

ДИСКУССИИ

УДК 631.4

ОТВЕТ А.В. СМАГИНУ: IV. ПОВЕРХНОСТНАЯ ДИФФУЗИЯ ИЛИ СЛУЧАЙНЫЙ ШУМ?

Глаголев М.В.^{1,2,3,4,5)}, Сабреков А.Ф.^{2,3,4,5)}, Терентьева И.Е.

¹⁾Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

²⁾Югорский государственный университет, Ханты-Мансийск

³⁾Томский государственный университет

⁴⁾Институт лесоведения РАН, с. Успенское (Московская обл.)

⁵⁾Институт водных проблем РАН, Москва

m_glagolev@mail.ru

Анализируется эксперимент проф. А.В. Смагина, из которого он получает численное значение коэффициента поверхностной диффузии газов в почве. Нами предпринята попытка оценить погрешность этого коэффициента. Обосновывается пессимистическая точка зрения: поскольку погрешность оказалась во много раз больше самого коэффициента диффузии, то не имеет смысла говорить о поверхностной диффузии – из рассмотренного эксперимента мы ничего не можем заключить о ее интенсивности, ибо статистически значимо она не отличается от нуля.

Ключевые слова: *диффузионный транспорт метана в почве, погрешность коэффициентов регрессии, статистическое моделирование.*

Цитирование: Глаголев М.В., Сабреков А.Ф., Терентьева И.Е. 2017. Ответ А.В. Смагину: IV. Поверхностная диффузия или случайный шум? // Динамика окружающей среды и глобальные изменения климата. Т. 8. № 1. С. 55-65.

Citation: Glagolev M.V., Sabrekov A.F., Terentieva I.E. 2017. Reply to A.V. Smagin: IV. Surface diffusion or random noise? // Environmental dynamics and global climate change. V. 8. N. 1. P. 55-65.

...в этом случае внесенная «поправка» в 25 раз превысила «уточняемый результат». Это – удивительное обстоятельство, не имеющее, по всей видимости, аналогов в истории физики.

Б.С. Ишханов, О.В. Кечкин, М.Е. Степанов [2014: с. 4]

ВВЕДЕНИЕ

В задачу каждого измерения входит оценка точности полученного результата. Существует ряд приемов обработки полученных из эксперимента данных, позволяющих сделать такую оценку. Измеряя некоторую величину, мы, как правило, не можем сделать ошибки *меньшей, чем та, которая определяется погрешностью измерительного устройства*. В результате измерений мы всегда получаем нужную величину с некоторой погрешностью. Например, если у нас есть линейка с точностью 1 мм, то, применяя ее, нельзя измерить длину, скажем, с точностью до 0.01 мм. Это очевидное положение, к сожалению, иногда забывают [Зайдель, 1967, с. 3, 6]. Точнее говоря, в таких простейших случаях, как только что приведенный пример прямого измерения некоторым прибором, может быть, и не забывают. Но вот в чуть более сложном случае, когда результаты измерений в дальнейшем участвуют в каких-то вычислениях (и исследователя интересует лишь этот, полученный после вычислений результат, а не результаты исходных прямых измерений) – забывают, как говорится, «за милую душу».

И хотя уже много десятилетий назад Норберт Винер констатировал для современной физики: «...в отличие от ньютоновского подхода, при использовании неточных данных, ученые стремятся с самого начала учитывать истинную точность наблюдений, не стараясь ни на одном этапе вычислений получить точность большую, чем та, которая на самом деле является реальной» [Зайдель, 1967, с. 3], в других областях науки это часто остается лишь мечтой или благим пожеланием.

В задачу измерений входит не только нахождение самой величины, но также и оценка допущенной при измерении погрешности [Зайдель, 1967, с. 3]. Игнорирование этого, нахождение

лишь самой величины без понимания того, насколько она неточна, приводит к иллюзии абсолютной (или, по крайней мере, чрезвычайно высокой) точности. А последнее, в свою очередь, приводит к искушению «физической» интерпретации, вообще говоря, не существующего результата. Например, пусть, с точки зрения физики, какая-то величина может составлять около 0.03, но экспериментатор получил для нее значение $D = 0.19$. Мало кто устоит перед искушением дать этому какое-то объяснение – ведь разница-то составляет более 6 раз! Но с таким ли рвением взяли бы мы за поиск этого объяснения, если бы знали, что погрешность весьма велика и можно лишь утверждать (да и то, разумеется, лишь с какой-то вероятностью), что D на самом деле заключено где-то в промежутке от - 1.95 до 2.14?

Именно с этих позиций в данной статье мы бы хотели рассмотреть один из вопросов, предложенный проф. А.В. Смагиным [2014] в рамках развернувшейся дискуссии [Глаголев и Сабреков, 2014; Евдокимов и Ларионова, 2015; Лапина, 2015; Глаголев и Филиппов, 2015] по проблемам почвенной газодинамики.

ДИСКУССИОННЫЕ ВОПРОСЫ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ ПОЧВ

Поверхностная диффузия или случайный шум?

1) А.В. СМАГИН: “К этому добавим феномен поверхностной диффузии, увеличивающий по нашим данным проводимость в несколько раз при насыщенном состоянии почвы [Смагин, 2005]. Можно не верить этим экспериментальным данным [Глаголев, 2010], но теоретически, согласно [Фролов, 1988], мы получаем еще более высокие значения. Эффективный коэффициент диффузии $D = D_w + KD_s$, где D_w и D_s – диффузивность в объеме и по поверхности, K – константа Генри для сорбции газа, которая варьирует в пределах 8-18 для метана, и 20-40 для CO_2 [Смагин, 2007].”

ОТВЕТ: В автореферате, на который ссылается проф. А.В. Смагин, М.В. Глаголев не писал, что не верит этим экспериментальным данным. Вот, что там написано в точности: «При экспериментальной оценке зависимости эффективного коэффициента диффузии в торфе от пористости аэрации, д.б.н. А.В. Смагин сделал вывод о том, что даже при полном насыщении образцов торфа влагой, молекулярное движение частиц газа происходит с интенсивностью, соответствующей величине коэффициента диффузии $0.19 \text{ см}^2/\text{час}$. Хотя мы и не разделяем это мнение (почему – см. в диссертационной работе на стр. 74-75), но сбрасывать со счетов его не можем. Впрочем, даже если принять $D = 0.19 \text{ см}^2/\text{час}$, вклад диффузионного потока метана возрастает лишь до 1.9%». Очевидно, что если бы диссертант не верил этим экспериментальным данным, то не писал бы, что нельзя сбрасывать их со счетов. Дело в том, что возможны разные интерпретации тех экспериментальных данных, которые получил Андрей Валентинович. И хотя нам кажется более вероятным другое объяснение, но и предположение проф. Смагина имеет право на существование, поэтому его нельзя совсем игнорировать. Однако теперь не можем не сказать о другом объяснении, и пусть читатель судит – какое более вероятно. Это объяснение действительно излагалось ранее в диссертационной работе М.В. Глаголева, как указано выше, поэтому просто скопируем оттуда соответствующее место: «При экспериментальной оценке зависимости эффективного коэффициента диффузии (D , $\text{см}^2/\text{час}$) в торфе от пористости аэрации (Π)¹, д.б.н. А.В. Смагиным было получено эмпирическое уравнение:

$$D = 0.0046 \cdot \Pi^3 + 0.047 \cdot \Pi^2 - 0.0878 \cdot \Pi + 0.19,$$

на основании которого он делает вывод, что даже при полном насыщении образцов торфа влагой, молекулярное движение частиц газа происходит с интенсивностью, соответствующей величине коэффициента диффузии $0.19 \text{ см}^2/\text{час}$. Увеличение эффективного коэффициента диффузии CH_4 в торфе (органогенном материале с высокой удельной поверхностью) связывается А.В. Смагиным с явлением поверхностной диффузии (см., например, [Глаголев и Смагин, 2006] и ссылки там). С одной стороны, мы не можем полностью доверять этому значению, т.к. при подборе эмпирических

¹ Поскольку мы, с одной стороны, цитируем диссертационную работу М.В. Глаголева, а с другой – статью [Глаголев и Смагин, 2006], то должны отметить, что пористость аэрации обозначена в этих работах немного по-разному (соответственно, Π и Π_a). Таким образом, если читатель встречает в наших цитатах обозначения Π и Π_a , то речь идет об одном и том же показателе.

полиномиальных зависимостей их коэффициенты часто определяются с большой погрешностью², которую автор в данном случае, к сожалению, не приводит. С другой стороны, мы не должны сбрасывать со счетов возможность столь существенного (более чем в 6 раз) увеличения коэффициента эффективной диффузии. Впрочем, даже если принять $D = 0.19 \text{ см}^2/\text{час}$, вклад диффузионного потока метана возрастает лишь до 1.9%». Если из этих строк позиция М.В. Глаголева, сформулированная в диссертации, осталась непонятна, то поясним её сейчас дополнительно.

Возможно, что поверхностная диффузия в данном случае существует и играет какую-то (может быть и значительную) роль в переносе метана. Явление поверхностной диффузии хорошо известно и никем из серьезных ученых не отрицается, поэтому сбрасывать со счетов мы ее не можем, и если есть какие-то оценки ее интенсивности, то мы должны их учитывать. Но, к сожалению, из того факта, что в вышеприведенном уравнении мы будем иметь $D(0) = 0.19 \text{ см}^2/\text{час}$, нельзя однозначно вывести величину поверхностной диффузии. Более того, отсюда вообще ничего нельзя вывести, поскольку не указана точность (или погрешность, или разброс) этого значения.

В современной науке, в частности, в экологии, одним из стандартов (нашедших свое отражение в правилах публикаций в международных научных журналах), фактически, стало следующее: любая характеристика центральной тенденции всегда приводится в совокупности с характеристикой разброса данных (чаще всего со стандартной ошибкой) и с объемом выборки, на основании которой получены эти значения. Отсутствие в публикации характеристики разброса приводит к исключению количественной информации из научного оборота [Козлов, 2014, с. 31]. Ошибки в измерениях значений функции D вызывают ошибки в определении коэффициентов многочлена. Причем многочлен слишком низкой степени будет давать слишком грубое описание эмпирического материала, а многочлен высокой степени не будет сглаживать шум эксперимента, т.е. на его коэффициентах будут сильно сказываться ошибки, вызванные ошибками экспериментальных данных [Румшиский, 1971, с. 92-93]. Поскольку А.В. Смагин не приводит какую-либо характеристику разброса величины коэффициента диффузии при $\Pi = 0$, то количественно обсуждать тут нечего – может быть это и $0.19 \text{ см}^2/\text{час}$, а может быть и $0 \text{ см}^2/\text{час}$, а может быть и что угодно еще. Поэтому М.В. Глаголев и написал, что «мы не можем полностью доверять этому значению». Он писал, не что «не верит экспериментальным данным»³, но лишь – что не может доверять значению $0.19 \text{ см}^2/\text{час}$, которое экспериментальными данными не является, а вычислено по ним непонятно с какой погрешностью. Давайте попробуем сейчас эту погрешность оценить. К сожалению, мы не располагаем исходными экспериментальными данными, по которым проф. А.В. Смагин вывел свою кубическую формулу, поэтому оценка неизбежно будет отличаться от истинной. Надеемся, тем не менее, что порядок величины она даст, а если окажется слишком грубой, то проф. Смагин нас поправит и опубликует погрешности коэффициентов формулы⁴ (после чего она, наконец, сможет быть включена в научный оборот).

Итак, мы оцифровали⁵ рис. 3 из [Глаголев и Смагин, 2006]. Конечно, полученные таким образом «экспериментальные» данные не могут в точности совпасть с реальными экспериментальными данными Андрея Валентиновича, но, думаем, очевидно, что погрешность оцифровки не превышает погрешность экспериментальных данных (к сожалению, можем это только предполагать, поскольку погрешность этих экспериментальных данных проф. А.В. Смагин почему-то не приводит ни в одной из известных нам публикаций). Далее, при помощи MS Excel мы нашли коэффициенты кубического уравнения и их погрешности (по умолчанию «уровень надежности» задается величиной 95% и мы его менять не стали, поскольку проф. Смагин все равно не сообщает в своих публикациях, с каким уровнем надежности он получил значения коэффициентов). Полученные результаты несколько отличаются от результатов Андрея Валентиновича, хотя исходные данные мы постарались

² В данном случае эта погрешность обусловлена, во-первых, как неточностью экспериментального измерения значений пористости аэрации и коэффициента диффузии, так и, во-вторых, несоответствием массива истинных значений этих показателей выбранной (кубической) модели. Ниже мы с помощью статистического моделирования охарактеризуем первый из названных компонентов суммарной погрешности.

³ Впрочем, для полной уверенности было бы интересно посмотреть публикацию, где подробно эти данные описаны.

⁴ А еще лучше, если опубликует таблицу экспериментальных данных. Тогда к анализу его данных сможет подключиться больше специалистов.

⁵ Если кому-либо из читателей понадобятся результаты оцифровки в числовой форме (например, для применения альтернативных алгоритмов получения оценок полиномиальных коэффициентов и погрешностей этих оценок), то мы готовы выслать их по электронной почте.

