

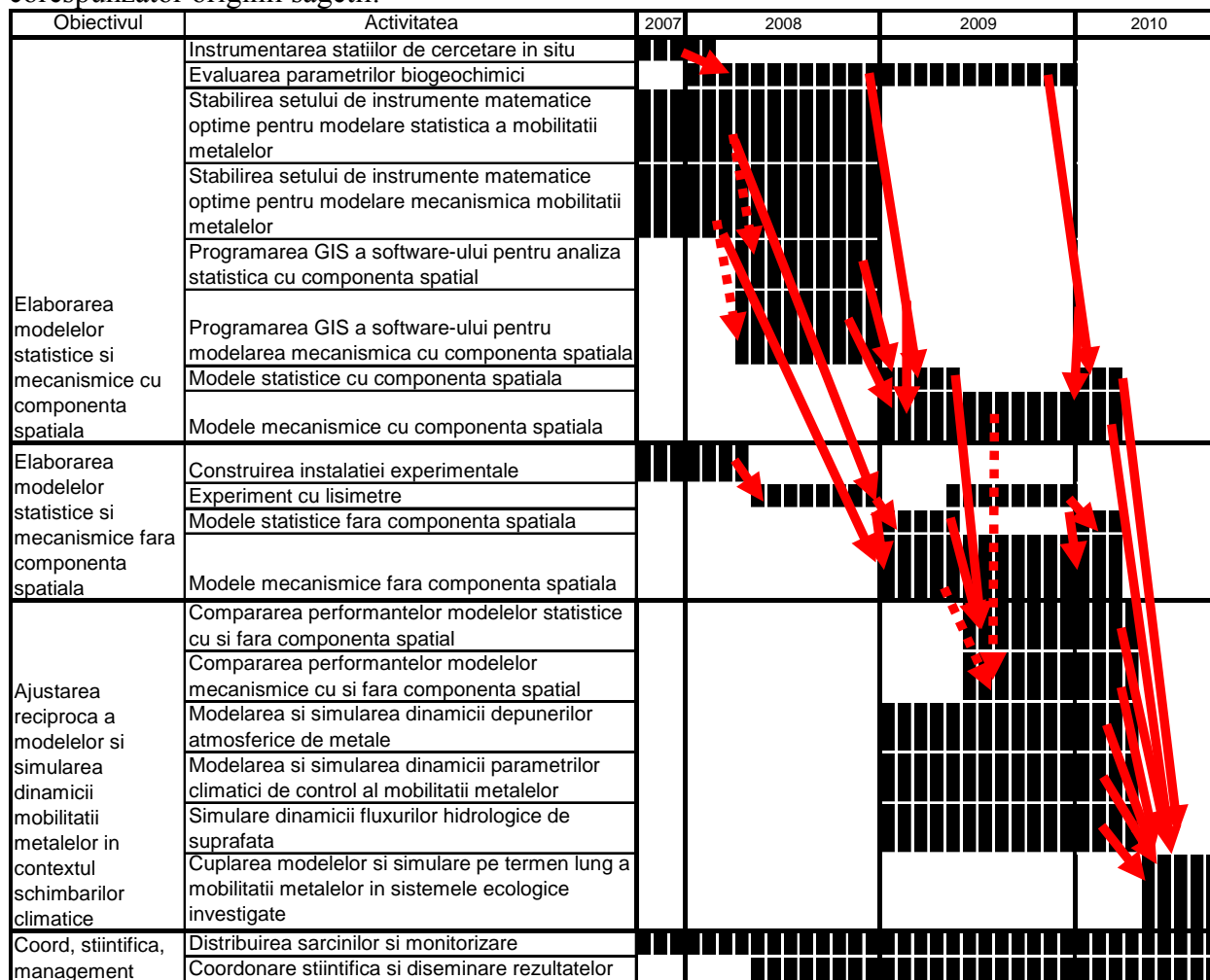
Proiect de cercetare exploratorie – IDEI
Modelarea unor mecanisme cheie implicate in mobilitatea metalelor
in ecosisteme terestre si de zona umeda
Raport tehnic etapa 1 – decembrie 2007

1. **Locul etapei în derularea proiectului**
2. **Rezultate**
3. **Concluzii**

1 Locul etapei in derularea proiectului

Etapa 1 a avut rol de initiere a activitatilor proiectului. Ea corespunde primelor trei luni ale proiectului, dupa cum este prezentat in tabelul 1.

