

ОЦЕНКА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ МОДЕЛЕЙ МИГРАЦИИ ВЕЩЕСТВ В ПОЧВЕ РАЗНОГО УРОВНЯ ПО ЛИЗИМЕТРИЧЕСКОМУ СТОКУ

Водный блок физически обоснованных моделей разного уровня, модели с гомогенной пористостью (PEARL) и модели, учитывающей двойную пористость почв (MACRO), был параметризован и протестирован по результатам изучения водного режима дерново-подзолистой тяжелосуглинистой почвы больших лизиметров МГУ. В качестве входных параметров использовали экспериментальные лабораторные и полевые динамические данные. Анализ чувствительности моделей, оцененной по данным о лизиметрическом стоке на нижней границе (1,5 м) почвы, показал, что параметры ОГХ являются главным физическим обеспечением моделей, задающим точность прогноза. Именно эти параметры необходимо использовать для настройки модели. Модель MACRO лучше описывала лизиметрический сток в вегетационный период за счет учета в модели быстрых потоков по макропорам и трещинам, возникающих в периоды интенсивных осадков.

Введение

В последние годы модели движения веществ все шире используются для решения вопросов, касающихся санкционированного использования различных агрохимикатов, в частности пестицидов, и их регистрации на уровне Европейского Союза и в США. В России математическое моделирование как метод оценки экологической опасности пестицидов для окружающей среды только получает распространение.

Полуэмпирические модели поведения пестицидов используют для расчета различные физически обоснованные уравнения описания потоков воды и веществ в почве. Модели транспорта веществ могут быть разделены на две основные категории: хроматографические потоковые модели (ХП), которые основываются на дифференциальном конвективно-диффузионном уравнении переноса веществ в почве без учета наличия в почве макропор, трещин и пр., и модели, учитывающие наличие в почве избирательных (предпочтительных) потоков (ПП), возникающих вследствие наличия трещин набухания и усадки, формирования межпедных трещин, макропор различного происхождения.

Модели преимущественного потока (ПП-модели) являются комплексными и имеют много параметров, которые трудно измерить. Специфические параметры могут даже не иметь рекомендуемых методик для их экспериментального определения. Следовательно, использование ХП-моделей может быть альтернативой использованию ПП-моделей в случае, когда ограничен набор вводимых в

модель параметров, и преимущественный перенос может быть описан такими моделями при задании некоторых параметров, способствующих формально описать преимущественные потоки. Поэтому нашей задачей было оценить возможность и качество прогноза ХП-моделей и ПП-моделей. Однако для решения подобных задач необходимо знать, какими параметрами и как управлять, то есть знать чувствительность модели к параметрам, а также возможности настройки (адаптации) модели по экспериментальным данным. Это и составило цель работы.

Задачи работы:

1. Экспериментально получить гидрофизические и гидрохимические параметры почв, являющиеся экспериментальным обеспечением моделей, а также полевой материал по движению поровых растворов в лизиметрах Почвенного стационара МГУ.
2. Оценить чувствительность моделей разного уровня PEARL 3.3.3. (ХП) и MACRO 5.0 (ПП) и способность моделей описывать лизиметрический сток на нижней границе почвы в течение вегетационного периода.

Объекты и методы

Модель PEARL 3.3.3. – одна из ХП моделей, используемых для оценки поведения пестицидов на уровне Европейского Союза (ЕС). Модель MACRO 5.0 – наиболее часто используемая модель серии ПП-моделей. Модель PEARL описана детально (Leistra M., Tiktak A. et al., 2001; Tiktak A. et al., 2000). PEARL использует модель SWAP (van Dam J.C. et al., 1997) (SWAP – почва – вода – атмосфера – растения)

как блок водного и температурного режимов. Движение воды рассчитывается по уравнению Ричардса на основе основной гидрофизической характеристики (ОГХ) и функции влагопроводности, полученных для каждого почвенного слоя (горизонта).

