ТРЕХМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ТЕРМОГИДРОДИНАМИКИ ЗАМКНУТОГО ВОДОЕМА.

Рустамов Эркин Тохирович

Азиатский международный университет

Аннотация: Работа озер и водохранилищ является актуальной темой при решении широкого круга проблем. Процессы, происходящие в них, с одной стороны, вызывают самостоятельный интерес в области гидрологии и экологии, с другой — являются важным аспектом в глобальных проблемах метеорологии и климатологии.

Ключевые слова: озера, водохранилища, объект, гидрология, экология, метеорология, климатология, глобальные задачи, химическая технология, дисперсия.

Annotatsiya: Ko'l va suv omborlari ishining dolzarbligi keng ko'lamli muammolarni hal qilishda tadqiqot ob'ekti bo'lib, ularda sodir bo'layotgan jarayonlar, bir tomondan, gidrologiya va ekologiya doirasida mustaqil qiziqish uyg'otadi, ikkinchi tomondan, meteorologiya va iqlimshunoslikning global muammolarida muhim jihat hisoblanadi

Kalit so‘zlar: ko'llar, suv omborlari, ob'ekt, gidrologiya, ekologiya, meteorologiya, iqlimshunoslik, global vazifalar, kimyogar texnologiyasi, dispersiya.

Annotation: The work of lakes and reservoirs is a relevant topic in addressing a wide range of issues. The processes occurring in them, on one hand, generate independent interest in the fields of hydrology and ecology, while on the other hand, they are an important aspect of global problems in meteorology and climatology.

Keywords: lakes, reservoirs, object, hydrology, ecology, meteorology, climatology, global challenges, chemical technology, dispersion.

Введение

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):

ISSN 3030-3907

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -A(u) + D_H(u,\lambda_m) + D_z(u,K_m+\nu) - \vartheta\frac{\partial \eta}{\partial x} - \frac{g}{\rho_0}\frac{\partial}{\partial x}\int_z^\eta \rho dz' + f\nu, \quad (1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -A(u) + D_H(u,\lambda_m) + D_z(u,K_m+\nu) - \vartheta\frac{\partial \eta}{\partial y} - \frac{g}{\rho_0}\frac{\partial}{\partial y}\int_z^\eta \rho dz' + fu, \quad (2)$$

$$\nabla \cdot u = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial \vartheta}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -A(T) + D_H(T,\lambda_h) + D_z(T,K_h+\chi'), \quad (4)$$

$$\rho = \rho(T), \quad (5)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = (u_h \cdot \nabla_h)\eta = w, \quad (6)$$

Здесь $u = (u,\upsilon,w)$ – вектор скорости, u_h –горизонтальные компоненты, $K_m(\lambda_m)$ и $K_h(\lambda_h)$ коэффициенты вертикальной (горизонтальной) турбулентной вязкости и ттемпературопроводности 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 (1-6) $A(q)$ – оператор адвекции:

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

а $D_H(q,\lambda)$ и $D_z(q,K)$ -операторы горизонтальной и вертикальной диффузии с коэффициентами λ и К 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 терм гидродинамики 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 Куюмазарского водоёме.

ISSN 3030-3907

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.

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:

$$\frac{\partial C_{(\cdot)}}{\partial t}+\left[\frac{\partial u_i C_{(\cdot)}}{\partial x_i}+\frac{\partial w C_{(\cdot)}}{\partial z}\right]=\left[\frac{\partial}{\partial x_i}(\lambda_b+\chi_b)\frac{\partial C_{(\cdot)}}{\partial x_i}+\frac{\partial}{\partial z}(K_b+\chi_b)\frac{\partial C_{(\cdot)}}{\partial z}\right]+R_{(\cdot)}, \quad (7)$$

где $C_{(\cdot)}$ – концентрации веществ, K_b и χ_b – коэффициенты турбулентной и молекулярной диффузии соответственно, а член $R_{(\cdot)}$ – 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 полу неявный 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

ISSN 3030-3907

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).

