equivalent in the boreal forest using passive microwave data," *Int. J. Remote Sens.*, vol 24, pp 1097-1102, 2003.
35. Goudsmit G.-H., Burchard H., Peeters F., Wuest A. Application of k-eps turbulence models to enclosed basins: The role of internal seiches // *J. Geophys. Res.* 2002.V. 107(C12), P. 3230
36. Gruca-Rokosz R., Tomaszek J. (2015) Methane and Carbon Dioxide in the Sediment of a Eutrophic Reservoir: Production Pathways and Diffusion Fluxes at the Sediment–Water Interface, *Water, Air and Soil Pollution*, 226, 16 – 32
37. Gu, H., Jin, J., Wu, Y., Ek, M. B., Subin, Z. M. Calibration and validation of lake surface temperature simulations with the coupled WRF-lake model // *Climatic Change*, 129(3-4), 471-483, doi:10.1007/s10584-013-0978-y, 2015.
38. Hall, D. K., Foster, J. L., Chang, A. T. C. and Rango. A., "Freshwater Ice Thickness Observations Using Passive Microwave Sensors," *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. GE-19, pp. 189-193, 1981.
39. Hedderich Reiner, Whitman William B. Physiology and Biochemistry of the Methane-Producing Archaea // *Prokaryotes*.— 2006.— P. 1050–1079./S0923250811001094.
40. Heiskanen et al. (2015) Effects of water clarity on lake stratification and lake-atmosphere heat exchange. *J Geophys Res Atmos.* 120:7412–7428
41. Heiskanen Jouni J., Mammarella Ivan, Haapanala Sami, Pumpanen Jukka, Vesala Timo, MacIntyre Sally, Ojala Anne. Effects of cooling and internal wave motions on gas transfer coefficients in a boreal lake // *Tellus B*.— 2014.— Vol. 66.— URL: <http://www.tellusb.net/index.php/tellusb/article/view/22827/xml>.
42. Hersbach H. CMOD5: An improved geophysical model function for ERS C-band scatterometry. – *European Centre for Medium-Range Weather Forecasts*, 2003.

43. Holland W.R., Chow J.C., Bryan F.O. Application of a Third-Order Upwind Scheme in the NCAR Ocean Model // *J. Climate*. 1998. V. 11, N 6. P. 1487-1493.
44. Hostetler S. W., Bates G. T., Giorgi F. Interactive coupling of a lake thermal model with a regional climate model // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 1993. — mar. — Vol. 98, no. D3. — P. 5045–5057.
45. Howard L.N. Note on a paper of John W. Miles // *J. Fluid Mech*. 1961. V. 10. No 4. P. 509–514.
46. IPCC (Intergovernmental Panel on Climate Change). IPCC, 2014: Climate Change 2014: Synthesis Report. [Core Writing Team, R.K. Pachauri and L.A. Meyer (eds.). IPCC, Geneva, Switzerland, 151 pp.]
47. Jacobs J.D. and Grondin L.D. The influence of an Arctic large-lakes system on mesoclimate in south-central Baffin Island, NWT, Canada // *Arctic and Alpine Research* № 20(2). – 1988. – P. 212-219.
48. Jöhnk Klaus D. 1-D-hydrodynamische Modelle in der Limnophysik: Turbulenz-Meromixis-Sauerstoff (Habilitation) : Ph. D. Thesis / Klaus D Jöhnk ; Technical University, Darmstadt. — 2000. — P. 235.
49. Kang K.-K., Duguay C.R., Lemmetyinen J., Gel Y., Estimation of ice thickness on large northern lakes from AMSR-E brightness temperature measurements, *Remote Sensing of Environment*, 2014, Vol. 150, pp. 1–19.
50. Kang, K. K., Duguay, C. R., Howell, S. E. L., Derksen, C. P., Kelly, R. E. J., "Potential of AMSR-E for Estimating Lake Ice Thickness on Great Bear and Great Slave Lakes, Canada," *Geophysical Research Abstracts*, vol. 10, 2008
51. Kantha L., Clayson S. An improved mixed layer model for geophysical applications // *J. Geophys. Res*. 1994. V. 99 (C12). P. 25235-25266.
52. Karpowicz M., J. Ejsmont-Karabin Effect of metalimnetic gradient on phytoplankton and zooplankton (Rotifera, Crucstacea) communities in different trophic conditions // *Environ. Monit. Assess*. 2017. V. 189, N 8. P. 367.
53. Kaserer H. Ueber die Oxydation des Wasserstoffes und des Methane durch Mikroorganismen // *Z. landw. Versuchsw. Osterreich*.— 1905.— Vol. 8.— P. 789–792.
54. Kato H., Phillips O.M. On the penetration of a turbulent layer into stratified fluid // *Journal of Fluid Mechanics*. 1969. V.37, №4. P. 643.
55. Kays W. Turbulent Prandtl number – where are we? // *J. Heat Transfer*. 1994. V. 116. P. 284-295.
56. Keller WC, Wright JW (1975) Microwave scattering and the straining of wind-generated waves. *Radio Science*. 10(2):139-147