оцифровать настолько точно, насколько это возможно – см. рис. 1. Например, у проф. А.В. Смагина значение коэффициента детерминации получилось равным 0.93 (кстати, это видно на рис. 1А), а у нас – 0.99. Безусловно, это говорит о том, что оказалось невозможным совершенно точно оцифровать график Андрея Валентиновича, однако из рис. 1 читатель может увидеть, что взаимное расположение точек у нас и у проф. А.В. Смагина почти совершенно одинаково.

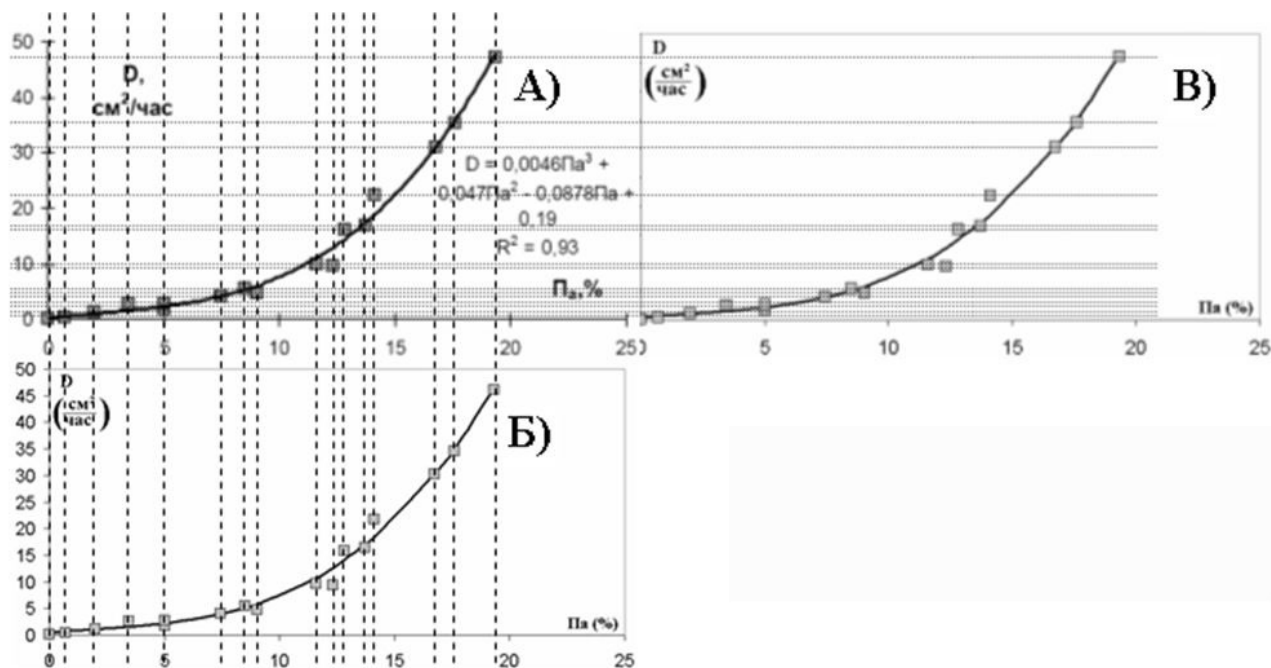


Рис. 1. Иллюстрация качества оцифровки: А – экспериментальные данные А.В. Смагина; Б и В – оцифрованные (из графика А) данные.

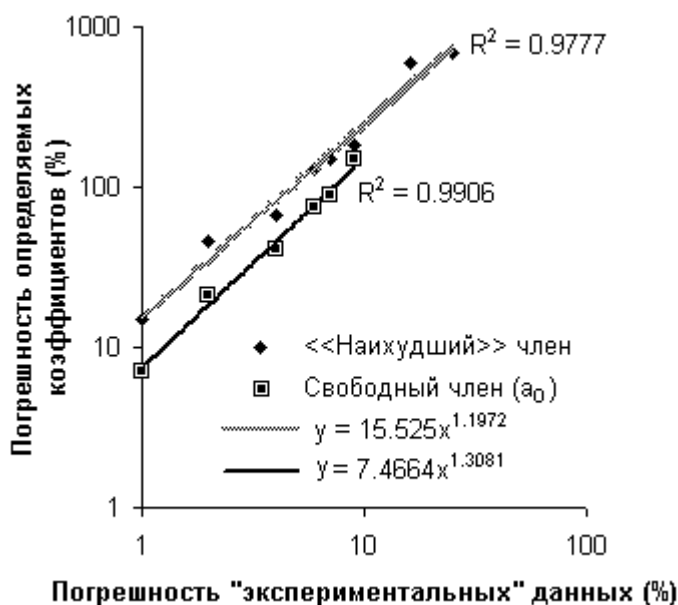


Рис. 2. Результаты статистического моделирования влияния погрешности в «экспериментальных» данных (из рис. 1Б или 1В) на погрешность определения коэффициентов кубического полинома: $D = a_3 \cdot P_a^3 + a_2 \cdot P_a^2 + a_1 \cdot P_a + a_0$. При погрешностях «экспериментальных» данных более 9-10% поведение кривых изменяется. Погрешность определения «наихудшего» (т.е. имеющего **максимальную** относительную погрешность) коэффициента продолжает возрастать, как это видно на графике, а погрешность свободного члена расти перестает, оставаясь долгое время на уровне 130-140% (эта часть кривой на рис. не показана).

Теперь переходим к самому важному результату. Свободный член кубического уравнения, определенный по оцифрованным данным (которые, как мы видим из рис. 1, практически неотличимы от исходных экспериментальных данных) может принимать любые значения в диапазоне от -1.95 до 2.86 см²/час и значимо (напомним: при уровне надежности 95%) не отличается от нуля.

Как известно и из научной, и даже из учебной литературы (см., например, [Валеев, 1991, с. 84-85; Гартман и Клушин, 2006, с. 237]), **незначимые коэффициенты следует исключить из уравнения**

регрессии, ибо с увеличением числа регрессоров возрастает дисперсия прогноза⁶ [Большаков и Каримов, 2007, с. 188-199]. Для этого разработан ряд специальных процедур: полный перебор, метод исключения, метод включения с исключением (пошаговая регрессия) и др. [Дрейпер и Смит, 1987, с. 9-58; Валеев, 1991, с. 140-141; Большаков и Каримов, 2007, с. 188-199]. В этих методах, различающихся стратегией перебора уравнений регрессии, следует вновь провести регрессионный анализ, но уже без свободного члена (раз он оказался незначимым). В данном случае новая регрессия дает другие значения коэффициентов, все они – значимые (при том, что коэффициент детерминации остается практически тем же, но он и не должен был сильно измениться, раз мы отбросили параметр уравнения, который не являлся значимым).