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):

$$V_R = V_{R\max}\frac{C_s}{K_{hs}+C_s}, \qquad (8)$$

Здесь V_R – скорость реакции, показывающая, как изменяются концентрации веществ или продукт за единицу времени и имеющая размерность $моль/м^3 \cdot с$; $V_{R\max}$ – максимальная скорость реакции, C_s – концентрация субстрата, K_{hs} – константа Михаэлиса (константа полнасыщения), 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 –

ISSN 3030-3907

константа скорости реакции распада фермент-субстратного комплекса на фермент и продукт (см. ниже вывод уравнения для скорости реакции).

На практике для значений констант полнасыщения используются, как правило, данные измерений (например, (Lidstrom and Somers, 1984; Liikanen et al., 2002)). Вывод уравнения (5.5) приведен в (Briggs and Haldane, 1925).

Таблицы-1

Симулятся газа-жидкостными смесью с твёрдыми частицами

V_{max}	0,333	0,4123	0,5112	0,6234	0,7122	0,8234	0,945	1,000	1,5	1,6
f_{kon}	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,000



Рисунок -1. График зависимости концентрации дисперсных смесью от скорости потока жидкости.

Рассмотрим реакцию окисления метана в терминах ферментативной кинетики. Итак, химическое уравнение этой реакции имеет вид:

$$CH_4 + 2O_2 = CO_2 + 2H_2O, \qquad (9)$$

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:

ISSN 3030-3907

$$O_{CH_4(simplifed)} = V_{ox\max} \frac{C_{CH_4}}{K_{hs,CH_4} + C_{CH_4}}, \quad (10)$$

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:

$$O_{CH_4(full)} = V_{ox\max} \frac{C_{CH_4}}{K_{hs,CH_4} + C_{CH_4}} \frac{C_{O_2}}{K_{hs,O_2} + C_{O_2}}, \quad (11)$$

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:

$$F_{SOD} = V_{orox_{ma[}} \frac{C_{O_2}}{K_{O_2SOD} + C_{O_2}} + k_c CO_2, \quad (12)$$

где величины $V_{orox_{\max}}$ – (пропорциональна максимальной скорости окисления органики в отложениях и имеет размерность $моль/м^2 с$) 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_{Ch-a} от глубины используется схема, предложенная (Stefan and Fang, 1994):

$$\rho_{Ch-a} = \rho_{Chl-a_0} H(H_a - z),$$

Где H – функция Хевисайда, H – 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

ISSN 3030-3907

интенсивности ФАР используется ее отношение к интенсивности потока коротковолновой солнечной радиации (Степаненко, 2018а).

Концентрация хлорофилла-а в активном слое ρ_{Ch-a_0} определяется трофическим статусом озера – то есть, его биопродуктивностью - и составляет: $2*10^3\,мГ/л$ – для лиготрофных озер (например, озеро Байкал, Ладожское и Онежское озера), $6*10^3\,мГ/л$ – для мезотрофных озер (Саратовское, Рыбинское, Куйбышевское, Горьковское водохранилища) и $15*10^3\,мГ/л$ – 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):

$$k_{ext} = 0.04 + 0.0083 \cdot \rho_{Ch-a} + 0.054 \cdot (\rho_{Chl-a_0})^{\frac{2}{3}}, \qquad (13)$$

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 $2.5м^{-1}$, 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).

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

ISSN 3030-3907

совокупность гидрологических, физических и биохимических характеристик вод суши. Приведем основные результаты исследования и обозначим направления дальнейшего развития: 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 внут реннего водоема среднего размера на масштабе порядка сезона (весь период открытой воды). Предложена, разработана и программно реализована модификация k-ε 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 сушествование турбулентности при значениях градиентного числа Ричардсона выше критического. Подтверждена принципиальная роль предложенной модификации замыкания при расчете термодинамики водоема в условиях сформировавшегося термоклина.

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 учет ом горизонтальной изменчивости, и ее использование даст возможность уточнить оценки вклада озер и водохранилищ в глобальный углеродный цикл Земли.

ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ЛИТЕРАТУРА

1. Abbasi A., Annor F.O., Giesen N.V. Исследование динамики температуры в малых и мелких водохранилищах, пример: озеро Бинаба, Верхний Восток Ганы // Water. 2016. Т.8, №3. С. 84.

2. Abbasi, A., Annor, F. O., Giesen, N. V. Исследование динамики температуры в малых и мелких водохранилищах, пример: озеро Бинаба, Верхний Восток Ганы // Water 8(3), с. 84 (2016), doi:10.3390/w8030084.

