

УДК 631.4

DOI: 10.19047/0136-1694-2019-99-76-91

Ссылки для цитирования:

Шишкин К.В., Белик А.А., Кокорева А.А., Ежелев З.С. Оценка адекватности модели стока и температуры в Больших лизиметрах почвенного стационара МГУ // Бюллетень Почвенного института имени В.В. Докучаева. 2019. Вып. 99. С. 76-91. DOI: 10.19047/0136-1694-2019-99-76-91

Cite this article as:

Shishkin K.V., Belik A.A., Kokoreva A.A., Ezhelev Z.S., Adequateness assessment of percolate and temperature model using MSU Large lysimeters, Dokuchaev Soil Bulletin, 2019, V. 99, pp. 76-91, DOI: 10.19047/0136-1694-2019-99-76-91

Оценка адекватности модели стока и температуры в Больших лизиметрах почвенного стационара МГУ

© 2019 г. А. А. Белик^{1,2*}, К. В. Шишкин^{1**},
А. А. Кокорева^{1***}, З. С. Ежелев^{1****}

¹МГУ им. М.В. Ломоносова, Россия,
119234, Москва, Ленинские Горы, 1

^{**}<https://orcid.org/0000-0001-9289-0802>,

e-mail: konstantin.shishkin.99@mail.ru,

^{***}e-mail: kokoreva.a@gmail.com,

^{****}<https://orcid.org/0000-0003-4577-4694>, e-mail: ejelevsil@gmail.com.

²ВНИИ Фитопатологии, Россия
143050, Московская область, Одинцовский район,
р. п. Большие Вяземы, ул. Институт, владение 5,

^{*}e-mail: belikalexandra@gmail.com.

Поступила в редакцию 31.05.2019, после доработки 30.10.2019,
принята к публикации 21.11.2019

Резюме: Проводилась апробация модели PEARL 4 на основании данных стока и температуры в Больших лизиметрах почвенного стационара МГУ. Лизиметрические установки используются в экспериментальном почвоведении главным образом для изучения составляющих водного баланса почвы и исследований выноса различных веществ из отдельных почвенных горизонтов или всего почвенного профиля. Модель PEARL 4, водный блок которой построен на основе классической модели SWAP,

использует механизм описания преимущественных потоков в почве. Режимные наблюдения в модельных почвах Больших лизиметров МГУ позволили получить обширные данные по динамике температуры, влажности почвы, а также данные по стоку с нижней границы модельной почвы, что является уникальным материалом для адаптации, проверки и настройки любых моделей энерго/массопереноса в почве. Показано, что для достоверного соответствия стока с нижней границы и прогнозных профилей влажности и температуры с реальными значениями параметризованная математическая модель требует настройки путем подбора параметров аппроксимации основной гидрофизической характеристики (ОГХ). Установлено, что в зимний период времени ошибка прогноза всех показателей увеличивается. Таким образом, использование подобных моделей миграции веществ в почве для долгосрочного прогноза, например, для оценки риска загрязнения грунтовых вод агрохимикатами при ежегодном применении в 10-летний период, затруднительно ввиду ежегодного накопления общей ошибки прогноза к периоду весеннего снеготаяния.

Ключевые слова: модельные почвы, граничные условия, оценка риска.

Adequateness assesment of percolate and temperature model using MSU Large lysimeters

A. A. Belik^{1,2*}, K. V. Shishkin^{1**},
A. A. Kokoreva^{1***}, Z. S. Ezhevlev^{4****}

¹Lomonosov Moscow State University,
1 Leninskie Gori, Moscow 119234, Russian Federation,

^{**}<https://orcid.org/0000-0001-9289-0802>,

e-mail: konstantin.shishkin.99@mail.ru,

^{***}e-mail: kokoreva.a@gmail.com

^{****}<https://orcid.org/0000-0003-4577-4694>, e-mail: ejelevsoil@gmail.com.

²All-Russian Research Institute of Phytopathology,

5 Institute Str., Bol'shiye Vyazemy 143050

Moscow region, Russian Federation,

*e-mail: belikalexandra@gmail.com.