Конечно, ученые всего лишь *договорились* отклонять нулевую гипотезу, если вероятность того, что она верна, не превышает 5%. Не следует абсолютизировать «критическое» значение $P = 0.05$ – это лишь условная граница между, скорее всего, верными и, скорее всего, ошибочными гипотезами [Козлов, 2014, с. 17]. Тем не менее, договоренность такая в науке действует, и давайте не будем от нее отклоняться. Конечно, можно провести аналогичный анализ и на другом уровне надежности, если проф. Смагин этого потребует и сможет обосновать, почему в данном случае уровень надежности должен быть «ниже плинтуса», а не соответствовать той планке, которая установлена в современной науке.

Впрочем, мы можем и наглядно продемонстрировать качество идентификации коэффициентов кубического полинома, построенного по экспериментальным данным проф. Смагина. Используем для этого статистическое моделирование. Очевидно, что каждая точка на рис. 1А получена Андреем Валентиновичем с какой-то погрешностью. Как уже было сказано, погрешность эта им не указана (к сожалению, нет ее ни в одном из известных авторам руководств по физике почв – [Ревут, 1972; Вадюнина и Корчагина, 1973; Шеин и Карпачевский, 2007]). Наш собственный опыт (правда, весьма небольшой) определения коэффициентов диффузии газов в почвах при помощи диффузиметра подсказывает, что вряд ли можно надеяться на точность, лучшую чем 10% (впрочем, точность будет зависеть еще и от величины самого коэффициента диффузии). Тем не менее, рассмотрим интервал погрешностей, начиная от 1% и заканчивая 25%. Итак, «пошевелим» случайным образом все точки на рис. 1А в среднем на 1% (но не более чем на 2%, т.е. каждая точка поднимется немного выше или опустится ниже, но ее ордината изменится не более чем на 2%, а в среднем по всем точкам – на 1%). После этого найдем коэффициенты кубического полинома, которым проф. А.В. Смагин аппроксимировал зависимость $D(P_a)$. Они будут отличаться от тех коэффициентов, которые мы имели до «шевеления». Запомним набор коэффициентов. Опять случайным образом пошевелим точками (эта процедура моделирует случайные погрешности эксперимента; думаем, вполне очевидно, что если какой-либо экспериментатор захочет воспроизвести опыт Андрея Валентиновича, то он не получит в точности рис. 1А, но каждая точка в этом новом эксперименте будет лежать чуть выше или чуть ниже, чем на рис. 1А). Опять вычислим коэффициенты полинома и опять запомним набор этих коэффициентов. И сделаем таких циклов, например, десять. После чего будем иметь 10 значений каждого коэффициента – по одному для каждого проведенного расчета (или, как говорят, для каждой имитации, ибо это были статистические имитации реальных экспериментов). Теперь мы можем посчитать коэффициент вариации для каждого коэффициента. Потом проделаем всю описанную выше процедуру, «шевелим» точки в среднем на 2%, на 4% и т.д. Результат показан на рис. 2. Как видим, погрешности определения коэффициентов кубического полинома растут намного быстрее, чем погрешность «экспериментальных» данных. И если говорить об интересующем нас свободном члене, то при погрешности «экспериментальных» данных около 9%, погрешность его определения составляет около 100%, а вслед за тем поднимается до 130-140%. Таким образом, мы опять приходим к выводу о том, что величина свободного члена (а по физическому смыслу это – величина коэффициента диффузии при нулевой пористости аэрации, т.е. в почве, полностью насыщенной водой), вычисленного по данным проф. Смагина, может быть любой в достаточно широком диапазоне – она может быть и $0.19 \text{ см}^2/\text{час}$, но может быть и нулем.

⁶ Подчеркнем, что для рассматриваемой нами ситуации это особенно важно, если коэффициент «поверхностной диффузии» не измеряется проф. Смагиным напрямую. В [Смагин, 2005, с. 263] отмечено, что «для оценки показателя D в обводненных пористых средах при влажностях, близких к полной влагоемкости предложена модификация метода с изоляцией поверхностей образцов тонкими полиэтиленовыми пленками» и даны ссылки на оригинальные публикации. Однако, строго говоря, «влажности, *близкие к* полной влагоемкости» – это, все же, не то же самое, что «влажность, соответствующая полной влагоемкости». При полной влагоемкости, конечно, $P_a=0$, но при близкой к ней влажности P_a будет, все-таки, немного отличаться от нуля. Тогда получается, что в экспериментах Андрея Валентиновича, измеряются коэффициенты диффузии при разных значениях $P_a>0$ и делается *прогноз* (или экстраполяция) – каким будет коэффициент диффузии при $P_a=0$. Этот прогноз и принимается за оценку коэффициента «поверхностной диффузии».

Итак, хотя мы ни в коей мере не отрицаем существования поверхностной диффузии, тем не менее, должны отметить, что *с точки зрения математической статистики опыты проф. Смагина вполне объясняются погрешностью измерений, без привлечения представлений о поверхностной диффузии*. Однако этот вывод следует рассматривать как промежуточный. Окончательный же вывод нами (или кем-либо еще) может быть сделан только после обработки первичных экспериментальных данных Андрея Валентиновича.

2) А.В. СМАГИН: “Значит при близкой плотности воды в адсорбционном слое и в свободном состоянии, или равенстве величин D_w и D_s , эффективный коэффициент диффузии D возрастает в 9-41 раз относительно такового в воде. То, что мы экспериментально получили более низкие величины, скорее всего результат извилистости порового пространства и, возможно, несовершенства методики опыта. Так что нельзя снимать со счетов механизм диффузии в болотах”.

ОТВЕТ: По этому пункту наше мнение почти совпадает с мнением Андрея Валентиновича. В доказательство можем напомнить фразу из диссертации М.В. Глаголева (с. 75): «...мы не должны сбрасывать со счетов возможность столь существенного (более чем в 6 раз) увеличения коэффициента эффективной диффузии». Но разница состоит в том, что мы не уверены – наблюдал ли проф. А.В. Смагин поверхностную диффузию в своих измерениях. В результате анализа его данных, опубликованных в тех источниках, которые оказались нам доступны, мы приходим к следующему выводу: более вероятно, что проф. Смагин наблюдал случайный «шум», порождаемый погрешностями измерений.

«...Поток метана за счет диффузии составил примерно 0.3% от общего его потока за счет всех механизмов... Впрочем, даже если принять $D = 0.19 \text{ см}^2/\text{час}$, вклад диффузионного потока метана возрастает лишь до 1.9%» - писал один из нас на с. 74-75 диссертационной работы. Если же обратиться к данным других исследователей, то мы видим, что по порядку величины они получали то же самое. Например, R. Conrad [1993] и H. Schütz et al. [1989]⁷ для иных экосистем с высоким уровнем стояния воды (для почв рисовых полей) показали, что диффузионный поток CH_4 составлял менее 1% от полного потока⁸.