3. Arah J.R.M., Stephen K.D. Модель процессов, ведущих к выбросу метана из болотных земель // Atmospheric Environment. — 1998. — окт. — Т. 32, № 19. — С. 3257–3264.

ISSN 3030-3907

4. Arst H., Erm A., Herlevi A., Kutser T., Lepparanta M., Reinart A., Virta J. Оптические свойства вод boreal озер в Финляндии и Эстонии // Boreal Environment Research. — 2008. — Т. 13, № 2. — С. 133–158.

5. Babajimopoulos C., Papadapoulos F. Математическое прогнозирование термической стратификации озера Острово (Вегоритис), Греция // Water Resources, 1986, 22(11). С. 1590–1596.

6. Bastviken David, Ejlertsson Jorgen, Tranvik Lars. Измерение окисления метана в озерах: Сравнение методов // Environmental Science & Technology. — 2002. — Т. 36, № 15. — С. 3354–3361. — URL: http://dx.doi.org/10.1021/es010311p.

7. Bastviken David, Cole Jonathan J, Pace Michael L, de Bogert Matthew C. Исходы метана из различных озерных экосистем: Связь общих балансов озер и выбросов CH4 // Journal of Geophysical Research: Biogeosciences. — 2008. — Т. 113, № G2. — С. G02024.

8. Bazhin N.M. Транспорт газа в остаточном слое водоема // Chemosphere - Global Change Science. — 2001. — Т. 3, № 1. — С. 33–40.

9. Bazhin N.M. Теоретические аспекты выброса метана из осадков // Chemosphere. — 2003. — янв. — Т. 50, № 2. — С. 191–200.

10. Bertin F. Скорости диссипации энергии, эди-фузивность и число Прандтля: Экспериментальный подход в натуре и его последствия для радиолокационной оценки турбулентных параметров / F. Bertin, J. Barat, R. Wilson // J. Radio Sci. — 1997. — Т. 32, № 2. — С. 791–804.

11. Blumberg, A. F. и G. L. Mellor, Описание трехмерной модели циркуляции в прибрежных морях. Трехмерные модели прибрежных морей, ред. N. Heaps, 208 с., American Geophysical Union, 1987.

12. Borrel Guillaume, Jézéquel Didier, Biderre-Petit Corinne, Morel-Desrosiers Nicole, Morel Jean-Pierre, Peyret Pierre, Fonty Gérard, Lehours Anne-Catherine. Производство и потребление метана в экосистемах пресных озер. // Research in microbiology. — 2011. — Т. 162, № 9. — С. 832–847.

13. Deemer B., Harrison A., Li S., Beaulieu J., Delsontro T. и др. (2016) Выбросы парниковых газов с поверхности водохранилищ: Новый глобальный синтез, Springer. BioScience, 66, 11, 949–964.

14. Deltares, 2017a. Гидро-морфодинамика: Руководство пользователя. Deltares, Нидерланды.

15. Deltares, 2017b. Описание библиотеки процессов качества воды D-water: Техническое руководство. Deltares, Нидерланды.

16. Deltares, 2017c. Качество воды и водная экология: Руководство пользователя. Deltares, Нидерланды.

ISSN 3030-3907

17. Deutzmann Jörg S, Schink Bernhard. Анаэробное окисление метана в осадках озера Констанц, олиготрофного пресноводного озера. // Applied and Environmental Microbiology. — 2011. — Т. 77, № 13. — С. 4429–4436.

18. Diekert Gabriele, Wohlfarth Gert. Метаболизм гомоацетогенов // Antonie van Leeuwenhoek. — 1994. — Т. 66, № 1-3. — С. 209–221.

19. Downing J.A и др. Глобальная распространенность и размерное распределение озер, прудов и водохранилищ // Limnology and Oceanography. 2006. Т. 51, № 5. — С. 2388–2397.

20. Esau I. Симуляции больших вихрей геофизических турбулентных потоков с приложениями к исследованию планетарного пограничного слоя / I. Esau // Труды 5-й конференции по вычислительной механике «MekIT'09», Тронхейм, 26–27 мая. 2009, Tapir Academic Press. — 2009. — С. 7–37.

ISSN 3030-3907