

УДК 577.3+631.4

СПОСОБ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЙ КОНТИНУАЛЬНОЙ МОДЕЛИ ТРАНСФОРМАЦИИ ОРГАНИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА ПОЧВЫ

© 2015 г. С. И. Барцев, А. А. Почекутов

Институт биофизики СО РАН

660036, Красноярск, Академгородок, 50/50

E-mail: bartsev@yandex.ru, a-a-po@mail.ru

Поступила в редакцию 01.03.2015 г.

Рассмотрен возможный способ экспериментального определения параметров предложенной авторами ранее математической модели трансформации органического вещества почвы, основанной на использовании скорости гумификации вещества как континуальной шкалы его устойчивости и описывающей процесс трансформации вещества феноменологически, без детального отражения в модели микробиологических механизмов трансформации. За счет этого достигается простота математической модели. Модель представлена в форме одного дифференциального уравнения в частных производных первого порядка, имеющего аналитическое решение в элементарных функциях. Уравнение модели содержит малое количество эмпирических параметров, обобщенно характеризующих условия среды, в которой происходит трансформация органического вещества почвы, и начальные свойства поступающего в почву растительного опада. При наличии значений этих параметров, определяемых из натуральных данных, уравнение модели позволяет рассчитать временную динамику запаса органического вещества в почве и его распределения по скоростям трансформации. В работе рассмотрены возможные подходы к определению параметров модели и предлагается простой способ их экспериментального определения. Для определения параметров модели предлагается проведение эксперимента с инкубацией химически однородного образца в почве и множественными последовательными измерениями уменьшения его массы с течением времени. Выведено уравнение временной динамики уменьшения массы инкубированного однородного образца, вытекающее из базовых предположений предложенной модели. Подбор по методу наименьших квадратов параметров кривой потери массы, рассчитанной по предложенной формуле динамики потери массы и дающей наилучшее совпадение с экспериментальными данными, позволит определить параметры, входящие в общее уравнение модели трансформации органического вещества почвы.

Ключевые слова: органическое вещество почвы, континуальная модель трансформации органического вещества почвы, почвенное дыхание, гумификация, минерализация.

DOI: 10.15372/SJFS20150311

ВВЕДЕНИЕ

Органическое вещество почвы (ОВП) весьма неоднородно по химическому составу и кинетическим свойствам. В почве органическое вещество проходит огромное количество стадий трансформации. Хотя точные формулы большинства соединений, количество стадий превращения, точные значения скоростей их трансформации неизвестны, известна общая направленность этого процесса – превращение вещества из малоустойчивого к трансфор-

мации в более устойчивое при одновременном разложении части вещества до CO_2 , покидающего почву.

Поэтому в модели трансформации ОВП необходимо отразить, по меньшей мере, два одновременных процесса – гумификацию части ОВП, т. е. трансформацию в более устойчивые формы, и минерализацию части ОВП, т. е. разложение до CO_2 .

В большинстве математических моделей ОВП подразделяется на несколько компарментов, каждому из которых присущи свои

скорости трансформации вещества (Чертов и др., 2007). Фактически эти скорости являются усредненными значениями для большого количества веществ, относимых к данному компартменту. Многокомпаратментные модели представляют собой системы обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих кинетику перехода вещества из одних компартментов в другие, а также кинетику минерализации вещества в каждом компартменте. Однако многокомпаратментному подходу присущ ряд принципиальных недостатков, прежде всего произвольность разделения на компартменты и сложность определения параметров моделей, состоящих из большого количества уравнений.

Альтернатива многокомпаратментному подходу – континуальный подход, при котором многостадийный процесс трансформации органики описывается как перемещение вещества по некоторой шкале, отражающей устойчивость его к трансформации (Carpenter, 1981).

Для моделирования трансформации ОВП континуальный подход был развит в работах (Ågren, Bosatta, 1998; Bosatta, Ågren, 2003). Предложенная в них шкала качества субстрата, выражающая доступность субстрата для организмов-разлагателей, позволила получить интегриродифференциальное уравнение в частных производных общего вида, на основе которого было рассмотрено семейство моделей, описывающих динамику распределения ОВП по этой шкале. В этих моделях процесс трансформации ОВП описывался в явном виде как результат деятельности сообщества почвенных организмов-разлагателей. Такое описание повлекло за собой сложность уравнений модели, содержащих значительное количество неизвестных и трудноопределимых параметров и функций, отражающих свойства сообщества разлагателей и химические характеристики трансформируемого субстрата.