Received 31.05.2019, Revised 30.10.2019, Accepted 21.11.2019

Abstract: The assesment of PEARL model adequateness was carried out on the basis of temperature and percolate data obtained by means of MSU Large Lysimeters. Lysimeters are used in experimental soil science mostly for investigating water balance and substance or ions transport from observed

horizons or full soil profile. PEARL 4 model, the water prediction block of which is built on the basis of classical SWAP model, uses preferential water flow describing mechanism. Systematical observation of experimental soils in MSU Large lysimeters allowed obtaining extensive data on temperature and soil moisture dynamics, as well as percolate from bottom border. These measurements are unique and can become the basis for adaptation, verification and setting of mass and energy transfer models. It was shown, that mathematical parametric model requires adjustment for reaching reliable values of percolate from bottom border, moisture and temperature profiles. It can be achieved by selection of water retention curve (WTC) approximation parameters. It was noticed that the error for all predicted parameters increases in winter period. Thereby, the use of such matter transfer models in soil are problematic for long-term prognosis. For example, due to the annual error accumulation before the spring season such models cannot be applied for estimation of the risk of ground water pollution with agrochemicals.

Keywords: modeled soils, boundary conditionals, risk assessment.

ВВЕДЕНИЕ

Использование математических моделей в практике оценки риска применения различных агрохимикатов является необходимым условием для их экологической оценки. Моделирование процессов переноса воды и веществ имеет экономическое преимущество перед другими методами исследования, позволяя учитывать весь возможный ряд климатических и почвенных условий. Однако на данный момент, сценарии, используемые для оценки риска, не являются полностью протестированными на реальных данных. При этом заложенный в сценарии заведомо больший риск вымывания веществ из почвы в реальности может быть все-таки превышен ввиду некоторых особенностей расчета внутри модели. Поэтому проверка работы моделей для конкретных почвенно-климатических условий представляется необходимым для каждой вводимой в практику модели оценки риска.

Традиционно выделяют три типа моделей: стохастические, аналитические и детерминистические. Наиболее точные, применяемые в почвоведении, – детерминистические. По типу описания порового пространства почв детерминистические модели делятся на две группы: первые – хроматографические модели, вторые – преимущественно потоковые. Последние разделяют поровое про-

странство почвы на два домена – макропоры и микропоры. В макропорах происходит быстрый перенос воды без взаимодействия растворов с поверхностью почвы (preferential flow), что приводит к перемещению значительных количеств воды и растворенных в ней веществ от поверхности к нижним слоям почвы (Shein et al., 2017). Более простые хроматографические модели предполагают постепенное передвижение вещества с последовательным взаимодействием растворов с почвенной матрицей. В последние годы хроматографические модели вводят модули расчета преимущественных потоков в почве, что в сочетании с более простым устройством делает их использование в различных долгосрочных расчетах перспективнее сложных преимущественно потоковых моделей (Шейн и др., 2009).

Модельные почвы Больших лизиметров МГУ являются уникальными объектами, позволяющими получать непрерывные данные о состоянии почвы на ее верхней и нижней границах. Необходимо понимать, что между нативной почвой и модельной лизиметрической существует ряд отличий в строении, условиях развития, во влиянии боковых стен и дна лизиметра на общий процесс перераспределения влаги, а значит и на температурный режим почвы. Однако эти допущения: 1 – свободный дренаж, что способствует свободному оттоку влаги с нижней границы профиля; 2 – нарушенное естественное залегание горизонтов почвы и, как следствие, изменение физических и химических свойств почвы; 3 – увеличение техногенной и антропогенной нагрузки в условиях города, – только увеличивают вероятность большего оттока влаги вниз по профилю, что является предпочтительным для оценки миграции агрохимикатов в почве. Кроме того, прежде чем вводить в прогноз вещество, необходимо оценить работу почвенного блока модели.