Отличие модели двойной пористости MACRO (Jarvis, 1991, 1995) от модели PEARL в том, что она делит поровое пространство почвы на два домена (макропоры и микропоры), каждый из которых характеризуется своей скоростью потока. В ней, как и в модели PEARL, используются уравнение Ричардса, чтобы моделировать поток воды в микропорах почвы. Упрощенный балансовый подход применяется, чтобы вычислить потоки в макропорах. Физически обоснованный подход используется, чтобы вычислить массообмен между доменами (van Genuchten et al., 1991). По сравнению с классическим подходом с одним доменом (модель PEARL) требуются четыре дополнительных параметра: доля сорбционных центров в каждом домене (van Genuchten, 1980); диффузионная длина пути, регулирующая массообмен между доменами; индекс распределения макропор по размеру; коэффициент фильтрации через микропоры почвы. Доля сорбционных центров в зоне макропор может быть установлена как постоянное отношение макропористости и полной пористости. Диффузионная длина пути может быть представлена радиусом агрегатов, основанным на описании морфологии почвы. Массоперенос не особенно чувствителен к индексу распределения макропор по размеру, который может изменяться в узком диапазоне значений (Jarvis, 1991). Коэффициент влагопроводности для расчета потока через микропоры может быть оценен по ОГХ (Jarvis, 1995). Модель MACRO, в варианте MACRO_DB, описана в работе Сметника, Спиридонова, Шеина (2005).

Объектами исследования служили дерново-подзолистые почвы в Больших лизиметрах Почвенного стационара МГУ. В 1960 г. по проекту Н.А. Качинского на Почвенном стационаре МГУ была закончена постройка станции закрытых изолированных лизиметров размерами 2,8*2,8*1,75. Лизиметры расположены в 2 ряда и разделены между собой

стенкой в 0,5 м. Внутренняя поверхность их (стены и дно) покрыта гидроизоляционным материалом (брезолом), затем выложена кислотоупорными плитками на битуме. Дно лизиметров имеет уклон в сторону общей стенки. В дно каждого лизиметра вделана воронка диаметром 25 см с трубкой, отходящей в галерею под лизиметрами, где в мерные сосуды собираются фильтрационные воды. Мерные сосуды подключены к прибору-счетчику, который фиксирует их наполнение. В целях обеспечения дренажа дно лизиметров засыпано гравием, сначала крупным, затем средним и, наконец, мелким, а над ним лежит десятисантиметровый слой кварцевого песка (Воронин, 1986).

Почва сюда была привезена из Подольского района Московской области и помещена в закрытые лизиметры по горизонтам. Был изучен вариант почвы с нормальным строением почвенного профиля: A_p (0-20), A_2 (20-35), B_1 (35-60), B_2 (60-80), B_3 (80-100). В годы нашего исследования вариант представлял собой чистый пар.

Эксперимент на больших лизиметрах МГУ состоял в том, что велись наблюдения динамики влажности почвы, температуры, контролировался лизиметрический сток. Свойства почвы в лизиметре представлены в табл. 1.

Результаты и обсуждение

Параметры для расчета потенциальной скорости эвапотранспирации, а также метеоданные, необходимые для прогноза (минимальная, максимальная температура в течение дня, суточная радиация, относительная влажность воздуха, скорость ветра и осадки), были получены от метеорологической станции МГУ, которая находится в 500 метрах от места закладки опыта. Поверхность почвы была в состоянии черного пара, поэтому блок растительности в моделях не использовался.

Почвенный профиль делился на шесть слоев (0-10, 10-20, 20-40, 40-60, 60-80 и 80-100 см), параметры Ван Генухтена были получены из лабораторных ОГХ с использованием пакета RETC (van Genuchten M.Th et al., 1991). ОГХ для почвенных слоев были получены методами центрифугирования и равновесия

Таблица 1. Некоторые физические свойства дерново-подзолистой среднесуглинистой почвы (Большой лизиметр почвенного стационара МГУ)