57. Kelley J.G.W., Hobgood J.S.K, Bedford W., Schwab D.J. Generation of three-dimensional lake model forecasts for lake Erie // *Wea. Forecast.* 1998. №13. P. 659-687.
58. Kessler M. A., Plug L. J., Walter Anthony K. M. Simulating the decadal-to millennial-scale dynamics of morphology and sequestered carbon mobilization of two thermokarst lakes in NW Alaska // *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences.* — 2012. — Vol. 117, no. G2. — P. G00M06.
59. Kondo B., Curry J.A. Heat and momentum transfer under strong stability in the atmospheric surface layer // *J.Atmos.Sci.* 2000. V.57. P.1417-1423.
60. Kondo J. Heat and momentum transfers under strong stability in the atmospheric surface layer / J. Kondo, O. Kanechika, N. Yasuda // *J. Atmos. Sci.* – 1978. – Vol. 35. – P. 1012–1021.
61. Kouraev A. V., et al.(2003) "Ice cover variability in the Caspian and Aral seas from active and passive satellite microwave data". *Polar Research*, vol. 22(1), pp. 43–50.
62. Kouraev A. V., et al. (2008) "Ice and snow cover of continental water bodies from simultaneous radar altimetry and radiometry observations". *Surveys in Geophysics*, vol. 29 (4-5), pp. 271-295.
63. Kouraev A.V., Semovski S.V., Shimaraev M.N., Mognard N.M., Légresy B., Remy F., Observations of Lake Baikal ice from satellite altimetry and radiometry, *Remote Sensing of Environment*, 2007, Vol. 108, No.3, pp. 240–253
64. Kung, H.T. J.F.Traub, Optimal order of one-point and multipoint iteration. *Journal of the Association for Computing Machinery*, vol.21, pp. 643–651, 1974.
65. Kuznetsova A. M., Baydakov G. A., Papko V. V., Kandaurov A. A., Vdovin M. I., Sergeev D. A., Troitskaya Yu. I. Adjusting of wind input source term in WAVEWATCH III model for the middle-sized water body on the basis of the field experiment // *Hindawi Publishing Corporation, Advances in Meteorology*, vol. 2016, article ID 574602, 13 pp., doi:10.1155/2016/8539127
66. Kawade Swati, Kumar Arun, M P Sharma (2018) Carbon Dioxide Emission from a Reservoir in India, *International Journal of Lakes and Rivers*, 11 (1), 29 – 46
67. Leveque R.J. High-Resolution Conservative Algorithms for Advection in Incompressible Flow // *SIAM J. Num. Analysis.* 1996. V. 33, N 2. P. 627-655.
68. Li D. Turbulent Prandtl number in the atmospheric boundary layer – where are we now? // *Atmos. Res.* 2019. V. 216, N 1. P. 86-105.
69. Liang, J.-H., Deutsch, C., McWilliams, J. C., Baschek, B., Sullivan, P. P., and Chiba, D. (2013), Parameterizing bubble-mediated air-sea gas exchange and its effect on ocean ventilation, *Global Biogeochem. Cycles*, 27, 894– 905, doi:10.1002/gbc.20080.
70. Lidstrom M E, Somers L. Seasonal study of methane oxidation in lake washington. // *Applied and environmental microbiology.*— 1984.— Vol. 47, no. 6.— P. 1255–1260

71. Liikanen A., Huttunen J. T., Valli K., Martikainen P. J. Methane cycling in the sediment and water column of mid-boreal hyper-eutrophic Lake Kevaton, Finland // *Archiv fur Hydrobiologie*.— 2002a.— Vol. 154, no. 4.— P. 585– 603.
72. Ljungemyr P., Gustafsson N., Omstedt A. Parameterization of lake thermodynamics in a high-resolution weather forecasting model // *Tellus A*. 1996. V. 48. P. 608-621.
73. Lundgren TS (1967) Distribution functions in the statistical theory of turbulence. *Phys Fluids*. 10:969
74. Makhov G A, Bazhin N M. Methane emission from lakes // *Chemosphere*. —1999. — Vol. 38, no. 6. — P. 1453–1459.
75. Mallard, M. S., C. G. Nolte, T. L. Spero, O. R. Bullock, K. Alapaty, J. A. Herwehe, J. Gula, and J. H. Bowden. Technical challenges and solutions in representing lakes when using WRF in downscaling applications // *Geosci. Model Dev.*, 8, 1085– 1096.
76. Mammarella I, Nordbo A, Rannik Ü, Haapanala S, Levula J, Laakso H, Ojala A, Peltola O, Heiskanen J, Pumpanen J, Vesala T (2015) Carbon dioxide and energy fluxes over a small boreal lake in Southern Finland. *J Geophys Res*. 120: 1296-1314
77. Marchenko A.V., Morozov E.G. Seiche oscillations in Lake Valunden (Spitsbergen) // *Russ. J. Earth. Sci*. 2016. V. 16, №2. P. 22.
78. Martynov Andrey, Sushama Laxmi, Laprise René, Winger Katja, Dugas Bernard. Interactive lakes in the Canadian Regional Climate Model, version 5: the role of lakes in the regional climate of North America // *Tellus A*. — 2012. — Vol. 64.
79. Mellor, G.L., and T. Yamada, Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems, *Rev. Geophys. Space Phys.*, 20, 851-875, 1982.
80. Michaelis L., Menten M. L. Die kinetik der invertinwirkung // *Biochem. z*. — 1913. — T. 49. — №. 333—369. — C. 352.
81. Miles J.W. On the stability of heterogeneous shear flows // *J. Fluid Mech*. 1961. V. 10. No 4. P. 496–508
82. Mironov D. V., Golosov S. D., Zilitinkevich S. S., Kreiman K. D. and Terzhevik A.Yu, Seasonal changes of temperature and mixing conditions in a lake // *Modelling air-lake interaction. Physical Background* ed. S S Zilitinkevich (Springer-Verlag, Berlin) - 1991 – pp. 74-90.
83. Mironov Dmitrii, Heise Erdmann, Kourzeneva Ekaterina, Ritter Bodo. Implementation of the lake parameterisation scheme FLake into the numerical weather prediction model COSMO // *Boreal Environment Research*. — 2010. — Vol. 15, no. 2. — P. 218–230.
84. Mittal R., Iaccarino G. Immersed boundary methods // *Annu. Rev. Fluid Mech*. 2005. V. 37. P. 239-261.
85. Morinishi Y., Lund T.S., Vasilyev O.V., Moin P. Fully conservative higher order finite difference schemes for incompressible flow // *J. Comp. Phys*. 1998. V. 143, N 1. P. 90-124.