ОБЪЕКТЫ И МЕТОДЫ

Большие лизиметры почвенного стационара МГУ были заложены в 1961 г. Они представляют собой открытые бетонные емкости, заполненные модельной почвой. Основой модельной почвы была дерново-подзолистая почва из Подольского р-на Московской области. Исходная почва была засыпана послойно с

уплотнением каждого уложенного слоя. Модельные почвы имитируют как естественный профиль почвы, так и различные системы обработки почвы. Был изучен вариант почвы с типичным строением почвенного профиля: дерново-подзолистая среднесуглинистая почва со следующими горизонтами: $A_{\text{пах}}$ (0–20 см), A_2 (20–35 см), B_1 (35–60 см), B_2 (60–80 см), B_3 (80–100 см). В годы исследования рассматриваемый вариант представлял собой чистый пар, обработанный весной гербицидами для поддержания открытой почвенной поверхности. Основные свойства модельной дерново-подзолистой почвы лизиметров представлены в таблице 1. Ввиду необходимости сохранения строения модельной почвы свойства были взяты из предыдущих исследований этих почв ([Шеин и др., 2009](#)).

Таблица 1. Характеристики изучаемых почв
Table 1. Characteristics of the studied soils

Горизонт, глубина, см	Песок, 0.05–2 мм	Пыль, 0.002–0.05 мм	Глина, < 0.002мм	Плотность почвы, кг/м ³	рН	С _{орг} , %	К _ф , м/сут
	%						
$A_{\text{пах}}$, 0–20	5.3	89.7	5.0	1280	5.81	2.18	0.70
A_2 , 20–40	4.1	88.8	7.1	1450	5.73	0.77	0.54
B_1 , 40–60	5.9	89.8	4.3	1490	5.73	0.65	0.36
B_2 , 60–80	7.6	86.2	6.2	1500	4.50	0.60	0.18
B_3 , 80–100	18.4	75.5	6.1	1560	4.50	0.81	0.08

Площадь каждого лизиметра составляет 8 м², общая глубина вместе с дренажом – 175 см. Дно емкости каждого лизиметра имеет уклон в сторону воронки, выходящей в подземную часть. В качестве дренажа использован крупнозернистый песок и гравий. Подземная часть лизиметрического комплекса состоит из галерей,

где расположены установки для сбора фильтрационных вод (стока). За время функционирования лизиметрической станции система учета стока была несколько раз модернизирована. Последний этап развития системы мониторинга стока лизиметрических вод, проведенный в рамках данной работы, включил установку площадок для “качелей” под трубками стока осадков с лизиметров и подключение качелей к многопарному кабелю, а также разработку, сборку и установку в галереях блока электронных счетчиков. Это позволило реализовать систему считывания показаний с помощью видеотрансляции через камеру, подключенную к сети интернет. Для настройки моделей миграции веществ достаточно иметь ежесуточные показания стока с нижней границы лизиметров, которые на данном этапе работы собираются вручную. Снятие показаний стока с лизиметров велось раз в два дня с 13.06.2016 г. по 16.08.2017 г.

Для измерения температуры почвы использовались программируемые датчики термохроны iButton. Для исследования были использованы датчики серии DS1921 H-F50 (рабочий диапазон температур от -40°C до $+80^{\circ}\text{C}$ и точность измерения 0.5°C). Термохрон позволяет получать температурные данные с определенным шагом по времени и записывать их в собственной памяти. Датчик устойчив к воздействию внешней среды, но может выйти из строя в условиях повышенного увлажнения. В данной работе датчики фиксировали температуру почвы с шагом 3 ч. на глубинах 5 см, 15 см и 30 см с 12.06.2015 г. по 14.12.2015 г.

Для моделирования температурного режима и стока лизиметров была взята модель PEARL 4, используемая в целях получения прогнозных концентраций пестицидов в процедуре оценки их экологического риска. Это физически обоснованная одномерная, хроматографическая динамическая многоуровневая модель, которая может быть использована для описания различных процессов в почве, в частности, для описания водного или температурного режима. Данная версия модели включает описание домена макропор, и может использоваться в почвах с преимущественными путями миграции. Модель PEARL описана в литературе ([Shein et al., 2017](#)). Водный блок модели построен на основе более ранней и широко распространенной модели SWAP ([Van Dam et al.,](#)