Избежать этого и добиться простоты модели позволяет предложенное нами (Bartsev, Pochekutov, 2013, 2015; Почкутов, Барцев, 2014) непосредственное использование величины скорости трансформации ОВП как шкалы его устойчивости. Такой подход позволил получить сравнительно простую модель в виде уравнения в частных производных первого порядка, имеющего аналитическое решение и содержащего лишь два подгоночных

параметра, отражающих свойства среды, в которой идет процесс трансформации. Настоящая работа посвящена теоретическому анализу возможного подхода к экспериментальному определению этих параметров.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

В предложенной модели многостадийный процесс трансформации ОВП описывается как замедляющееся перемещение вещества вдоль шкалы его гумифицированности, сопровождающееся минерализацией части вещества, скорость которой зависит от степени его гумифицированности. В качестве шкалы и меры гумифицированности в модели выбран коэффициент скорости гумификации вещества h , уменьшающийся по мере превращения вещества в более устойчивые формы в процессе гумификации.

Накопление и трансформация ОВП описывается в модели как динамика распределения запасов ОВП по скоростям гумификации $h - C(h, t)$, меняющегося с течением времени t . Тем самым количество ОВП, имеющего в момент времени t скорость гумификации в пределах от h до $h + dh$, равно $C(h, t)dh$.

По модели всякое органическое вещество в почве непрерывно претерпевает превращения, ведущие к уменьшению его h , происходящему со скоростью $v(h) = -\frac{dh}{dt}$. Знак минус здесь показывает, что гумификация ведет к перемещению ОВП в сторону меньших значений по шкале h . Как и в других континуальных моделях (Carpenter, 1981; Bosatta, Ågren, 2003), перемещение вещества по шкале считается однонаправленным. Одновременно с гумификацией часть вещества подвергается минерализации: разлагается и покидает почву со скоростью, равной $k(h)C(h, t)$, где $k(h)$ – коэффициент скорости минерализации.

Уравнение модели представляет собой типичное уравнение переноса (Почкутов, Барцев, 2014):

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(h, t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial h}(v(h)C(h, t)) = \\ = -k(h)C(h, t) + D(h, t), \end{aligned} \quad (1)$$

где $D(h, t)$ – распределение темпов поступления опада по его начальным скоростям гумификации.

Принципиальной особенностью модели является задание функции $v(h)$. Вид этой функции следует автоматически из выбора h в качестве шкалы. Величина $v(h)$ – это скорость перемещения вещества по шкале скоростей реакции гумификации. Представляется разумным считать, что скорость трансформации пропорциональна величине, которая является мерой устойчивости вещества к трансформации. В данном случае такой мерой служит скорость гумификации h , поэтому $v(h) = -\frac{dh}{dt} = rh$. Но коэффициент пропорциональности r здесь тоже должен быть равен h , так как h является коэффициентом скорости реакции, результат которой – дальнейшее продвижение вещества по этой шкале. Следовательно, h одновременно является и изменяющейся величиной, и коэффициентом скорости изменения этой же величины. Поэтому

$$v(h) = -\frac{dh}{dt} = h^2. \quad (2)$$

Тогда общее уравнение трансформации ОВП принимает вид

$$\frac{\partial C(h,t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial h}(h^2 C(h,t)) = -k(h)C(h,t) + D(h,t). \quad (3)$$

Для удобства вычислений опад может быть представлен в виде суммы нескольких его компонентов: $D(h,t) = \sum_i D_i(h,t)$. В этом случае, поскольку все органические вещества и почвы, и опада различаются в модели только своими значениями h , уравнение (3) может быть написано для каждого компонента опада в отдельности:

$$\frac{\partial C_i(h,t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial h}(h^2 C_i(h,t)) = -k(h)C_i(h,t) + D_i(h,t), \quad (4)$$

а общее распределение всего ОВП будет суммой его решений: $C(h,t) = \sum_i C_i(h,t)$.

Для экосистем, существующих длительное время в постоянных условиях, можно предположить постоянство темпов поступления опада и считать неизменным во времени $D(h,t) = D(h)$. В качестве $D(h)$ могут быть взяты среднегодовые распределения количества опада по его начальной скорости гумификации.