Учет пористости

3) А.В. СМАГИН: “...хочу обратить внимание специалистов в области моделирования на одну деталь, а именно – учет эффективного пространства для массопереноса газов. Многие авторы, не исключая и пишущего эти строки, допускали здесь неточности, начиная, по-видимому, с пионерской отечественной работы [Орлов и др., 1987]”.

ОТВЕТ: Полностью согласны с Андреем Валентиновичем. В оправдание авторов «пионерской отечественной работы» можем лишь сказать, что критикуемая здесь ее часть писалась студентом, в момент написания не закончившим еще даже 3-ий курс. Разумеется, он допустил не только эти, но и

⁷ Однако с этой статьей возникла в дальнейшем некоторая путаница. Ссылаясь на нее, R. Wassmann et al. [1993, p. 205] говорили уже о 5%-ном вкладе диффузии. Отчасти в этом виноваты сами авторы оригинальной работы. Указав (в тексте на с. 46 и на Fig. 7) в разд. «Discussion», что вклад был <1%, в разд. «Results» они привели величины удельных потоков для всех типов транспорта, но не всегда снабдили их погрешностями. Нельзя не заметить, что, с формальной точки зрения (если разделить диффузионную эмиссию на суммарную), авторы наблюдали вклады диффузионного транспорта, иногда превышающие 1% (см. Table 1 и 2): 1.25, 1.31, 1.7, 1.8, 2.9, 4.0 и 9.0%. Однако, например, в последнем случае сумма пузырьковой и диффузионной эмиссий на 21% **превышала** суммарную эмиссию (т.е. одна только пузырьковая эмиссия уже превышала 100%!). Хотя авторы в этом случае и не приводят погрешность измерений, но из приведенных данных очевидно, что погрешность эта была чрезвычайно велика. А вот в предпоследнем случае авторы дают разброс (если и не диффузионной, то хотя бы суммарной эмиссии), из которого следует, что неопределенность вклада диффузионного потока составляла около четверти.

⁸ Справедливости ради отметим, что рассуждения в относительных единицах (в %) не слишком показательны. Понятно, что в сезонном цикле условия среды сильно меняются, в результате чего диффузионный поток в атмосферу может возрастать до 100% [Alm et al., 1999, Tab. 2]. Это представляется вполне естественным, ибо логично полагать, что остальные виды транспорта (пузырьками и через растения) зимой «выключаются» или, по крайней мере, их интенсивность снижается на порядки. Аналогично, для отдельных местообитаний эти виды транспорта могут иметь низкую активность даже в летний период, в связи с чем **относительный** вклад диффузии в таких местообитаниях возрастает. Так, [Wagner et al., 2003, Fig. 9] для полигональной тундры оценили диффузионный поток метана в 32 и 74%, соответственно, в понижениях и на ограничивающем полигон валике.

другие ошибки⁹, не отмеченные проф. А.В. Смагиным. Впрочем – что же это за оправдание? А куда же смотрели маститые соавторы? И куда смотрели рецензенты? Кстати, а были ли они в реальности¹⁰? На этом примере мы ясно видим, к чему может привести широкое распространение реально нерецензируемой «научной» литературы: под обложкой книги «Современные физические и химические методы исследования почв» (выпущенной издательством якобы лучшего университета СССР) скрывались, в частности, ошибочные измышления недоучившегося третьекурсника, не прослушавшего к тому времени даже хоть какой-нибудь плохонький курс физики почв.

4) А.В. СМАГИН: “Транспорт в пористых средах осуществляется не по всему пространству, а по определенной его части в виде пористости или для газовой фазы – пористости аэрации. Поэтому модель, учитывающая массовый баланс в такой системе, должна содержать фактор эффективного пространства – в простейшем случае в виде пористости, а в более сложных – в виде линейных комбинаций долей фаз с соответствующими коэффициентами межфазных распределений [Смагин, 2005]. Например, если речь идет об автоморфной однородной почве с постоянным по глубине источником газа U , в которой измеряемой величиной является концентрация в газовой фазе (C_g), а концентрацией и диффузией в жидкой фазе можно пренебречь, модель будет иметь вид:

$$P_g \frac{\partial C_g}{\partial t} = DP_g \frac{\partial^2 C_g}{\partial z^2} + U, \quad (1)$$

где D – коэффициент диффузии, P_g – пористость аэрации, принятые постоянной величиной. Сократить на P_g можно, но тогда надо это обосновать и ввести соответствующую функцию U/P_g . Только тогда, как справедливо указывает проф. Е.В. Шеин [2005], будет соблюдаться правило размерностей (и в левой и в правой части – $г/м^3$ почвы или $г/м^3$ почвенного воздуха в единицу времени), а значит, модель будет корректной с физической точки зрения”.

ОТВЕТ: В принципе, мы согласны с Андреем Валентиновичем. Однако, если ориентироваться не на первый опыт написания «научной» статьи третьекурсником, а на серьезную литературу (например, [Тихонов и Самарский, 1977, с. 185; Лукнер и Шестаков, 1986, с. 55; Sadasivam and Reddy, 2014, p. 89; Xu et al., 2014, p. 255]), то там и так всегда учитывалась пористость. Но тут следует сделать важное замечание. Обычно уравнение переноса принято записывать в следующем виде:

$$P_g \cdot \partial C_g / \partial t = -\partial J / \partial z + U, \quad (1a)$$

где J – плотность потока газа, равная массе газа, протекающей в единицу времени через единицу площади [Тихонов и Самарский, 1977, с. 184; Xu et al., 2014, p. 255]. Если ограничиться (как это, например, делали А.Н. Тихонов и А.А. Самарский [1977, с. 184]) только рассмотрением диффузионного потока, то

$$J = -D_S \cdot \partial C_g / \partial z,$$

⁹ Например, давая математическую модель (в [Орлов и др., 1987] это – ур. 25, 26 и 27) роста почвенных микробов, потребляющих некоторый органический субстрат (концентрация которого – $[S]$) и образующих из него CO_2 (концентрация – $[CO_2]$), он записал для биомассы микроорганизмов (x) уравнение в виде

$$dx/dt = \mu_m \cdot [S] / (K_S + [S]) - x \cdot r,$$

тогда как должно быть

$$dx/dt = \mu_m \cdot [S] \cdot x / (K_S + [S]) - x \cdot r,$$

где μ_m – максимальная удельная скорость роста микроорганизмов; K_S – константа полунасыщения (кстати, он неправильно называет ее «константой насыщения»); r – константа отмирания микроорганизмов (более правильно вместо «константа» использовать «удельная скорость»). Впрочем, анализ результатов расчетов, приведенных в [Орлов и др., 1987] на рис. 14, показывает, что решалось правильное уравнение, т.е. вышеприведенная неточность является не столько ошибкой, сколько досадной опечаткой. Но гораздо более серьезно то, что и для динамики $[CO_2]$ записано неверное уравнение

$$d[CO_2]/dt = (1 - Y_S) \cdot \mu_m \cdot [S] \cdot x / (K_S + [S]) + x \cdot r,$$