86. Mortikov E.V. Numerical simulation of the motion of an ice keel in stratified flow // *Izv. Atmos. Ocean. Phys.* 2016. V. 52. P. 108-115.
87. Mortikov E.V., Glazunov A.V., Lykosov V.N. Numerical study of plane Couette flow: turbulence statistics and the structure of pressure-strain correlations // *Russian J. of Numerical Analysis and Mathematical Modelling.* 2019. V. 34, № 2. P.1-14
88. Nordbo A, Launiainen S, Mammarella I, Leppäranta M, Huotari J, Ojala A, Vesala T (2011) Long-term energy flux measurements and energy balance over a small boreal lake using eddy covariance technique. *J Geophys Res.* 116:D02119
89. Ohya Y. Wind-tunnel study of atmospheric stable boundary layers over a rough surface / Y. Ohya // *J. Bound.-Layer Meteor.* – 2001. – Vol. 98. – P. 57–82.
90. Parameterization of lakes in numerical weather prediction. Description of a lake model. Technical report : / *Deutscher Wetterdienst* ; Executor:D.V. Mironov : 2008. — P. 41.
91. Parsons T., Takahashi M., Hargrave G. *Biological Oceanographic Processes.* Pergamon Press, New York, 1984. 330 P.
92. Price J.F. On the scaling of stress-driven entrainment experiments. // *Journal of Fluid Mechanics.* 1979. V.90, №4. P. 509.
93. Pushistov P. Yu., and Ievlev K. V. Numerical eddy-resolving model of non-stationary penetrative convection in spring solar heating of ice-covered lakes, *Bull. Inst. Comput. Math. Math. Geophys.*, Vol. 5, pp. 55 – 63, 2000.
94. Q. Zheng, J. Li, F. Huang, An optimal Steffensen-type family for solving nonlinear equations, *Applied Mathematics and Computation*, vol.217, pp. 9592–9597, 2011.
95. Raymond, P., Hartmann, J., Lauerwald, R. et al. Global carbon dioxide emissions from inland waters. *Nature* 503, 355–359 (2013)
96. Reichert, P. 1994. AQUASIM - A tool for simulation and dataanalysis of aquatic systems. *Water Sci. Technol.* 30:21–30
97. Rehmann C. R. Mean potential energy change in stratified grid turbulence / C. R. Rehmann, J. R. Koseff // *Dynamics of Atmospheres and Oceans.* – 2004. – Vol. 37, N 4. – P. 271–294.
98. Rivas M. B. Sea ice extent from satellite microwave sensors // *Triennial Scientific Report.* – 2007. – T. 2009. – P. 9.
99. Rodi, W. *Turbulence Models for Environmental Problems*, in Kollmann, W. (ed.), *Prediction Methods for Turbulent Flows*, Hemisphere Publ. Co., London, 1980, pp. 259–349.
100. Roget E., Khimchenko E., Forcat F., Zavialov P. The internal seiche field in the changing South Aral Sea (2006–2013) // *Hydrology and Earth System Sciences.* 2017. V.21, №2. P.1093–1105.
101. Rontu Laura, Eerola Kalle, Kourzeneva Ekaterina, Vehviläinen Bertel. Data assimilation and parametrisation of lakes in HIRLAM // *Tellus A.* — 2012. — Vol. 64.

102. Rosentreter, J.A., Borges, A.V., Deemer, B.R. et al. Half of global methane emissions come from highly variable aquatic ecosystem sources. *Nat. Geosci.* 14, 225–230 (2021).
103. Rybushkina G., Troitskaya Yu., Soustova I. (2013a) "Ice and snow regimes of the Volga River reservoirs on the base of Jason-1,2 satellite observations", Living Planet 2014 Symposium, Edinburg (UK), 9-13 Sept., 2013.
104. Rybushkina G., Troitskaya Yu., Soustova I. (2013b) "Water level and SWH variations in the middle-sized lakes of Russia on the base of Jason-1, 2 satellite measurements ", Living Planet 2014 Symposium, Edinburg (UK), 9-13 Sept., 2013.
105. Samuelsson P., Kourzeneva E. and Mironov D. The impact of lakes on the European climate as simulated by a regional climate model // *Boreal Env. Res.* № 15. – 2010. – P. 113-129.
106. Schmid, M., Ostrovsky, I. and McGinnis, D.F. (2017), Role of gas ebullition in the methane budget of a deep subtropical lake: What can we learn from process-based modeling?. *Limnol. Oceanogr.*, 62: 2674-2698. <https://doi.org/10.1002/lno.10598>
107. Schulz Silke, Matsuyama Hidetoshi, Conrad Ralf. Temperature dependence of methane production from different precursors in a profundal sediment (Lake Constance) // *FEMS Microbiology Ecology*.— 1997.— Vol. 22, no. 3.— P. 207–213.
108. Scott R.W. and Huff F. A. Lake effects on climatic conditions in the Great lakes basin // *Illinois State Water Survey, Champaign.* – 1997. – P. 1-74. 44.
109. Sentinel-1 Mission <https://sentinel.esa.int/web/sentinel/missions/sentinel-1>
110. Skamarock, W. C., J. B. Klemp, J. Dudhia, D. O. Gill, Z. Liu, J. Berner, W. Wang, J. G. Powers, M. G. Duda, D. M. Barker, and X.-Y. Huang, 2019: A Description of the Advanced Research WRF Version 4. NCAR Tech. Note NCAR/TN-556+STR, 145 pp.
111. Skowron Rajmund, Piasecki Adam. Dynamics of the daily course of water temperature in Polish lakes // *Journal of Water and Land Development*.—2016.— Vol. 31.— P. 149–156.
112. Soleymani F., S. Karimi Vanani, Optimal Steffensen-type methods with eighth order of convergence, *Computers and Mathematics with Applications*, vol. 62, pp. 4619–4626, 2011.
113. Stefan Heinz G, Fang Xing. Dissolved oxygen model for regional lake analysis // *Ecological Modelling*.— 1994.— Vol. 71, no. 1–3.— P. 37–68.
114. Stepanenko V. et al. Simulation of surface energy fluxes and stratification of a small boreal lake by a set of one-dimensional models // *Tellus, Series A: Dynamic Meteorology and Oceanography*. 2014. V. 66. P. 21389
115. Stepanenko V., Mammarella I., Ojala A., Miettinen H., Lykosov V., Vesala T. LAKE 2.0: a model for temperature, methane, carbon dioxide and oxygen dynamics in lakes // *Geoscientific Model Development*. — 2016. — Vol. 9, no. 5. — P. 1977–2006.