Tabelul 1 Diagrama Gant Pert a proiectului. Sagetile indica relatiile dintre activitatile proiectului. Sagetile punctate indica un transfer continuu de informatie cu incepere din momentul corespunzator originii sagetii.



Etapa a inclus activitati care deservesc cele trei obiective dupa cum urmeaza:

Pentru obiectivul 1 Elaborarea modelelor statistice si mecanismice cu componenta spatiala

1.1 Instrumentarea statiilor de cercetare in situ

1.2 Stabilirea setului de instrumente matematice optime pentru modelare statistica a mobilitatii metalelor

Pentru obiectivul 2 Elaborarea modelelor fara componenta spatiala

2.1 Stabilirea setului de instrumente matematice optime pentru modelare mecanismica a mobilitatii metalelor

2.2 Construirea instalatiei experimentale

Pentru obiectivul 3 Management si coordonare stiintifica

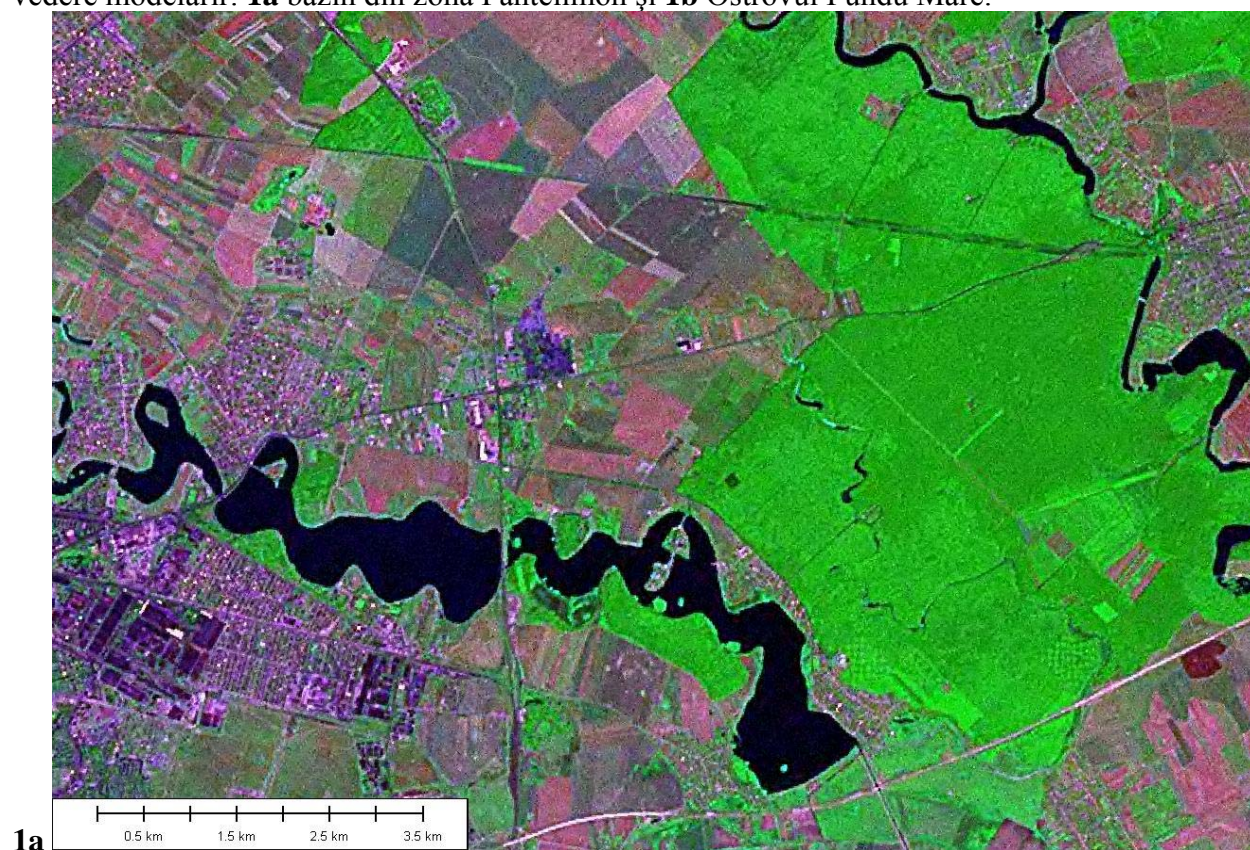
3.1 Distribuirea sarcinilor si monitorizare