[1997](#)) (SWAP: “почва – вода – атмосфера – растения”) и использует классические законы баланса и переноса.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Параметризация модели PEARL. Изучение функционирования и эволюции модельных почв лизиметров почвенного стационара ведется на протяжении всего времени их существования. Часть входных параметров модели, таких как: гранулометрический состав, содержание органического вещества, плотность, pH, коэффициент фильтрации (табл. 1), – были ранее определены для каждого горизонта почвы ([Шейн и др., 2009](#)). Для получения экспериментального обеспечения моделей в виде основной гидрофизической характеристики (ОГХ) почвенный профиль также делился на слои (0–10, 10–20, 20–40, 40–60, 60–80 и 80–100 см). ОГХ задавалась в виде параметров аппроксимации уравнением Ван Генухтена с использованием пакета RETC ([Van Genuchten et al., 1991](#)). Параметр θ_s близок по смыслу к общей порозности и практически совпадает с ней численно, за исключением объема защемленного в порах воздуха. Параметр n отражает распределение пор по размерам и имеет типичные для суглинистых почв значения. Параметр α – величина обратная давлению входа воздуха (барботирования), отражает диапазон гравитационной влаги.

Таблица 2. Параметры аппроксимации ОГХ уравнением Ван Генухтена
Таблица 2. Basic hydrophysical characteristics approximation parameters by the Van Genuchten equation

Слой, см	$Qr, \text{ м}^3 / \text{ м}^3$	$Qs, \text{ м}^3 / \text{ м}^3$	n	$\alpha, \text{ см}^{-1}$
0–20	0.0004	0.4792	1.25	0.0301
20–40	0.0001	0.4256	1.11	0.0285
40–60	0.0003	0.4199	1.22	0.0184
60–80	0.0009	0.4287	1.27	0.0198
80–100 см	0.0001	0.4312	1.26	0.0174

Поскольку конечной целью была оценка адекватности модели, то, согласно методологии, для тестирования модели пошаговым способом необходима параметризация модели, оценка ее эксплуатационных качеств. В качестве первого шага “слепого теста” ([Сметник, 2000](#)) была исследована часть модели для водного потока (SWAP). Балансовая проверка с ошибкой в 0.01 % показала удовлетворительное схождение баланса, что указывает на физическую адекватность моделей. Следующий этап – это параметризация модели. В качестве физического обеспечения использовались приведенные ранее физические свойства почвы, заданные послойно для всего профиля. Условия на нижней границе почвы – свободный дренаж – было выбрано ввиду большей ошибки баланса в случае выбора лизиметрической границы. Верхнее граничное условие представляет собой все (среднесуточные) экспериментальные метеорологические показатели влагообмена на поверхности модельной почвы: осадки, поливы (отсутствовали), эвапотранспирация (получена расчетным методом) и другие метеопоказатели: минимальная, максимальная температура, давление, радиация. Все эти показатели получены от метеостанции МГУ, расположенной в 150 метрах от территории почвенного стационара.

Моделирование стока из почвы. Моделирование объема лизиметрического стока было проведено для периода июнь 2016 г. – май 2017 г. Из графика объема стока видно, что модель PEARL (SWAP) хорошо описывает точки экстремумов, форму кривой стока. Однако, как и большая часть моделей, данная модель завывает объем стока в зимний период, сглаживает кривую (рис. 1). При этом общее количество стока (453 мм) за весь период моделирования все же меньше реального стока (508 мм) за тот же период. Таким образом, несмотря на модификацию модели последнего поколения PEARL 4 и введение описания механизма преимущественной миграции влаги, модель сохранила проблемы описания потока воды от предыдущих версий. Это может привести к занижению показателей миграции веществ в дальнейшем, что важно при моделировании загрязнения грунтовых вод.