116. Strang E.J., Fernando H.J. Vertical mixing and transports through a stratified shear layer // *J.Phys.Oceanogr.* 2001. V.31. P. 2026-2048.
117. Stretch D.D. et al. Transient mixing events in stably stratified turbulence // 14th Australasian Fluid Mech. Conference. 2001. Australia.
118. Subin Zachary M., Murphy Lisa N., Li Fuyun, Bonfils Céline, Riley William J. Boreal lakes moderate seasonal and diurnal temperature variation and perturb atmospheric circulation: analyses in the Community Earth System Model 1 (CESM1) // *Tellus A.* — 2012. — Vol. 64.
119. Tan Zeli, Zhuang Qianlai, Walter Anthony Katey. Modeling methane emissions from arctic lakes: Model development and site-level study // *Journal of Advances in Modeling Earth Systems.* — 2015. — Vol. 7. — URL: <http://doi.wiley.com/10.1002/2014MS000344>.
120. Tan Zeli, Zhuang Qianlai. Arctic lakes are continuous methane sources to the atmosphere under warming conditions // *Environmental Research Letters.* 2015. Vol. 10, no. 5. P. 054016.
121. The NCEP/NCAR Reanalysis Project
<https://www.esrl.noaa.gov/psd/data/reanalysis/reanalysis.shtml>
122. Tranvik L. J., Downing J. A., Cotner J. B., Loiselle S. A., Striegl R. G., Ballatore T. J., Dil-lon P., Knoll L. B., Kutser T et al. Lakes and reservoirs as regulators of carbon cycling and climate // *Limnology and Oceanography* - 2009 – vol. 54. – pp. 2298-2314.
123. Tsuang B.-J., C.-J. Tu, and K. Arpe. Lake parameterization for climate models. - Report No. 316, Max Planck Institute for Meteorology, Hamburg, 2001, 72 pp.
124. Umlauf L., H. Burchard, and K. Hutter. Extending the $k-\omega$ turbulence model towards oceanic applications. *Ocean Modelling*, Vol. 5, 2003, pp. 195-218.
125. Volodin, E.M., Mortikov, E.V., Kostykin, S.V. et al. Simulation of the present-day climate with the climate model INMCM5. *Clim Dyn* 49, 3715–3734 (2017).
<https://doi.org/10.1007/s00382-017-3539-7>
126. Walker Robert R., Snodgrass William J. Model for Sediment Oxygen Demand in Lakes // *Journal of Environmental Engineering.*— 1986.— Vol.112, no. 1.— P. 25–43.
127. Wang, F., Ni,G., Riley,W.J., Tang, J., Dejun, Z. and Sun,T. Evaluation of the WRF lake module (v1.0) and its improvements at a deep reservoir // *Geoscientific Model Development*, 2019, 12. pp. 2119-2138.
128. Watson Andrea, Stephen Karl D., Nedwell David B., Arah Jonathan R.M. Oxidation of methane in peat: Kinetics of CH₄ and O₂ removal and the role of plant roots // *Soil Biology and Biochemistry.*— 1997.— Vol. 29, no. 8.— P. 1257–1267.
129. Wilson J. Estimating greenhouse gas emission via degassing and modeling temperature profiles in tropical reservoirs. - Uppsala universitet. - 2021.

130. Xiao, C., Lofgren, B. M., Wang, J., & Chu, P. Y. Improving the lake scheme within a coupled WRF-lake model in the Laurentian great lakes // *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 8,4(2016-12-22),8(4), 2016
131. Zeikus J G, Winfrey M R. Temperature limitation of methanogenesis in aquatic sediments. // *Applied and environmental microbiology*.— 1976.— Vol. 31, no. 1.— P. 99–107.
132. Zilitinkevich, S.S., Elperin, T., Kleerorin, N., and Rogachevskii, I., “Energy- and Flux-Budget (EFB) turbulence closure models for stably-stratified flows. Part I: Steady-state, homogeneous regimes,” *Boundary-Layer Meteorol.*, 2007, vol. 125, pp. 167–191.
133. Zilitinkevich, S.S., Elperin, T., Kleerorin, N., Rogachevskii, I., and Esau, I., “A hierarchy of Energy and Flux-Budget (EFB) turbulence closure models for stably-stratified geophysical flow,” *Boundary-Layer Meteorol.*, 2013, vol. 146, pp. 341–373
134. Адаменко В.Н. Климат и озера (к оценке настоящего, прошлого и будущего).— Ленинград: Гидрометеиздат, 1985.— С. 264.
135. Астраханцев Г.П., Меншуткин В.В., Петрова Н.А., Руховец Л.А. Математическое моделирование крупных стратифицированных озёр // Санкт-Петербург: Наука, 2003. С. 320.
136. Баклагин В.Н. Изменчивость ледовитости Онежского озера в период 2000-2018 гг. по спутниковым данным. *Лёд и Снег*. 2018;58(4):552-558.
137. Березов Т. Т., Коровкин Б. Ф. Б 48. Биологическая химия: Учебник.— 3-е изд., перераб. и доп.— М.: Медицина, 1998.— 704 с
138. Биохимия: учебник / Под редакцией Северина Е. С. — М.:Гэотар-Мед, 2004. — 784 с.
139. Вуглинский В.С. Оценка изменений характеристик ледового режима водных объектов для различных регионов страны в современных климатических условиях // *Вестник СПбГУ. Науки о Земле*. 2014. №3.
140. Гладских Д.С., Степаненко В.М., Мортиков Е.М. О влиянии горизонтальных размеров внутренних водоемов на толщину верхнего перемешанного слоя. // *Водные ресурсы*. 2021. Т. 48. № 2. С. 155-163.
141. Горбунов М.Ю. Вертикальное распределение бактериохлорофиллов в гумозных озерах Волжско-Камского заповедника (Республика Татарстан) // *Поволжский экологический журнал*. 2011. № 3. С. 280-293.
142. Дианский Н.А., Фомин В.В., Выручалкина Т.Ю., Гусев А.В. Воспроизведение циркуляции Каспийского моря с расчетом атмосферного воздействия с помощью модели WRF // *Труды Карельского научного центра РАН. Серия Лимнология*. 2016. № 5. С. 21–34.