Если опад может быть подразделен на несколько компонентов, для каждого из которых заданы среднегодовое количество D_{0i} и начальная скорость гумификации h_{0i} , то

$$D(h) = \sum_i D_{0i} \delta(h - h_{0i}), \quad (5)$$

где δ – дельта-функция Дирака, а индекс i нумерует компоненты опада.

При задании опада в форме (5) решением уравнения (4) будет

$$C_i(h,t) = \frac{D_{0i}}{h^2} \exp(X(h) - X(h_{0i})) \times (f_i(t - 1/h) - \theta(h - h_{0i})), \quad (6)$$

где $X(h) = \int \frac{k(h)}{h^2} dh$, θ – функция-ступенька

Хевисайда, а функции f_i определяются из граничных условий. При условии, что правее h_{0i} на шкале h никогда нет продуктов трансформации i -го компонента опада (в силу однонаправленности перемещения вещества по шкале) и что до момента $t = 0$ никакого органического вещества нет ни в какой точке шкалы (начало формирования почвы), $f_i(t - 1/h) = \theta(t - 1/h + 1/h_{0i})$.

Для конкретизации вида функции $k(h)$ использовалось сравнение рассчитанных по уравнению модели запасов ОВП в стационарном состоянии с запасами ОВП, наблюдаемыми в почвах различных экосистем. Простейший вид $k(h)$, при котором получено совпадение расчетных стационарных запасов ОВП с литературными данными о количестве ОВП в почвах различных экосистем (Почекутов, Барцев, 2014; Bartsev, Pochekutov, 2015), –

$$k(h) = bh^p, \quad (7)$$

где b и p – константы, разные для разных экосистем и подбираемые таким образом, чтобы расчетное количество ОВП совпало с наблюдаемым в почве этой экосистемы при тех значениях параметров опада D_{0i} и h_{0i} , которые в ней наблюдаются.

Стационарное решение уравнения (4) с учетом (7) имеет вид

$$C_i(h) = \frac{D_{0i}}{h^2} \exp\left(\frac{b}{p-1}(h^{p-1} - h_{0i}^{p-1})\right) \times (1 - \theta(h - h_{0i})). \quad (8)$$

Значения h_{0i} могут быть пересчитаны из имеющихся в литературе значений k_{0i} по вытекающей из (7) формуле $h_{0i} = (k_{0i}/b)^{1/p}$. И тогда количество ОВП в стационарном состоянии вычисляется по формуле

$$S = \sum_i \int_0^{h_{0i}} C_i(h) dh = \sum_i D_{0i} \exp\left(\frac{-bh_{0i}^{p-1}}{p-1}\right) \int_0^{h_{0i}} \frac{1}{h^2} \exp\left(\frac{bh^{p-1}}{p-1}\right) dh. \quad (9)$$

Приведенные в работах (Почкутов, Барцев, 2014; Bartsev, Pochekutov, 2015) значения параметров b и p , обеспечивающие совпадение расчетных значений S с имеющимися в литературе оценками запасов ОВП S_{nat} , служат лишь в качестве примера возможности описания запасов ОВП стационарным решением уравнения (3) с $k(h)$, заданной в виде (7).

В то же время следует отметить, что само допущение стационарности наблюдаемых в природных экосистемах запасов ОВП является гипотетическим. Кроме того, как показали проведенные нами вычисления, совпадение S и S_{nat} при наблюдаемых в рассмотренных экосистемах параметрах опада обеспечивается не единственной парой значений b и p . На рис. 1 представлена кривая, точки которой соответствуют парам значений b и p , при которых (с одними и теми же параметрами опада) расчетное значение S получается равным одной

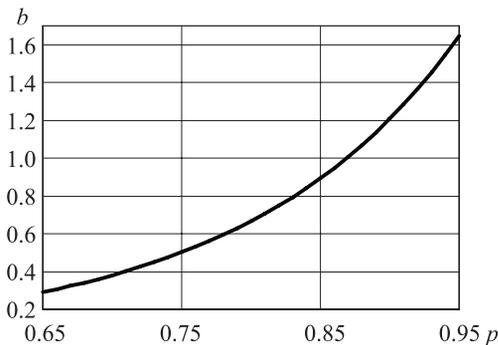


Рис. 1. Кривая, точки которой соответствуют парам значений b и p , обеспечивающим совпадение расчетных и наблюдаемых в природе запасов органического вещества в почве южной тайги $S = S_{\text{nat}} = 14.1 \text{ кгС/м}^2$. Параметры опада и оценки наблюдаемых запасов ОВП для южной тайги рассчитаны на основе данных из работ (Vedrova, 1995, 2005). В расчетах опад подразделен на две составляющие: древесину ($D_{01} = 0.13 \text{ кгС/м}^2\text{год}$), $k_{01} = 0.018 \text{ лет}^{-1}$) и совокупность всех прочих легкоразложимых компонентов ($D_{02} = 0.11 \text{ кгС/м}^2\text{год}$, $k_{02} = 0.17 \text{ лет}^{-1}$).