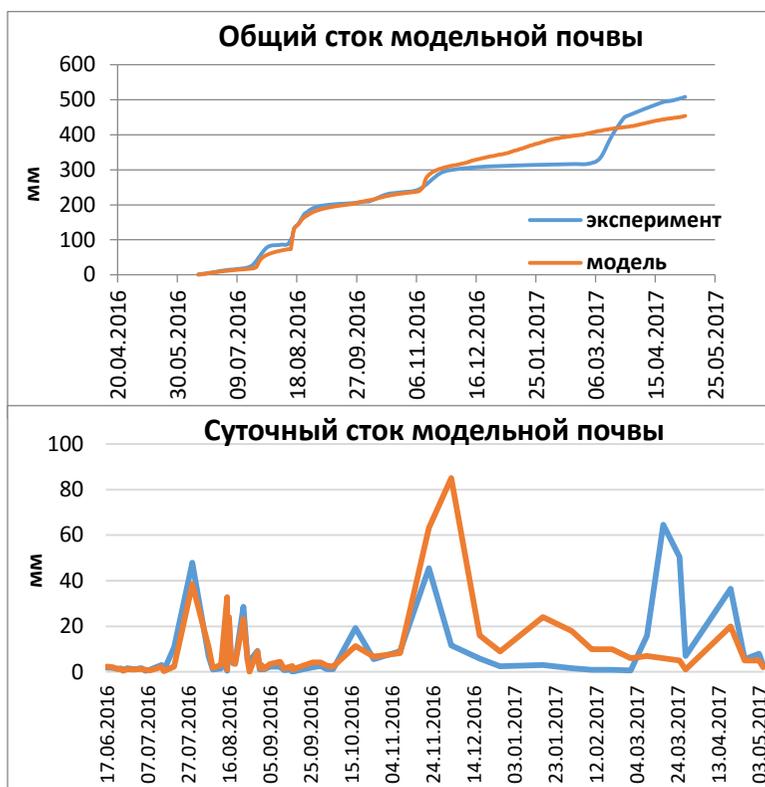


Рис. 1. Сравнение полученных экспериментальных данных с рассчитанными с помощью модели значениями объема лизиметрического стока.

Fig. 1. Comparison of received experimental data with calculated values of percolate.

Такое занижение стока моделью PEARL может быть связано не только с устройством самой модели, но и с вводимыми в модель параметрами ван Генухтена. А также с устройством дренажной системы лизиметра, что невозможно отразить в данной модели.

Для оценки адекватности модели были выбраны следующие статистические критерии: 1) оценка распределения погрешностей

в виде гистограммы с критерием Уилко – Шапиро; 2) характеристика разброса погрешностей в виде Box & Whisker plots.

На рисунке 2 приведены эти критерии. Полученное распределение погрешностей отлично от нормального значения критерия Уилко – Шапиро 0.62, что говорит о том, что использовать параметрические критерии нельзя. Хотя по графикам расположения медиан, квартилей и разброса погрешностей моделирования этого сказать нельзя.

Средняя ошибка, тем не менее, близка к 0, и только предсказания стока в зимний период статистически могут ухудшать прогноз. При оценке прогноза кумулятивного стока нормированная среднеквадратичная ошибка SRMSE для периода от начала наблюдения до наступления зимнего периода была равна 0.41. Однако для зимнего периода, как было сказано выше, модель не учитывает отсутствие стока с нижней границы профиля и SRMSE возросла до 2.85.

Моделирование температуры почвы. После вычисления значений с помощью модели PEARL 4 они сравнивались со значениями, полученными эмпирически с 12.06.2015 г. по 14.12.2015 г. (рис. 3). На рисунке 3 представлена динамика изменения температуры для глубин 5, 15 и 30 см. Температура в почве в верхних слоях изменялась синусоидально вслед за температурой воздуха и редко поднималась даже в летние месяцы выше 25 °С, в среднем оставаясь на уровне 18–20 °С в летний период.

Видно, что колебания температуры на поверхности модельной почвы существенно выше, чем для более глубоких слоев. При этом установившийся снежный покров в зимний период снижает эти колебания. Большие скачки температуры воздуха в начале вегетационного сезона вызвали большой разброс значений и для почвы.

Для оценки адекватности модели были выбраны те же критерии, что и для стока (рис. 4 и рис. 5). Полученное распределение отлично от нормального. Средняя ошибка близка к 0, и, как и при визуальной оценке, точность прогноза температурного режима снижена за счет отдельных значительных колебаний на поверхности.