143. Ефремова Т. В., Здоровеннова Г. Э., Пальшин Н. И. Ледовый режим озер Карелии // Водная среда: обучение для устойчивого развития. Петрозаводск: КарНЦ РАН. 2010. С. 31-40.
144. Захаренков И.С. О лимнологической классификации озер Белоруссии. Биологические основы рыбного хозяйства на внутренних водоемах Прибалтики // Труды X науч. конф. по внутренним водоемам Прибалтики. Минск: Наука и техника, 1964.
145. Зилитинкевич С.С., Крейнман К.Д. Теоретическое и лабораторное исследование термического бара // Океанология.— 1990.— Т. 30, № 5.— С. 750–755.
146. ИАЦ Регистра и Кадастра <http://gis.vodinfo.ru/>
147. Иванов П. В. Классификация озер по величине и по их средней глубине // Бюл. ЛГУ. 1948. № 21. С. 29-36
148. Козицкая В. Н. Влияние экологических факторов (освещение, температура) на рост водорослей // Гидробиологический журнал, 1989. №6. с. 55-70.
149. Коротеев М.П., Ульбаев Т.С., Артамонова И.М. Роль метана в парниковом эффекте // Природообустройство. 2009. № 1. С. 44-49.
150. Крейнман К. Д., Голосов С. Д., Сквородов Е. П. Влияние турбулентного перемешивания на фитопланктон // Водные ресурсы, 1992. №3. с. 92-97.
151. Кузнецова А. М., Байдаков Г. А., Папко В. В., Кандауров А. А., Вдовин М. И., Сергеев Д. А., Троицкая Ю. И. Натурные исследования и численное моделирование ветра и поверхностных волн на внутренних водоемах средних размеров // Метеорология и гидрология. Т. 2016, №2, с. 85-97, doi:10.3103/S1068373916020084
152. Лыкосов В. Н. О проблеме замыкания моделей турбулентного пограничного слоя с помощью уравнений для кинетической энергии турбулентности и скорости ее диссипации // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1992. Т. 28. с. 696–704.
153. Монин А. С., Озмидов Р. В. Океанская турбулентность. Л.: Гидрометеиздат, 1981, 376 с.
154. Монин А. С., Яглом А. М. Статистическая гидромеханика. Часть 1. Под ред. Г.С. Голицына. Москва: Наука. 1965.
155. Островский А.М., Решение уравнений и систем уравнений, пер. с англ.— М.: Издательство иностранной литературы, 1963. — 220 с.
156. Островский Л.А., Троицкая Ю.И. Модель турбулентного переноса и динамика турбулентности в стратифицированном сдвиговом потоке // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1987. № 3. С. 1031-104.
157. Полищук В. Ю., Полищук Ю. М. Моделирование запасов метана в термокарстовых озерах на основе геоимитационного подхода и спутниковых снимков // Информационные технологии и системы. – 2020а. – С. 16-21.

158. Полищук В. Ю., Полищук Ю. М. Система моделирования для оценки объемов метана в термокарстовых озерах арктики на основе геоимитационной модели с логнормальным распределением их по размерам // Проблемы экоинформатики. – 2020б. – С. 224-227.
159. Пуклаков В. В., Гречушникова М. Г. Термический режим москворецких водохранилищ // Метеорология и гидрология, 2001. №12. с. 70-78.
160. Пуклаков В. В., Ершова М. Г., Гречушникова М. Г. Математическое моделирование внутриводоемных процессов в водохранилище // Проблемы гидрологии и гидроэкологии. М.: Изд-во МГУ, 1999. Вып. 1. с. 302-317.
161. Родионова Н.В., Филатов А.В., Евтюшкин А.В. Изменение текстурных параметров ледяного покрова южной части озера Байкал в период ледостава 2010 года по радарным данным ALOS PALSAR // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2013. Т. 10. № 2. С. 173–181.
162. Сергеев Д.А., Гладских Д.С., Байдаков Г.А., Соустова И.А., Троицкая Ю.И. О моделировании термического режима внутренних водоемов с использованием данных глобального метеорологического реанализа на примере Горьковского водохранилища // Метеорология и гидрология. 2020. № 4. С. 104 – 112.
163. Смахтин В.К. Ледовый режим озёр забайкалья в условиях современного потепления. Лёд и Снег. 2018;58(2):225-230.
164. Снегирёв А.Ю. Высокопроизводительные вычисления в технической физике. Численное моделирование турбулентных течений: Учебное пособие. - СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2009. - 143 с.
165. Степаненко В.М. Математическое моделирование теплового режима и динамики парниковых газов в водоёмах суши. Дисс. На соиск. уч. ст. д.ф-м.н., 2018а, 361 с.
166. Степаненко В.М. Параметризация сейш для одномерной модели водоёма // ТРУДЫ МФТИ. 2018б. Том 10, №1. С. 97-111
167. Степаненко В.М. Численное моделирование взаимодействия атмосферы с водоемами суши. Дисс. На соиск. уч. ст. к.ф-м.н., 2007, 159 с.
168. Степаненко В.М. Численное моделирование термического режима мелких водоемов // Вычислительные технологии. 2005. Т.10, ч.1. с.100-106.
169. Троицкая Ю. И. К теории турбулентной вязкости в стратифицированной жидкости, Препринт 143 ИПФ АН, 1986
170. Филатов Н.Н., Исаев А.В, Савчук О.П. Оценка состояния и прогнозирование изменений гидрологического режима и экосистем крупных озер. // Труды Карельского научного центра Российской академии наук, по. 3, 2019, с. 99-113.