2 Rezultate

Activitatea 1.1 Instrumentarea statiilor de cercetare in situ

În această etapă au avut loc activități care condiționează organizarea spatia de detaliu a programului de cercetare (figura 1), achiziționarea unor echipamente și consumabile necesare pentru instrumentarea stațiilor, și s-au făcut demersuri către autoritățile locale din zonele de studiu pentru asigurarea securității echipamentelor care vor fi instalate.

Figura 1 Complexele de ecosisteme în care se va face instrumentarea pentru monitorizare in vedere modelarilor: **1a** bazin din zona Pantelimon și **1b** Ostroyul Fundu Mare.



Pentru demararea acestor activități de analiză critică a instrumentelor matematice s-a efectuat o trecere în revistă a literaturii de specialitate constând în câteva sute de titluri bibliografice și s-a efectuat o grupare a acestora pe niveluri ierarhice de localizare a problemelor pentru rezolvarea cărora sunt dezvoltate modelele (tabelul 1). Principiile de modelare deductive corespund literaturii pornind de la care se desfășoară activitatea 2.1, iar cele inductive corespund zonei de interes pentru activitatea 1.2. Încă de la acest nivel de analiză se poate remarca faptul că

derularea celor două tipuri de activități nu poate avea loc decât în mod corelat, fie și pentru faptul că la construcția a numeroase modele se utilizează atât componente deductive, cât și inductive.

Figura 1b.



Activitățile 1.2 și 2.2 Stabilirea setului de instrumente matematice optime

În continuare studiul se va desfășura analizând pentru fiecare model în parte un număr de caracteristici, după cum este prezentat în tabelul 2. Acest proces este în derulare și condiționează 1) evaluarea critică a aparatului matematic utilizat în modelele curente, și 2) structurile codurilor de implementare a modelelor în vederea simulării proceselor respective.

Din analiza preliminară efectuată se poate constata că una din principalele provocări la ora actuală este cuplarea modelelor, atât a celor care se adresează unor procese diferite ce au loc la o scară comparabilă (de exemplu a proceselor de transport și bioacumulare în complexe locale de ecosisteme), cât și a celor care se adresează unor procese de același tip dar la scări spațiale diferite (de exemplu al celor de transport în bazine mici cu cele de transport în bazine mari, sau al celor de bioacumulare pe lanțuri trofice care implică populații de organisme cu scări de mobilitate foarte diferite).

Din punctul de vedere al proiectului nostru, prima categoria de cuplaje este cea care ne interesează, însă evidențierea celei de a doua direcții de cercetare este importantă pentru dezvoltarea altor proiecte de biogeochimie a microelementelor în complexe de ecosisteme.

Tabelul 1 Distribuția modelelor din literatura pe niveluri ierarhice și principiile de modelare.