тогда как должно быть

$$d[CO_2]/dt = (1 - Y_S) \cdot \mu_m \cdot [S] \cdot x / \{ (K_S + [S]) \cdot Y_S \} + x \cdot r.$$

И тут это уже не опечатка, а именно ошибка, потому что, как показывает опять анализ рис. 14, решалось именно неверное уравнение.

¹⁰ В сборнике, содержащем «пионерскую работу», в качестве рецензента указаны два д.б.н. Но могли ли они качественно отрецензировать 11 работ, посвященных самым разным методам исследования физических и химических свойств почвы (в том числе из областей, весьма далеких от их научных интересов)?!

где D_s – коэффициент диффузии в пористой среде. Следовательно, если подставить это выражение в (1а), то мы получим:

$$P_g \cdot \partial C_g / \partial t = \partial(D_s \cdot \partial C_g / \partial z) / \partial z + U, \quad (16)$$

Если считать, что $D_s = D \cdot P_g$, то из последнего выражения получается (1) тогда, когда $D \cdot P_g = const$. Действительно, Андрей Валентинович оговаривает, что коэффициент диффузии и пористость аэрации приняты в его уравнении постоянными величинами. Но несколькими строками ниже справедливо замечает: «Но такое допустимо лишь в редких случаях, если почва (пористая среда) с глубиной не меняет пористость». Таким образом, в почвоведении уравнение Смагина (1) допустимо применять «лишь в редких случаях», а лучше пользоваться более общим уравнением (16), также давно и хорошо известным в литературе.

5) А.В. СМАГИН: “ По видимому, также можно использовать показатель «эффективного коэффициента диффузии», как произведения DP_g но тогда надо это оговаривать, чтобы не возникла неопределенность с размерностями”.

ОТВЕТ: Безусловно согласны с Андреем Валентиновичем в том, что всегда следует при описании каждого параметра указывать его размерность. По нашему убеждению, это – одна из важнейших (хотя и простейших) составляющих культуры написания научных работ. Однако раз речь зашла о конкретном виде эффективного коэффициента, то нам хотелось бы, кстати, обратить внимание читателей, что уравнение диффузии – это уравнение, по сути дела, феноменологическое¹¹. И часто экспериментальные данные по диффузии газов в почве удается адекватно описать уравнением диффузии, если эффективный коэффициент задан не формулой $D_s = D \cdot P_g$, а какой-либо другой. Например, Xu et al. [2014, p. 256] при изучении движения H_2S через грунт, покрывающий полигон захоронения твердых бытовых отходов, рассчитывали эффективный коэффициент диффузии по зависимости Millington–Quirk: $D_s \sim D \cdot (P_g)^A$, где $A = 10/3 \approx 3.3$. Ее же использовали и Sadasivam and Reddy [2014, p. 89] при моделировании окисления CH_4 , но для их условий оказалось $A = 2.5$. Л. Лукнер и В.М. Шестаков [1986, с. 58] для песчаных пород рекомендуют формулу

$$D_s = \chi \cdot D \cdot P_g,$$

где χ – параметр, характеризующий извилистость (вероятно, он обратно пропорционален коэффициенту извилистости δ).

б) А.В. СМАГИН: “По аналогии для насыщенной почвы и растворенных веществ (C_t) имеем вместо P_g общую пористость P . Формально, казалось бы можно ввести некоторую величину концентрации в объеме почвы (а не в жидкой или газовой фазе) $C = C_t P$ или $C = C_g P_g$ и записать вместо (1), как это, видимо, подразумевалось в работах [Орлов и др., 1987, Степаненко и др., 2011]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + U. \quad (2)$$

Но такое допустимо лишь в редких случаях, если почва (пористая среда) с глубиной не меняет пористость. Этот случай не подходит к стратифицированным объектам донных отложений, тем более что сами авторы [Степаненко и др., 2011] используют в модели соответствующую запись, не вынося диффузивность в качестве постоянной величины при дифференцировании по пространству. Значит, возникает ошибка, которую легко понять...”

ОТВЕТ: На этот вопрос, думаем, лучше всего смогли бы ответить специалисты, которые работали с критикуемой моделью; и в первую очередь это – к.ф.-м.н. Виктор Михайлович Степаненко. От себя можем только заметить, что мы не нашли в [Степаненко и др., 2011] каких-либо указаний на то, что авторы рассматривали стратифицированные донные отложения с переменной пористостью. Т.е. мы предполагаем, что авторы рассматривали простейший случай – отложения с постоянной пористостью. И тогда **никакой ошибки, о которой говорит проф. Смагин, не возникает**. Но почему же авторы не выносят коэффициент диффузии в качестве постоянной величины при

¹¹ То, что это уравнение, несмотря на свое название, физически неправильно описывает процесс *диффузии*, можно доказать хотя бы таким фактом. Если рассмотреть решение известной задачи о диффузии в полубесконечном цилиндре, на конце которого концентрация с течением времени изменяется по заданному закону [Тихонов и Самарский, 1977, с. 233-241], то станет очевидно, что возмущение концентрации распространяется по цилиндру мгновенно, т.е. со скоростью, превышающей скорость света, а это противоречит наиболее фундаментальным представлениям современной физики.

дифференцировании по пространству? На это можно было бы просто ответить: не хотят – и не выносят, ведь никакой ошибки при этом не совершалось бы, даже если этот коэффициент был бы постоянен (и никакого такого закона нет, обязывающего выносить постоянную величину). Но коэффициент диффузии может быть непостоянным и при постоянстве пористости. Хотим обратить внимание проф. А.В. Смагина на следующую важную фразу из [Степаненко и др., 2011, с. 278]: «Коэффициент... диффузии... вычисляется с учетом... температуры [44]¹²». Хотя бы уже из-за различных температур на разных глубинах коэффициент диффузии будет изменяться с глубиной (при том что пористость предполагается постоянной). Возможно, поэтому-то и не стали выносить авторы (совершенно справедливо!) коэффициент диффузии за знак производной. Постоянный-то коэффициент можно выносить или не выносить за знак производной по усмотрению авторов, а вот выносить переменный коэффициент нельзя, иначе будет допущена ошибка!