171. Цветова Елена Александровна Моделирование пузырькового выхода газа в условиях стратифицированной среды водоема // Интерэкспо Гео-Сибирь. 2017. №1.
172. Цыденов Б.О., Старченко А.В. Численная модель взаимодействия "река-озеро" на примере весеннего термобара в озере Камлупс // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика.— 2013.— № 5.— С. 102–115
173. Шимараев М. Н. Циркуляционные факторы изменения ледово-термического режима Байкала // География и природ. ресурсы. — 2007. — № 4. — С. 54–60.

Основные публикации автора по теме диссертации

1. Гладских Д. С., Сергеев Д. А., Байдаков Г. А., Соустова И. А., Троицкая Ю. И. О численном моделировании термических режимов внутренних водоемов с использованием экспериментальных данных // Процессы в геосредах. 2017. № 3 (17). С. 210 - 211. (ВАК)
2. Гладских Д.С., Соустова И.А., Троицкая Ю.И., Мортиков Е.В. О влиянии стратификации и сдвига на турбулентное перемешивание во внутренних водоемах // Процессы в геосредах. 2019. № 4 (22). С. 459 - 465. (ВАК)
3. Сергеев Д. А., Гладских Д. С., Байдаков Г. А., Соустова И. А., Троицкая Ю. И. О моделировании термического режима внутренних водоемов с использованием данных глобального метеорологического реанализа на примере Горьковского водохранилища // Метеорология и гидрология. 2020. № 4, с. 104 – 112. (ВАК)
4. Гладских Д. С., Мортиков Е. В., Степаненко В. М. Численное моделирование вертикального переноса биохимических примесей во внутренних водоемах // Процессы в геосредах. — 2020. — Т. 26, № 4. — С. 885–891. (ВАК)
5. Соустова, И. А., Троицкая, Ю. И., Гладских, Д. С., Мортиков, Е. В., и Сергеев, Д. А. Простое описание турбулентного переноса в стратифицированном сдвиговом потоке применительно к описанию термогидродинамики внутренних водоемов // Известия Российской академии наук. Физика атмосферы и океана. – 2020. - Т.56, № 6. – С. 689–699. (ВАК, WoS, Scopus)
6. Гладских Д. С., Степаненко В. М., Мортиков Е. В. О влиянии горизонтальных размеров внутренних водоемов на толщину верхнего перемешанного слоя // Водные ресурсы. — 2021. — Т. 48, № 2. — С. 155–163. (ВАК, WoS, Scopus)
7. Ivanov, A.V., Troitskaya, Y.I., Sergeev, D.A., Baydakov, G.A., Gladskikh, D.S. Model development for online monitoring of water quality in the lake type reservoir. International Multidisciplinary Scientific GeoConference Surveying Geology and Mining Ecology Management, SGEM, 2017, 17(33), стр. 259–266 (Scopus)
8. Gladskikh, D., Sergeev, D., Baydakov, G., Soustova, I., Troitskaya, Y. 2018 The Problem of Forecasting of Vertical Temperature Distribution in Inland Hydrophysical Objects with Experimental Data. In: Karev, V., Klimov, D., Pokazeev, K. (eds) Physical and Mathematical Modeling of Earth and Environment Processes. PMMEEP 2017. Springer Geology. Springer, Cham. (WoS Scopus)
9. Gladskikh, D., Sergeev, D., Baydakov, G., Soustova, I., Troitskaya, Yu. 2018 Numerical modeling of thermal regime in inland water bodies with field measurement data Journal of Physics: Conference Series, Volume 955, 012019 (WoS) Scopus)
10. Gladskikh, D. S.; Soustova, I. A.; Troitskaya, Yu I.; Zilitinkevich, S. S.; Sergeev, D. A 2019 A simple description of turbulent transport in a stratified shear flow devoted to the simulation of thermohydrodynamics of inland waters Journal of Physics: Conference Series, Volume 1163 012033 (WoS, Scopus)

11. Gladskikh, D.S., Mortikov, E.V., Stepanenko, V.M. Numerical simulation of turbulent mixing and transport of biochemical substances in inland waters IOP Conference Series: Earth and Environmental Science, 2020, 611(1), 012013 . (Scopus)
12. Gladskikh D., Soustova I., Troitskaya Y., Mortikov E. (2021) On the Influence of Stratification and Shear on the Turbulent Mixing in Inland Waters. In: Chaplina T. (eds) Processes in GeoMedia - Volume II. Springer Geology. Springer, Cham. (Scopus)
13. Gladskikh D., Stepanenko V., Mortikov E. (2021) On the Factors Affecting Mixed Layer Depth in the Inland Water Objects. In: Chaplina T. (eds) Processes in GeoMedia - Volume II. Springer Geology. Springer, Cham. (Scopus)
14. Gladskikh, D. S., Kuznetsova, A. M., Baydakov, G. A., & Troitskaya, Y. I. (2022). Numerical Simulation of the Thermal Regime of Inland Water Bodies Using the Coupled WRF and LAKE Models. In Processes in GeoMedia—Volume IV (pp. 317-325). Springer, Cham. (Scopus)

Свидетельства о государственной регистрации

1. ПРОГРАММА ДЛЯ РАСЧЕТА И ВИЗУАЛИЗАЦИИ ТЕРМИЧЕСКИХ РЕЖИМОВ ВНУТРЕННИХ ВОДОЕМОВ НА ОСНОВЕ ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ТЕРМОГИДРОДИНАМИКИ LAKE

Гладских Д.С., Шерстнева Л.В., Сергеев Д.А.

Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ 2020619533, 18.08.2020. Заявка № 2020618733 от 03.08.2020.

2. БАЗА ДАННЫХ НАТУРНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПРОФИЛЕЙ ГОРЬКОВСКОГО ВОДОХРАНИЛИЩА В ПЕРИОД ОТКРЫТОЙ ВОДЫ 2014-2019 ГГ

Гладских Д.С., Байдаков Г.А., Сергеев Д.А.

Свидетельство о регистрации базы данных 2021620223, 04.02.2021. Заявка № 2020622736 от 21.12.2020.

3. ПРОГРАММА "ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ ТЕРМОГИДРОДИНАМИКИ И БИОГЕОХИМИИ ПРОТОЧНЫХ ВОДОЁМОВ LAKE3.0"

Степаненко В.М., Гладских Д.С., Ломов В.А, Мортиков Е.В.

Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ 2022611441, 25.01.2022. Заявка № 2022610404 от 14.01.2022.

Приложение А. Геофизическая модельная функция CMOD5.

УЭПР, согласно алгоритму CMOD5 [Hersbach, 2003], выражается как

$$\sigma^0 = b_0,$$

где b_0, b_1, b_2 – функции скорости ветра v и угла падения θ .

Введем параметр $x = (\theta - 40)/25$.

Функция b_0 определена как:

$$b_0 = 10^{a_0 + a_1 v} f(a_2 v, s_0)^\gamma,$$

где:

$$f(s, s_0) = \begin{cases} (s/s_0)^\alpha g(s_0), & s < s_0, \\ g(s), & s \geq s_0, \end{cases}$$

где, в свою очередь:

$$g(s) = 1/(1 + \exp(-s)), \alpha = s_0(1 - g(s_0)).$$

Функции a_0, a_1, a_2, γ и s_0 зависят только от введенного параметра x , зависящего от угла падения:

$$a_0 = c_1 + c_2 x + c_3 x^2 + c_4 x^3,$$

$$a_1 = c_5 + c_6 x,$$

$$a_2 = c_7 + c_8 x,$$

$$\gamma = c_9 + c_{10} x + c_{11} x^2,$$

$$s_0 = c_{12} + c_{13} x.$$

Член b_1 выражается следующим образом:

$$b_1 = \frac{c_{14}(1 + x) - c_{15}v(0.5 + x - \tanh[4(x + c_{16} + c_{17}v)])}{1 + \exp(0.34(v - c_{18}))},$$

а член b_2 определен как:

$$b_2 = (-d_1 + d_2 v_2) \exp(-v_2).$$

Здесь:

$$v_2 = \begin{cases} a + b(y - 1)^n, & y < y_0, \\ y, & y \geq y_0, \end{cases} y = \frac{v + v_0}{v_0},$$

где:

$$y_0 = c_{19}, n = c_{20}, a = y_0 - \frac{y_0 - 1}{n}, b = \frac{1}{n(y_0 - 1)^{n-1}}.$$

Параметры v_0 , d_1 и d_2 – функции параметра x :

$$v_0 = c_{21} + c_{22}x + c_{23}x^2,$$

$$d_1 = c_{24} + c_{25}x + c_{26}x^2,$$

$$d_2 = c_{27} + c_{28}x.$$

Коэффициенты представлены в Таблице А.1.

Таблица А.1. Коэффициенты для геофизической модельной функции СМ0D5.

Параметр	Коэффициент	Значение	Параметр	Коэффициент	Значение
a_0	c_1	-0.668	b_1	c_{15}	0.007
	c_2	-0.793		c_{16}	0.33
	c_3	0.338		c_{17}	0.012
	c_4	-0.173		c_{18}	22.0
a_1	c_5	0.0	y_0	c_{19}	1.95
	c_6	0.004		c_{20}	3.0
a_2	c_7	0.111	v_0	c_{21}	8.39
	c_8	0.0162		c_{22}	-3.44
γ	c_9	6.34		c_{23}	1.36
	c_{10}	2.57	d_1	c_{24}	5.35
	c_{11}	-2.18		c_{25}	1.99
s_0	c_{12}	0.4	d_2	c_{26}	0.29
	c_{13}	-0.6		c_{27}	3.80
b_1	c_{14}	0.045		c_{28}	1.53

Приложение Б. Оптимальный по Кунгу-Траубу метод восьмого порядка, свободный от производных.

Оптимальными (Kung and Traub, 1974) называются одноточечные и многоточечные методы, порядок сходимости которых равен n и 2^{n-1} соответственно, где n – число горнеров, используемых методом. Горнером (или единицей Горнера) называется работа, затраченная на вычисление значения функции или одной из ее производных (Островский, 1963). Важнейшим понятием в теории итерационных процессов является порядок сходимости итерационного метода. Он определяется следующим образом. Пусть $\{x_n\}$ – последовательность действительных чисел, которая сходится к корню r , и предположим, что $x_k \neq r$ для любого k . Говорят, что скорость сходимости последовательности $\{x_n\}$ к корню r имеет порядок t , если

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|x_{n+1} - r|}{|x_n - r|^t} = C,$$

где $t \geq 1$ и $C > 0$.