Слой, см	Песок, %	Пыль, %	Глина, %	Плотность почвы, кг/м ³	pHводн.	Сорг, %	Кф, м/сут
A _{пах} 0-20 см	5,3	89,7	5,0	1280	5,81	2,18	0,70
A ₂ 20-40см	4,1	88,8	7,1	1450	5,73	0,77	0,54
B ₁ 40-60см	5,9	89,8	4,3	1490	5,73	0,65	0,36
B ₂ 60-80см	7,6	86,2	6,2	1500	4,50	0,60	0,18
B ₃ 80-100см	18,4	75,5	6,1	1560	4,50	0,81	0,08

Таблица 2. Основные гидрофизические параметры дерново-подзолистой почвы (Большой лизиметр почвенного стационара МГУ)

Слой, см	$\theta_r, \%$	$\theta_s, \%$	n	$\alpha, \text{см}^{-1}$
A _{пах} 0-20 см	0,0005	0,4850	1,2487	0,0265
A ₂ 20-40см	0,0001	0,4360	1,0195	0,0269
B ₁ 40-60см	0,0004	0,4253	1,2619	0,0191
B ₂ 60-80см	0,0007	0,4355	1,2568	0,0215
B ₃ 80-100см	0,0001	0,4271	1,2601	0,0180

над насыщенными растворами солей в различных диапазонах давления влаги («Полевые и лабораторные методы исследования физических свойств и режимов почв», 2001). Параметр θ_s принимался равным 96% от общей порозности за счет заземленного воздуха (Jarvis N.J., 1995). Гидрофизические параметры для основных почвенных слоев представлены в табл. 2.

Тестирование модели пошаговым способом и оценка эксплуатационных качеств модели

Как указывалось выше, мы использовали пошаговый подход для тестирования модели. В этом подходе модель оказывается наиболее чувствительна к ограниченному набору вводимых параметров. Этими параметрами и следует пользоваться при настройке модели. Под чувствительностью модели в нашем случае понимаем относительное воздействие некоторых входных параметров на изменение объема лизиметрического стока.

Для оценки чувствительности моделей к изменению параметров и начальных значений переменных было выбрано несколько показателей, исчерпывающе характеризующих поведение моделей. В качестве этих переменных, которые поочередно изменяли при неизменном уровне остальных, были

выбраны: плотность почвы, коэффициент фильтрации, параметры уравнения Ван Генухтена. Необходимо отметить, что возможная неодинаковая чувствительность модели в разных областях пространства параметров затрудняет прямое использование результатов анализа чувствительности для отбора параметров, нуждающихся в уточнении.

Анализ чувствительности показал (рис. 1), что заметно влияют на результаты модели MACRO 5.0 и PEARL параметры уравнения Ван Генухтена, прежде всего n и θ_s . Физически параметр n отражает распределение пор по размерам и указывает на то, что чем выше n , тем «круче» ОГХ. Физически можно представить себе эти изменения так: при одном гранулометрическом составе почва становится плотнее и в определенном диапазоне n стремительнее пропускает воду. При этом и одна и другая модели имеют следующую тенденцию: уменьшение параметра n соответствует уменьшению объема стока только до некоторого предела, далее сток увеличивается. Это объясняется тем, что минимум стока соответствует оптимальному диаметру капилляров, когда почва может удержать максимальное количество воды, при увеличении n поры становятся излишне тонкими, почва плотнее, межагрегатное расстояние увеличивается, при уменьшении n почва ста-

новиться рыхлее, поры наоборот становятся толще и менисковые силы не способны удерживать воду в них.

θ_s – характеризует максимальный объем воды, способный содержаться в почве, т.е. порозность минус заземленный воздух. И хотя очевидно, что чем больше эта величина, тем больше должен быть сток, – ведь увеличение θ_s приводит прежде всего к увеличению гравитационной влаги, – модели по-разному реагируют на изменение θ_s . Видимо, это связано с разным механизмом передвижения влаги, заложенным в моделях. Модель класса ХП PEARL реагирует на увеличение θ_s увеличением объема стока, как традиционно и описывается в физике почв. А модель MACRO, учитывающая движение воды по макропорам, реагирует на изменение полной влагоемкости, практически не изменяя сток,

так остается прежним соотношение между макро- и микропористостью.