и той же величине. Эта кривая получена как результат численного решения уравнения (9) относительно b при заданном значении $S = S_{\text{nat}}$ и разных p .

Следовательно, сравнения расчетного количества стационарных запасов ОВП с количеством ОВП, наблюдаемым в реальных экосистемах, недостаточно для однозначного определения пары значений b и p , соответствующих условиям трансформации органического вещества в почве рассматриваемой экосистемы. Предлагаем иной способ определения значений b и p , основанный на использовании данных довольно простого эксперимента. Пусть в момент $t = 0$ в почву помещен химически однородный образец органического вещества массой M_0 . Начальная скорость гумификации его равна h_0 .

Распределение такого образца по шкале h будет представлять собой бесконечно узкий пик:

$$C(h, t = 0) = M \delta(h - h_0), \quad (10)$$

где $M = M_0$ в момент времени $t = 0$.

По модели все вещество, характеризующее одной и той же скоростью гумификации, перемещается по шкале h с одной и той же скоростью $v(h)$. Поэтому распределение, изначально представлявшее собой бесконечно узкий пик, в процессе трансформации вещества будет оставаться бесконечно узким пиком, который будет перемещаться влево по шкале h со скоростью $v(h)$, при этом величина M будет уменьшаться, поскольку количество вещества в распределении уменьшается в результате минерализации.

Из уравнения (2) следует, что к моменту времени t пик, перемещаясь по шкале h , достигнет точки

$$h = 1/(t + 1/h_0). \quad (11)$$

Для однородного образца уменьшение его массы в результате минерализации описывается обычным уравнением распада

$$\frac{dM}{dt} = -k(h)M. \quad (12)$$

Подставляя (7) и (11) в (12) и интегрируя, получим:

$$M(t) = M_0 \times \exp\left(-\frac{b}{1-p} \left[\left(t + \frac{1}{h_0}\right)^{1-p} - \left(\frac{1}{h_0}\right)^{1-p} \right]\right). \quad (13)$$

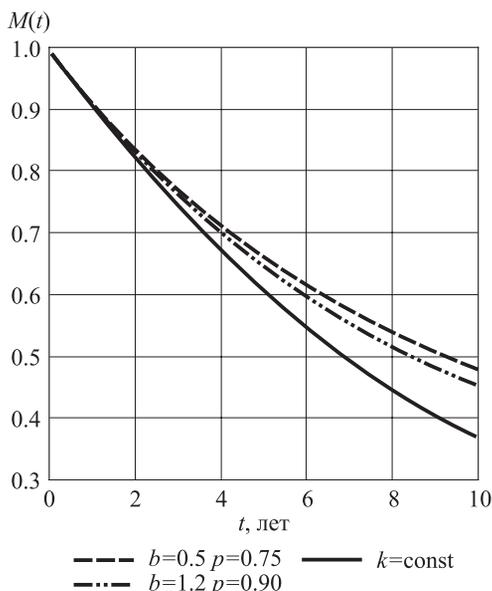


Рис. 2. Кривые минерализационной потери массы, рассчитанные по формуле (13), при различных парах значений b и p . Для сравнения на графике также приведена кривая минерализационной потери массы, рассчитанная по классической экспоненциальной формуле (14), предполагающей постоянство коэффициента скорости минерализации.

Это уравнение минерализационной потери массы образца отличается от уравнения распада с постоянным значением k , обычно применяемого для описания начальной стадии разложения опада (Olson, 1963):

$$M(t) = M_0 \exp(-kt). \quad (14)$$

С течением времени уменьшение k , связанное с учетом повышения устойчивости вещества вследствие гумификации, приводит к различию кривых динамики уменьшения массы образца (рис. 2). Пользуясь таким различием форм кривой, можно предложить способ экспериментального определения параметров b и p .