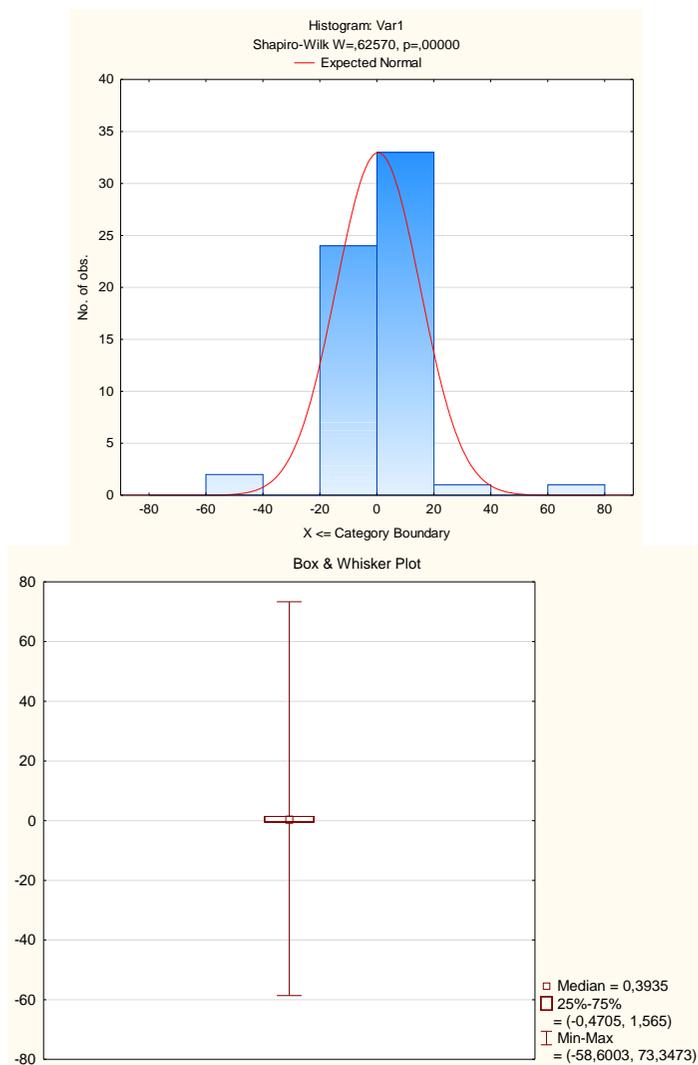


Рис. 2. Оценка распределения погрешностей прогнозирования стока в виде гистограммы с критерием Уилко-Шапиро и характеристика разброса погрешностей в виде Box & Whisker plots.

Fig. 2. Histogram of errors distribution for percolate prediction using Wilco-Shapiro criterion and characteristics of errors distribution using Box & Whisker plots.

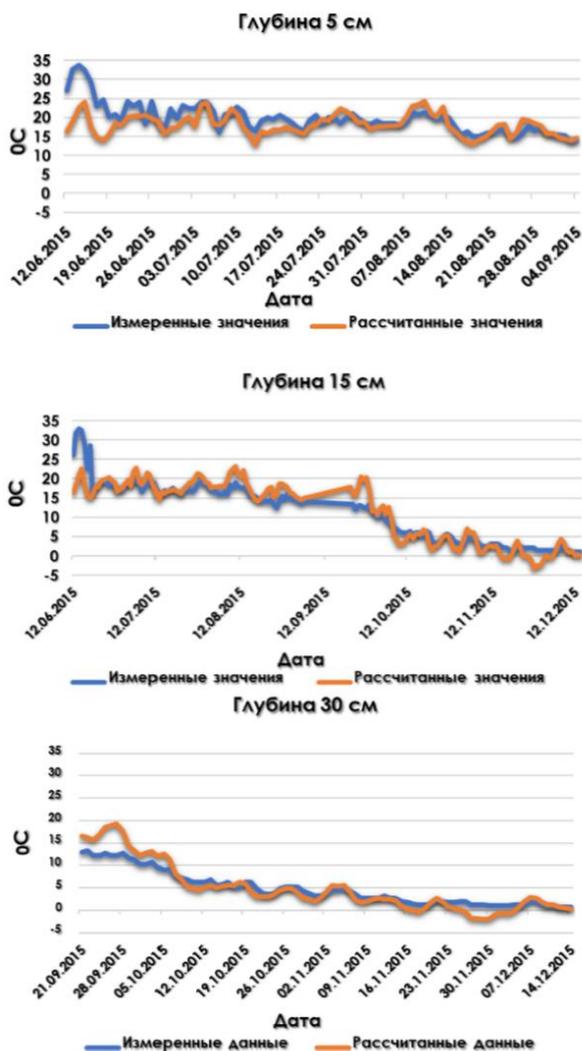


Рис. 3. Сравнение полученных экспериментальных данных с рассчитанными с помощью модели значениями температуры.