В работах (Kung and Traub, 1974; Zheng et al., 2011; Soleymani, 2011) представлены семейства оптимальных методов восьмого порядка, свободных от производных. Для конструирования трехшаговых методов, свободных от производных, будем использовать приведенную в работах структуру «Трауб-Стеффенсен – Ньютон – Ньютон», которая выглядит следующим образом:

$$y_n = x_n - \frac{f(x_n)}{f[x_n, w_n]}, \tag{Б.1.1}$$

$$w_n = x_n - \beta f(x_n), \beta \in R - \{0\}, \tag{Б.1.2}$$

$$z_n = y_n - \frac{f(y_n)}{f'(y_n)}, \tag{Б.1.3}$$

$$x_{n+1} = z_n - \frac{f(z_n)}{f'(z_n)}. \tag{Б.1.4}$$

Первая строка представляет собой метод Трауба-Стеффенсена. В случае, когда параметр $\beta = -1$, он принимает вид классического метода Стеффенсена. Величина $w_n = x_n - \beta f(x_n)$ выбирается на первом шаге для первой производной, чтобы обеспечить наибольшую общность предложенного алгоритма.

При конструировании класса методов высокого порядка, свободных от производных, в первую очередь мы задаем приближения для $f'(y_n)$ и $f'(z_n)$:

$$f'(y_n) \approx f[x_n, y_n] = \frac{f(y_n) - f(x_n)}{y_n - x_n};$$

$$f'(z_n) \approx f[y_n, z_n] = \frac{f(z_n) - f(y_n)}{z_n - y_n}.$$

Так мы получаем следующую схему:

$$y_n = x_n - \frac{f(x_n)}{f[x_n, w_n]}, \quad (Б.2.1)$$

$$w_n = x_n - \beta f(x_n), \beta \in R - \{0\}, \quad (Б.2.2)$$

$$z_n = y_n - \frac{f(y_n)}{f[x_n, y_n]} \{G(t)\}, \quad (Б.2.3)$$

$$x_{n+1} = z_n - \frac{f(z_n)}{f[z_n, y_n]} \{H(\tau) + K(\varphi)\}. \quad (Б.2.4)$$

где $t = \frac{f(y_n)}{f(w_n)}$, $\tau = \frac{f(y_n)}{f(x_n)}$, $\varphi = \frac{f(z_n)}{f(w_n)}$, а $G(t)$, $H(\tau)$, $K(\varphi)$ – вещественнозначные функции, которые должны быть выбраны так, чтобы порядок сходимости обеспечивал оптимальность метода. В данном случае методы должны иметь восьмой порядок сходимости.

В (Soleymani and Karimi Vanani, 2011) представлена и доказана следующая теорема:

Пусть функция $f: D \subset R \rightarrow R$ на интервале D имеет простой корень $\gamma \in D$, и f достаточно гладкая в окрестности γ функция. Тогда класс методов без памяти, определенный (Б.2), имеет восьмой порядок сходимости и является оптимальным, когда

$$G(0) = G'(0) = 1, \quad G''(0) = 2, \quad |G'''(0)| \leq \infty;$$

$$H(0) = 1, \quad H'(0) = 0, \quad H''(0) = \frac{-2}{\beta f[x_n, w_n] - 1}, \quad H'''(0) = 0, \quad |H^{(v)}(0)| \leq \infty;$$

$$K(0) = 0, \quad K'(0) = 2 - \beta f[x_n, w_n], \quad |K''(0)| \leq \infty.$$

Уравнение погрешности для данного класса методов имеет вид:

$$e_{n+1} = \frac{1}{24C_1^7} C_2^2 (-2C_2^2 + C_1 C_3) (-1 + C_1 \beta)^2 - 24C_1^2 C_4 (-1 + C_1 \beta)^2 + C_2^3 + (-1 + C_1 \beta)^4 H^{(v)}(0) e_n^8 + O(e_n^9).$$

Положим $\beta = 1$, тогда (Б.2) примет вид:

$$y_n = x_n - \frac{f(x_n)}{f[x_n, w_n]}, w_n = x_n - f(x_n),$$

$$z_n = y_n - \frac{f(y_n)}{f[x_n, y_n]} \{G(t)\},$$

$$x_{n+1} = z_n - \frac{f(z_n)}{f[z_n, y_n]} \{H(\tau) + K(\varphi)\}.$$

Теперь найдем весовые функции $G(t)$, $H(\tau)$, $K(\varphi)$ из условий, представленных в теореме:

$$G(t) = 1 + \frac{f(y_n)}{f(w_n)} + \left(\frac{f(y_n)}{f(w_n)}\right)^2.$$

$$H(\tau) = 1 - \frac{1}{f[x_n, w_n] - 1} \left(\frac{f(y_n)}{f(w_n)}\right)^2.$$

$$K(\varphi) = (2 - f[x_n, w_n]) \frac{f(z_n)}{f(w_n)}.$$

Таким образом, получили следующий оптимальный трехшаговый метод восьмого порядка без памяти, свободный от производных:

$$y_n = x_n - \frac{f(x_n)}{f[x_n, w_n]}, \tag{Б.3.1}$$

$$w_n = x_n - f(x_n), \tag{Б.3.2}$$

$$z_n = y_n - \frac{f(y_n)}{f[x_n, y_n]} \left\{1 + \frac{f(y_n)}{f(w_n)} + \left(\frac{f(y_n)}{f(w_n)}\right)^2\right\}, \tag{Б.3.3}$$

$$x_{n+1} = z_n - \frac{f(z_n)}{f[z_n, y_n]} \left\{1 - \frac{1}{f[x_n, w_n] - 1} \left(\frac{f(y_n)}{f(w_n)}\right)^2 + (2 - f[x_n, w_n]) \frac{f(z_n)}{f(w_n)}\right\}. \tag{Б.3.4}$$

Уравнение погрешности примет вид:

$$e_{n+1} = \frac{(-1 + C_1)^2 (2C_2^2 - C_1 C_3) C_2^2 [(-1 + C_1)^2 C_1^2 C_4 + (1 + C_1(-5 + 3C_1)) C_2^3 - 4(-1 + C_1)^2 C_1 C_2 C_3]}{C_1^7} e_n^8 + O(e_n^9).$$