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Различие форм кривой $M(t)$ при разных значениях b и p позволяет предложить для определения этих параметров простой эксперимент. Поместив в почву химически однородные образцы органического вещества (например, целлюлозы или лигнина) и измеряя уменьшение массы образцов через определенные интервалы времени, можно получить последовательность экспериментальных точек кривой $M(t_i)$. Имея такие экспериментальные

данные, значения параметров h_0 , b и p для функции $M(t)$, рассчитанной по формуле (13), можно определить с помощью метода наименьших квадратов.

В отличие от параметра h_0 , который является характеристикой данного вещества в данных условиях, параметры b и p имеют более общее применение. Согласно модели функция $k(h)$, в которую они входят, характеризует процесс трансформации ОВП в данной экосистеме. Следовательно, эти параметры применимы не только к однородному образцу, но и к любым органическим веществам почвы и опада, находящимся в тех же условиях среды, в которых проводилось экспериментальное определение этих параметров. Эти параметры могут быть использованы для модельных расчета и прогноза динамики формирования распределения ОВП по формулам (6) и (7), стационарного распределения ОВП по формуле (8), количества запасов ОВП по формуле (9).

Эксперименты с инкубацией в почве химически однородных образцов органического вещества (обычно целлюлозы) широко представлены в литературе (Аблаева и др., 2011; Mendelsohn et al., 1999; McClellan et al., 1990). Однако в этих работах, посвященных исследованию разложения целлюлозы в различных условиях (на различной глубине, в почвах различного химического состава, под растениями различных видов и т. п.), количественные данные о скорости разложения целлюлозы представлены в виде оценки либо уменьшения массы образцов к концу времени эксперимента, либо коэффициента скорости разложения образца k , полагаемого константой, как в уравнении (14).

Для однозначного определения параметров континуальной модели трансформации ОВП необходимы данные именно о временной динамике процесса уменьшения массы образца или о динамике количества CO_2 , выделяющегося в процессе его минерализации.

Эксперименты с измерением динамики минерализации образцов в почве тоже представлены в литературе, но они проводятся не с химически однородными образцами, а с образцами растительного опада (Иванникова, Гармаш, 1994; Семенов и др., 2004; Мальцева и др., 2013). Поскольку части растений, используемые в качестве образцов опада, содержат различные вещества, существенно различающиеся

чающиеся по устойчивости к трансформации, формула (13), выведенная для однородного опада, неприменима к описанию динамики минерализации растительного опада. Поэтому аппроксимация данных таких экспериментов формулой (13) не позволит подобрать адекватные значения входящих в нее параметров модели.

ВЫВОДЫ

На основании анализа уравнений континуальной модели трансформации ОВП предложен возможный способ экспериментального определения ее параметров. Эксперимент несложный, с отработанной и широко известной техникой проведения и отличается от известных лишь деталями.

Предлагаемый способ определения в отличие от использованного ранее эмпирического подбора параметров модели (Bartsev, Pochekutov, 2013, 2015; Почекутов, Барцев 2014) дает однозначный результат, не опирается на предположение стационарности распределения запасов ОВП и поэтому вполне применим к экосистемам, в которых запасы ОВП заведомо находятся не в стационарном состоянии.

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН (Проект № 12) и РФФИ (грант № 15-41-04300).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Аблаева А. Р., Хасанова Р. Ф., Сафиуллина Р. Р. Целлюлозолитическая активность чернозема обыкновенного под разными видами трав в условиях Зауралья Республики Башкортостан // Вестн. Оренбург. гос. ун-та. 2011. № 12 (131). С. 13–15.

Иванникова Л. А., Гармаш Г. Г. Определение параметров минерализации органических веществ в почве способом реакционно-кинетического фракционирования // Почвоведение. 1994. № 9. С. 28–36.

Мальцева А. Н., Золотарева Б. Н., Пинский Д. Л. Трансформация растительных остатков кукурузы в суглинистом и песчаном субстратах // Почвоведение. 2013. № 10. С. 1239–1252.

Почекутов А. А., Барцев С. И. Феноменологическая континуальная модель трансформации органического вещества почвы и тестовая оценка ее параметров для различных экосистем // Фундаментальные исследования. 2014. № 12. С. 322–337.