Fig. 3. Comparison of received experimental data with calculated values of temperature.

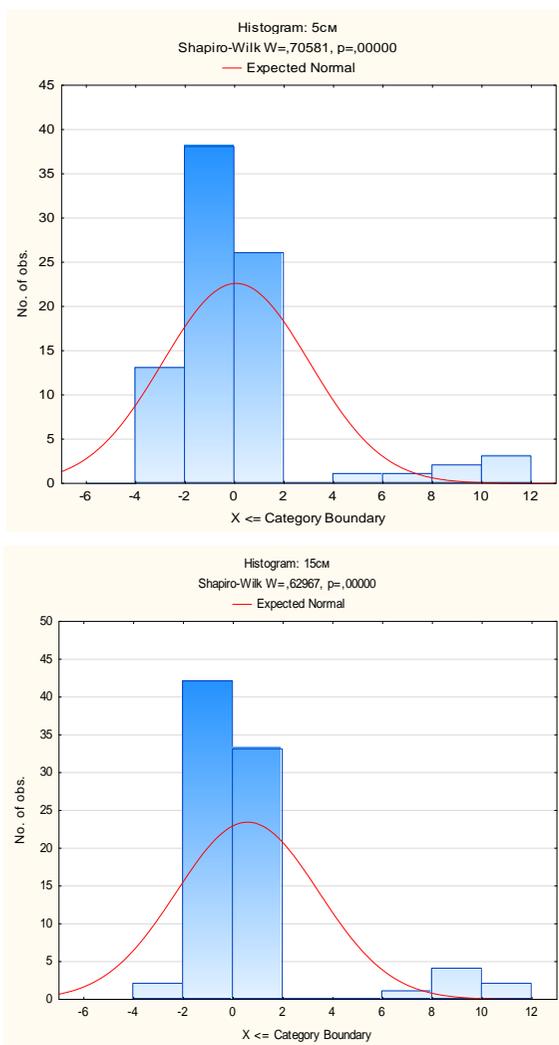


Рис. 4. Оценка распределения погрешностей при прогнозировании температуры в виде гистограммы с критерием Уилко-Шапиро.

Fig. 4. Histogram of errors distribution for temperature prediction using Wilko-Shapiro criterion.

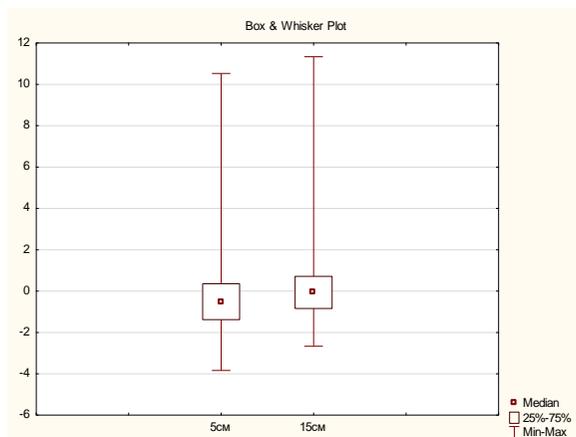


Рис. 5. Характеристика разброса погрешностей при прогнозировании температуры в виде Box&Whisker plots.

Fig. 5. Characteristics of errors distribution in temperature prediction using Box & Whisker plots.

Визуальное сравнение результатов экспериментальных и прогнозных данных (точки экстремумов, амплитуда колебаний) по температуре говорит о том, что модель достаточно хорошо справляется с поставленной задачей, за исключением некоторых дней, когда колебания температуры на поверхности были более резкими.

SRMSE для 5 см равен 0.78, для 15 см – 0.02 и для 30 см – 0.17.