Похожая ситуация складывается и отношении параметра α . α – величина, обратная давлению входа воздуха: чем больше α , тем меньше величина давления входа воздуха, тем «уже» диапазон гравитационной влаги нижесток.

Кроме того, на величину стока оказывает влияние и коэффициент фильтрации. Это закономерно, поскольку чем лучше почва проводит влагу, тем больше гравитационной воды успевает профильтровываться, тем меньше боковой и поверхностный сток. Остальные параметры практически не влияют на результаты прогнозирования. Таким образом, параметры ОГХ являются главным физическим обеспечением моделей, задающим точность прогноза. Именно эти параметры необходимо использовать для настройки модели.

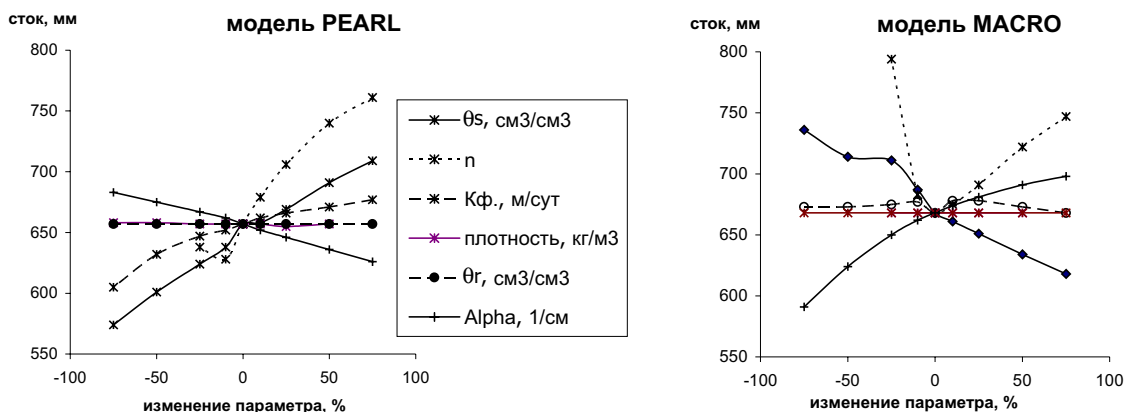


Рисунок 1. Оценка чувствительности моделей по лизиметрическому стоку к изменению входных параметров

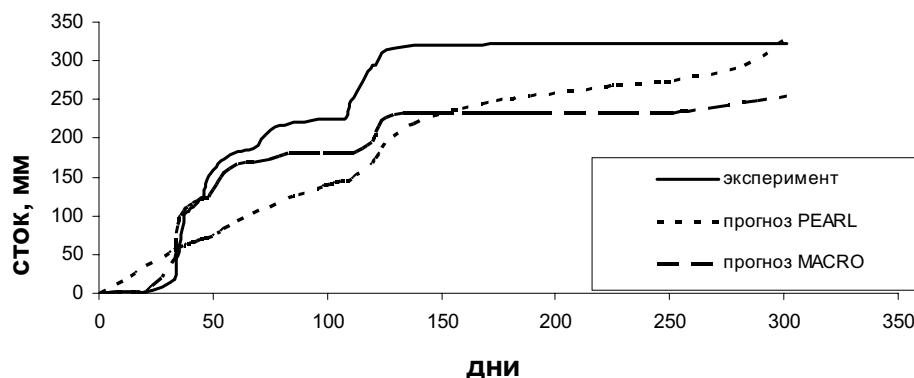


Рисунок 2. Прогнозный и экспериментальный кумулятивный лизиметрический сток модельных почв лизиметров почвенного стационара МГУ за период 05/03/2005-30/12/2005

Прогноз стока модельной почвы

Уже из графиков объема лизиметрического стока видно, что MACRO хорошо описывает точки экстремумов, форму кривой стока, но занижает значения, а модель PEARL, сглаживая кривую, завышает сток в зимний период (рис. 2). Судя по приведенным данным, модели класса MACRO с разделением порового пространства на транспортное и сохраняющее значительно лучше описывают сток на нижней границе почвы. Это отражает их целевое назначение: они должны описывать миграцию токсикантов прежде всего через почвенную толщу, возможность их попадания в грунтовые воды и дальнейшую миграцию по ландшафту.