Семенов В. М., Иванникова Л. А., Кузнецова Т. В., Семенова Н. А. Роль растительной биомассы в формировании активного пула органического вещества почвы // Почвоведение. 2004. № 11. С. 1350–1359.

Чертов О. Г., Комаров А. С., Надпорожская М. А. Модели динамики органического вещества лесных почв // Моделирование динамики органического вещества в лесных экосистемах. М.: Наука, 2007. С. 19–39.

Ågren G. I., Bosatta E. Theoretical ecosystem ecology: understanding element cycles. Cambridge, UK: Cambridge Univ. Press, 1998. 234 p.

Bartsev S. I., Pochekutov A. A. A continual model of soil organic matter transformations for predicting soil forming dynamics inside higher plant CELSS // Advances Space Res. 2013. V. 51. P. 789–796.

Bartsev S. I., Pochekutov A. A. A continual model of soil organic matter transformations based on a scale of transformation rate // Ecol. Model. 2015. V. 302. P. 25–28.

Bosatta E., Ågren G. I. Exact solutions to the continuous-quality equation for soil organic matter turnover // J. Theor. Biol. 2003. V. 224. P. 97–105.

Carpenter S. R. Decay of heterogenous detritus: a general model // J. Theor. Biol. 1981. V. 89. P. 539–547.

McClellan M. H., Bormann B. T., Cromack Jr. K. Cellulose decomposition in southeast Alaskan forests: effects of pit and mound microrelief and burial depth // Can. J. For. Res. 1990. V. 20. P. 1242–1246.

Mendelsohn I. A., Sorrell B. K., Brix H., Schierup H.-H., Lorenzen B., Maltby E. Controls on soil cellulose decomposition along a salinity gradient in a Phragmites australis wetland in Denmark // Aqua. Bot. 1999. V. 64. P. 381–398.

Olson J. S. Energy storage and the balance of producers and decomposers in ecological systems // Ecology. 1963. V. 44. N. 2. P. 322–331.

Vedrova E. F. Carbon pools and fluxes of 25-year old coniferous and deciduous stands in Middle Siberia // *Water, Air and Soil Pollut.* 1995. V. 82. P. 239–246.

Vedrova E. F. Biochemistry of carbon and nitrogen in the Siberian afforestation experiment / Eds.

D. Binkley, O. Menyailo // *Tree species effects on soils: implications for global change.* Kluwer Acad. Publ. NATO Sci. Ser. 2005. P. 281–290.

The Method for Determination of Parameters of the Phenomenological Continual Model of Soil Organic Matter Transformation

S. I. Bartsev, A. A. Pochekutov

*Institute of Biophysics, Russian Academy of Sciences, Siberian Branch
Akademgorodok, 50/50, Krasnoyarsk, 660036 Russian Federation*

E-mail: bartsev@yandex.ru, a-a-po@mail.ru

A possible method for experimental determination of parameters of the previously proposed continual mathematical model of soil organic matter transformation is theoretically considered in this paper. The previously proposed by the authors continual model of soil organic matter transformation, based on using the rate of matter transformation as a continual scale of its recalcitrance, describes the transformation process phenomenologically without going into detail of microbiological mechanisms of transformation. Thereby simplicity of the model is achieved. The model is represented in form of one differential equation in first-order partial derivatives, which has an analytical solution in elementary functions. The model equation contains a small number of empirical parameters which generally characterize environmental conditions where the matter transformation process occurs and initial properties of the plant litter. Given the values of these parameters, it is possible to calculate dynamics of soil organic matter stocks and its distribution over transformation rate. In the present study, possible approaches for determination of the model parameters are considered and a simple method of their experimental measurement is proposed. An experiment of an incubation of chemically homogeneous samples in soil and multiple sequential measurement of the sample mass loss with time is proposed. An equation of time dynamics of mass loss of incubated homogeneous sample is derived from the basic assumption of the presented soil organic matter transformation model. Thus, fitting by the least squares method the parameters of sample mass loss curve calculated according the proposed mass loss dynamics equation allows to determine the parameters of the general equation of soil organic transformation model.

Keywords: *soil organic matter, continual model of soil organic matter transformation, soil respiration, humification, mineralization.*

How to cite: *Bartsev S. I., Pochekutov A. A.* The method for determination of parameters of the phenomenological continual model of soil organic matter transformation // *Sibirskij Lesnoj Zurnal* (Siberian Journal of Forest Science). 2015. N. 3: 115–121 (in Russian with English abstract).