В целом прогноз температуры верхнего горизонта почвы достаточно точен для того, чтобы возможно было провести последующее моделирование разложения агрохимикатов в почве.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведена апробация модели PEARL 4 для прогноза водного и температурного режима дерново-подзолистой почвы. Сравнение экспериментальных и расчетных значений объема лизиметрического стока дало основание рекомендовать использование модели PERL только в весенне-летне-осенний период, когда даже в периоды интенсивных осадков за счет учета в модели механизмов

миграции воды по макропорам модель с достаточной степенью точности справляется с прогнозом. В зимний период прогноз по модели хуже, что будет вносить ошибку в дальнейший расчет миграции воды и веществ в почве. Это важно ввиду использования модели при долгосрочных (10 и более лет) расчетах оценки риска применения агрохимикатов.

БЛАГОДАРНОСТЬ

Работа выполнена по теме Госзадания № 0598-2014-0011 в ФГБНУ ВНИИФ и при поддержке гранта РФФИ 18-34-00801 мол_a.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Шейн Е.В., Кокорева А.А., Горбатов В.С., Умарова А.Б.* Оценка чувствительности, настройка и сравнение математических моделей миграции пестицидов в почве по данным лизиметрического эксперимента // Почвоведение. 2009. № 7. С. 826–834.
2. *Сметник А.А.* Прогнозирование миграции пестицидов в почвах: Автореферат дис. ... докт. биол. наук: 03.00.27; 06.01.11. М., 2000. 56 с.
3. *Shein E.V., Belik A.A., Kokoreva A.A., Kolupaev V.N., Pletenev P.A.* Prediction of Pesticide Migration in Soils: the Role of Experimental Soil Control // Moscow University Soil Science Bulletin. 2017. Vol. 72. No. 4. P. 185–190.
4. *Shein E.V., Belik A.A., Kokoreva A.A., Kolupaeva V.N.* Quantitative Estimate of the Heterogeneity of Solute Fluxes Using the Dispersivity Length Parameter for Mathematical Models of Pesticide Migration in Soils // Eurasian Soil Science. 2018. Vol. 51. No. 7. P. 797–802.
5. *Van Dam J.C., Hyugen J., Wesseling J.G., Feddes R.A., Kabat P., van Walsum P.E.V., Groenendijk P. and van Diepen C.A.* 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, 1997. 167 p.
6. *Van Genuchten M.T., Leij and Yates S.R.* The RETC code for quantifying the hydraulic functions of unsaturated soils. US Salinity Lab. Riverside, CA, 1991.

REFERENCES

1. Shein E.V., Kokoreva A.A., Gorbatov V.S., Umarova A.B., Otsenka chuvstvitel'nosti, nastroyka i sravnenie matematicheskikh modelei migratsii pestitsidov v pochve po dannym lizimetricheskogo eksperimenta (Sensitivity Assessment, Adjustment, and Comparison of Mathematical Models Describing the Migration of Pesticides in Soil Using Lysimetric Data), *Pochvovedenie*, 2009, No. 7, pp. 826–834
2. Smetnik A.A., *Prognozirovaniye migratsii pestitsidov v pochvakh: Diss. ... doc. biol. nauk* (Prediction of pesticides transferring in soils, Dr. biol. sci. thesis), Moscow, 2000, 56 p.
3. Shein E.V., Belik A.A., Kokoreva A.A., Kolupaev V.N., Pletenev P.A., Prediction of Pesticide Migration in Soils: the Role of Experimental Soil Control, *Moscow University Soil Science Bulletin*, 2017, Vol. 72, No. 4, pp. 185–190.
4. Shein E.V., Belik A.A., Kokoreva A.A., Kolupaeva V.N., Quantitative Estimate of the Heterogeneity of Solute Fluxes Using the Dispersivity Length Parameter for Mathematical Models of Pesticide Migration in Soils, *Eurasian Soil Science*, 2018, Vol. 51, No. 7, pp. 797–802.
5. Van Dam J.C., Hyygen J., Wesseling J.G., Feddes R.A., Kabat P., van Walsum P.E.V., Groenendijk P., van Diepen C.A., *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, 1997, 167 p.
6. Van Genuchten M.T., Leij and Yates S.R., *The RETC code for quantifying the hydraulic functions of unsaturated soils*, US Salinity Lab, Riverside, CA, 1991.