7) А.В. СМАГИН: “Сорбция. Казалось бы, существенный фактор поглощения газов в пористых телах, если вспомнить классические труды акад. Н.Д. Зелинского, положенные в основу промышленного производства противогазов и очистителей воздуха. Но фактически ни в одной из известных автору моделей в рассматриваемой нами области газообмена почвы и атмосферы он не учитывается”.

ОТВЕТ: К сожалению, проф. А.В. Смагин не указывает конкретно – что это за модели. Какие задачи стояли перед этими моделями? Может быть для решения этих задач учет сорбции и не был нужен? Нам представляется очевидным, что не в каждой модели необходимо учитывать сорбцию. При чем здесь производство противогазов и очистителей воздуха?! Там это важно – никто не спорит. Но мы же не производство противогазов обсуждаем...

Каждому процессу можно сопоставить некоторое характерное время («время переходного процесса») [Айзерман и др., 1967, с. 71; Ризниченко, 2011, с. 121; Глаголев и Лапина, 2012]. И если нас интересуют процессы с характерными временами месяцев-лет-веков-тысячелетий (как это имеет место, например, при описании цикла углерода, включая и газовые составляющие этого цикла), то соответствующие модели не будут включать в себя такие «сверхбыстрые» процессы¹³, как сорбция, характерное время которой на много (!!!) порядков меньше. Т.е. если нас интересует, например, как изменится дыхание почвы в результате глобального потепления на протяжении 100 лет, то за этот срок многократно произойдет и адсорбция, и десорбция CO₂ на почвенных частичках; и, в общем-то, вовсе не этот быстрый процесс будет определять результирующий эффект увеличения или уменьшения дыхания, а гораздо более медленные процессы развития (и эволюции) почвенных организмов.

Разумеется, в тех отраслях науки, где приходится сталкиваться с достаточно быстрыми процессами, сорбция учитывается. Например, практически в любом учебнике по моделированию химических аппаратов и процессов есть специальные разделы, посвященные моделированию сорбции газов – см., например, [Батунер и Позин, 1971, с. 325-334; Гельперин, 1981, с. 612-637; Дытнерский, 1995, с. 188-212], так что о классических трудах акад. Н.Д. Зелинского никто не забывает. Но вот нужно ли искусственно внедрять их в почвоведение?

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено за счет гранта Российского Научного Фонда (проект № 17-17-01204). Авторы также приносят благодарность А.И. Чуркиной (МГУ), прочитавшей рукопись данной статьи и исправившей ряд опечаток. Кроме того, она и Д.В. Ильясов (Институт лесоведения РАН) выбрали эпиграф для данной статьи.

¹² Под этим номером фигурирует отчет (цит. по [Степаненко и др., 2011, с. 287]):

Walter B.P., Heimann M., Shannon R.D. et al. A process-based model to derive methane emissions from natural wetlands // Max-Planck-Institut für Meteorologie. 1996. Report № 215. 15 p.

¹³ Именно такой принцип широко используется в разных областях науки под разными названиями (например, в химии – принцип квазистационарных концентраций Боденштейна). Весьма общее воплощение данного принцип нашел в теории так называемых «тихоновских систем» (в «теореме Тихонова о системах с малым параметром») – см., например, [Еругин, 1979, с. 526-570; Ризниченко, 2011, с. 126; Глаголев и Лапина, 2012].