Сравнение моделей по критерию Вильямса - Клюта показало, что модели достоверно не различаются друг от друга по описанию лизиметрического стока, однако использование модели MACRO предпочтительнее, так как рассчитанный *t*-критерий в непараметрическом критерии Вильямса - Клюта был положителен, что однозначно свидетельствует о предпочтительности использования модели MACRO для описания лизиметрического стока.

Выводы

1. Метод математического моделирования позволяет: 1) отказаться от многочисленных

трудоемких опытов; 2) охватить в исследовании такие временные рамки, которые вмещают в себя десятки вегетационных периодов с различными сценариями погодных условий, получить при этом информацию, ранее принципиально недоступную, и сделать обоснованные выводы о целесообразности агрономических мероприятий и оптимальности срока их выполнения; 3) провести такие эксперименты, естественная реализация которых затруднена по причинам объективного характера.

2. Проведена апробация модели MACRO 5.0 и модели PEARL 3.3.3 для прогноза водного режима дерново-подзолистой почвы. Оценка чувствительности моделей MACRO 5.0 и PEARL 3.3.3 показала, что наибольшее влияние на выходной параметр (объем стока) оказывают параметры уравнения Ван Генухтена для аппроксимации ОГХ.

3. По критерию Вильямса - Клюта модели достоверно не отличаются друг от друга. Тем не менее, сравнение экспериментальных и расчетных значений лизиметрического стока показало, что модель MACRO 5.0 предпочтительнее использовать для описания водного режима почв, поскольку она лучше описывала лизиметрический сток в вегетационный период за счет учета в модели быстрых потоков по макропорам и трещинам, возникающих в периоды интенсивных осадков.

Список использованной литературы:

1. Воронин А.Д. Основы физики почв. М.: МГУ, 1986, 244 с.
2. Сметник А.А., Спиридонов Ю.А., Шеин Е.В. Миграция пестицидов в почвах. М.: РАСХН-ВНИИФ, 2005. – 336 с.
3. Jarvis N.J., Bergstrom L and Brown CD, Pesticide leaching models and their use for management purposes, in Environmental behaviour of agrochemicals, ed by Roberts Tr and Kearney PC, Wiley, New York, pp 185-220 (1995).
4. Jarvis N.J., Jansson P.E., Dik P.E., Mssing I. Modeling water and solute in macroporous soil. I. Model description and sensitivity analysis. J. of Soil Sci. 1991 V. 42. pp. 59-70/
5. Leistra M., van der Linden AMA, Boesten JJTI, Tiktak A and van den Berg F. PEARL model for pesticide behaviors and emissions in soil-plant systems: description of the processes. Alterra Rep 13, Wageningen University and Research Centre, Wageningen University. 115 pp (2001)
6. Tiktak A, van den Berg F, Boesten JJTI, van Kraalingen D, Leistra M. and van der Linden AMA, Manual of FOCUS PEARL v 1.1.1, RIVM Rep 711401008, RIVM, Bilthoven, The Netherlands, 144 pp (2000).
7. van Dam JC, Hyygen J, Wesseling JG, Feddes RA, Kabat P, van Walsum PEV, Groenendijk P and van Diepen CA. Theory of SWAP version 2.0. Simulation of water flow, solute transport and plant growth in the soil-water-atmosphere-plant environment. Wageningen University, The Netherlands, 167 pp (1997)
8. van Genuhten M.Th, Leij and Yates SR, The RETC code for quantifying the hydraulic functions of unsaturated soils, US Salinity Lab, Riverside, CA (1991).
9. van Genuhten M.Th. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soil. Soil Sci. Soc. Am. J. 1980. V. 44. P. 892-898.

Статья рекомендована к публикации 19.03.07