ЛИТЕРАТУРА

- Айзерман М.А., Бендриков Г.А., Воронов А.А., Красовский А.А., Кузовков Н.Т., Лернер А.Я., Летов А.М., Петров Б.Н., Петров В.В., Солодовников В.В., Теодорчик К.Ф., Топчеев Ю.И., Удерман Э.Г., Храмой А.В., Цыпкин Я.З., Шарипов Д.С., Шаталов А.С. 1967. Техническая кибернетика. Теория автоматического регулирования. Кн. 1: Математическое описание, анализ устойчивости и качества систем автоматического регулирования. М.: Машиностроение. 770 с.
- Батунер Л.М., Позин М.Е. 1971. Математические методы в химической технике. Л.: Химия. 824 с.
- Большаков А.А., Каримов Р.Н. 2007. Методы обработки многомерных данных и временных рядов. М.: «Горячая линия – Телеком». 522 с.
- Вадюнина А.Ф., Корчагина З.А. 1973. Методы исследования физических свойств почв и грунтов. М.: Высшая школа. 399 с.
- Валеев С.Г. 1991. Регрессионное моделирование при обработке наблюдений. М.: Наука. 272 с.
- Гартман Т.Н., Клушин Д.В. 2006. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов. М.: ИКЦ «Академкнига». 416 с.
- Гельперин Н.И. 1981. Основные процессы и аппараты химической технологии. В 2-х т. Т. 2. М.: Химия. С. 385-812.
- Глаголев М.В. 2010. Эмиссия CH_4 болотными почвами Западной Сибири: от почвенного профиля до региона: Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата биологических наук. М.: Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова (МГУ).
- Глаголев М.В., Лапина Л.Э. 2012. Упрощение модели экосистемы на основе анализа характерных скоростей процессов // Динамика окружающей среды и глобальные изменения климата. Т. 3. № 3. С. 3-30.
- Глаголев М.В., Сабреков А.Ф. 2014. Ответ А.В. Смагину: II. Углеродный баланс России // Динамика окружающей среды и глобальные изменения климата. Т. 5. № 2 (10). С. 50-69.
- Глаголев М.В., Смагин А.В. 2006. Количественная оценка эмиссии метана болотами: от почвенного профиля – до региона (к 15-летию исследований в Томской области) // Доклады по экологическому почвоведению. Вып. 3. №3. С. 75-114.
- Глаголев М.В., Филиппов И.В. 2015. Ответ А.В. Смагину: III. О метанотрофном фильтре и конвективной разгрузке в атмосферу // Динамика окружающей среды и глобальные изменения климата. Т. 6. № 1 (11). С. 42-54.
- Дрейпер Н., Смит Г. 1987. Прикладной регрессионный анализ: В 2-х кн. Кн. 2. М.: Финансы и статистика. 351 с.
- Дытнерский Ю.И. 1995. Процессы и аппараты химической технологии. В 2-х кн. Часть 2. Массообменные процессы и аппараты. М.: Химия. 368 с.
- Евдокимов И.В., Ларионова А.А. 2015. Соображения к дискуссии, предложенной А.В. Смагиным // Динамика окружающей среды и глобальные изменения климата. Т. 6. № 1. С. 36-38.
- Еругин Н.П. 1979. Книга для чтения по общему курсу дифференциальных уравнений. Мн.: Наука и техника. 744 с.
- Зайдель А.Н. 1967. Элементарные оценки ошибок измерений. Л.: Наука. 88 с.
- Ишханов Б.С., Кечкин О.В., Степанов М.Е. (ред.). 2014. Темная материя. М.: Университетская кн. 196 с.
- Козлов М.В. 2014. Планирование экологических исследований: теория и практические рекомендации. М.: Товарищество научных изданий КМК. 171 с.
- Лапина Л.Э. 2015. Ответ А.В. Смагину // Динамика окружающей среды и глобальные изменения климата. Т. 6. № 1. С. 39-41.
- Лукнер Л., Шестаков В.М. 1986. Моделирование миграции подземных вод. М.: Недра. 208 с.
- Орлов Д.С., Минько О.И., Аммосова Я.М., Каспаров С.В., Глаголев М.В. 1987. Методы исследования газовой функции почвы // Воронин А.Д., Орлов Д.С. (ред.). Современные физические и химические методы исследования почв. М.: Изд-во МГУ. С. 118-156.
- Ревут И.Б. 1972. Физика почв. Л.: Колос. 368 с.
- Ризниченко Г.Ю. 2011. Лекции по математическим моделям в биологии. М.-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика». 560 с.
- Румшицкий Л.З. 1971. Математическая обработка результатов эксперимента. М.: Наука. 192 с.
- Смагин А.В. 2005. Газовая фаза почв. М.: Изд-во МГУ. 301 с.
- Смагин А.В. 2007. Абиотическое поглощение газов органогенными почвами // Почвоведение. № 12. С. 1482-1488.
- Смагин А.В. 2014. Спорные вопросы количественной оценки газовых потоков между почвой и атмосферой (к дискуссии М.В. Глаголева и А.В. Наумова) // Динамика окружающей среды и глобальные изменения климата. Т. 5. № 2. С. 10 -25.
- Степаненко В.М., Мачульская Е.Е., Глаголев М.В., Лыкосов В.Н. 2011. Моделирование эмиссии метана из озер зоны вечной мерзлоты // Известия Российской академии наук. Физика атмосферы и океана. Т. 47. №2. С. 275-288.
- Тихонов А.Н., Самарский А.А. 1977. Уравнения математической физики. М.: Наука. 736 с.
- Фролов Ю.Г. 1989. Курс коллоидной химии. М.: Химия. 464 с.
- Шейн Е.В. 2005. Курс физики почв. М.: Изд-во Моск. Ун-та. 432 с.
- Шейн Е.В., Карпачевский Л.О. (ред.). 2007. Теории и методы физики почв. М.: Гриф и К. 616 с.
- Alm J., Saarnio S., Nykänen H., Silvola J., Martikainen P.J. 1999. Winter CO_2 , CH_4 and N_2O fluxes on some natural and drained boreal peatlands // Biogeochemistry. V. 44. No. 2. P. 163-186.
- Conrad R. 1993. Mechanisms controlling methane emission from wetland rice paddies // Biogeochemistry of global change: Radiatively active trace gases / Oremland R.S. (ed.). New York, London: Chapman & Hall. P. 317-335.
- Sadasivam B.Y., Reddy K.R. 2014. Landfill methane oxidation in soil and bio-based cover systems: a review // Rev. Environ. Sci. Biotechnol. V. 13. P. 79-107.
- Schütz H., Seiler W., Conrad R. 1989. Processes involved in formation and emission of methane in rice paddies // Biogeochemistry. V. 7. P. 33-53.
- Wagner D., Kobabe S., Pfeiffer E.-M., Hubberten H.-W. 2003. Microbial Controls on Methane Fluxes from a Polygonal Tundra of the Lena Delta, Siberia // Permafrost Periglac. Process. V. 14. P. 173-185.

Wassmann R., Papen H., Rennenberg H. 1993. Methane emission from rice paddies and possible mitigation strategies // *Chemosphere*. V. 26. P. 201-217.

Xu Q., Powell J., Jain P., Townsend T. 2014. Modeling of H₂S migration through landfill cover materials // *Journal of Hazardous Materials*. V. 264. P. 254-260.

REPLY TO A.V. SMAGIN: IV. SURFACE DIFFUSION OR RANDOM NOISE?

Glagolev M.V., Sabrekov A.F., Terentieva I.E.

In this paper, we analyze experimental estimate of surface diffusion coefficient of gas in soil conducted by prof. A.V. Smagin. The experiment consisted of methane diffusion coefficient determination under different soil saturation conditions. Regression analysis was made basing on obtained dataset to determine third-power polynomial coefficients, where soil air-filled porosity is a single independent variable and methane diffusion coefficient is a single dependent variable. Free term of the polynomial was suggested to be diffusion coefficient of gas in water-saturated soil. After the regression free term was found to be several times higher than methane diffusion coefficient in water. Based on this fact A.V. Smagin made a suggestion that surface diffusion had significant impact on methane diffusive transport in soil. In this paper, we estimate the error of this approach.

It was revealed that based on original experimental data of A.V. Smagin, free term of third-power polynomial was statistically insignificant ($p=0.05$). Moreover, its error was order of magnitude higher than its absolute value. After its exclusion from the regression polynomial, the rest of coefficients stayed statistically significant. Furthermore, statistical modelling was used to estimate the influence of measurement uncertainty of methane diffusion coefficient in soil on regression between diffusion coefficient and soil air-filled porosity. Results of statistical modelling indicated that even basing on typical error of diffusion coefficient measurements (about 10%), the error of cubical polynomial free term calculation reached more than 100%. Therefore, it can be concluded that since the regression uncertainty is considerably higher than the absolute value of diffusion coefficient, we can't make any speculations about surface diffusion because statistically it doesn't differ from zero.

Besides that, in this paper we consider questions of gas transport in soil, e.g. the inclusion of porosity in mass balance equations and importance of sorption on different timescales. Finally, we discuss several problems of scientific ethics.

Key words: *methane diffusion in soil, regression coefficient uncertainty, statistical modelling.*

Citation: Glagolev M.V., Sabrekov A.F., Terentieva I.E. 2017. Reply to A.V. Smagin: IV. Surface diffusion or random noise? // *Environmental dynamics and global climate change*. V. 8. N. 1. P. 55-65.

Поступила в редакцию: 26.04.2017
Переработанный¹⁴ вариант: 14.05.2016

¹⁴ Несмотря на то, что данная статья подана в раздел «Дискуссии», который (по умолчанию) рецензируемым не является, авторы просили Редакцию отправить статью на рецензирование.

Просьба авторов была удовлетворена и статья прошла рецензирование в обычном порядке. – Ред.