Nivel ierarhic	Sisteme investigate	Modele dezvoltate	Principiu de modelare
Complexe regionale	Bazine hidrografice	Modele de transport al poluantilor prin fluxuri aeriene si hidrologice de suprafata si subterane	Deductive
		Modele de distributie a poluantilor in compartimente abiotice	Inductive
	Populatii de organisme cu mobilitate mare si foarte mare	Modele de relationare a parametrilor populationali cu distributia metalelor	Deductive, inductive, mixte
Complexe local	Complexe de UHGM	Modele de transport al poluantilor prin fluxuri aeriene si hidrologice de suprafata si subterane	Deductive
		Modele de distributie a poluantilor in compartimente abiotice	Inductive
	Populatii de organisme mobile	Modele de relationare a parametrilor populationali cu distributia metalelor	Deductive, inductive, mixte
Ecosisteme	Populatii de organisme sesile sau cu mobilitate mica	Modele de transport al poluantilor prin fluxuri hidrologice de suprafata si subterane	Deductive
		Modele de distributie a poluantilor in compartimente abiotice	Inductive
	UGHM elementare	Modele de relationare a parametrilor populationali cu distributia metalelor	Deductive, inductive, mixte
Infraecosiste mic	individ biologic	mecanisme fiziologice	Deductive, inductive, mixte
	fragment din UHGM	mecanisme fizico-chimice de transport si transformare	Deductive, inductive, mixte
	fragment de biocenoză (ex. rizosfera)	Relatii interspecifice care implica organisme	Deductive, inductive, mixte

Activitatea 2.2 Construirea instalatiei experimentale

În această etapă a avut loc proiectarea instalației. Procesele de percolare a apei în sol sunt influențate de un număr de factori fizici, chimici și biologici cum ar fi dimensiunea particulelor solului, timpul de contact cu solul, sau rata de percolare, temperatura, pH soluției solului, condițiile redox, prezența liganzilor de complexare, procesele de sorptie, prezența microorganismelor etc. Astfel, pentru prelevarea apei de percolare și identificarea mecanismelor chimice și fizico-chimice care au loc atât în matricea solului cât și în apa de percolare și în tesuturile plantelor, propunem un design experimental al lisimetrelor care să reflecte pe cât posibil, situația reală din teren.

Scopul experimentului va fi caracterizarea 1) modului cum are loc redistribuirea metalelor în profilul solului 2) modului cum are loc modificarea speciilor chimice ale metalelor în fiecare profil de sol, cu consecințe asupra 3) tiparelor de bioacumulare în plante și 4) tiparelor de export al metalelor prin apa de percolare.

Stafia experimentală va consta din 6 lisimetre circulare de dimensiuni medii (0.5 m diametru și 1m înălțime), confecționate din rasina acrilică sau PVC (material care nu contaminează apa de percolare). Solul utilizat va fi în sistem monolith obținut prin excavare, ceea ce va permite păstrarea intactă a macro și microporilor acestuia și estimarea volumului și calității apei de percolare, în condiții apropiate de cele din teren.

Tabelul 2 Ilustrarea stadiului de desfășurare a analizei comparative a modelelor din literatura de specialitate. Legendă: D = determinist, S = stochastic.

Source article	Problem tackled by the model	Type of problem: abiotic/biotic	Hierarchical level tackled	Analytical A/ Numerical N time / Hybrid H (numerical + analytical)	Space distributed Yes /no	D / S	Components of the model	Modelling principle
Choi et al. (2006)	vertical concentration profiles of the model species and estimates of fluxes of the solute substances across the sediment–water interface.	mixed (root density function)	micro	Numerical (finite difference). Transport part and reaction part separated in order to surpass the non-linearly due to Monod kinetic	No	D	one dimensional mass-balance, effects of plants accounted by source-sink terms	deductive (reactive transport model)
Chow et al. (2005)	exposure of mobile animals to metals	biotic	population level, local landscape	NA	Yes	S	empirical function of exposure followed by Monte Carlo simulation of habitat use	deductive + individual based landscape (GIS) inductive model
Dimopoulos et al. (1999)	Estimation of metal concentration in grasses	biotic	population level, ecosystem	NA	No	S	multiple linear regression, stepwise multiple linear regression, artificial neural networks (multilayer Perceptrons - MLP).	Inductive
Marinussen and van der Zee (1996)	exposure of mobile animals to metals	biotic	individual/ population, ecosystem	Toxicokinetic equation solved analitically	Yes	D/S	one-compartment toxicokinetic model, geostatistical interpolation, Monte Carlo simulation of habitat use	Deductive parts + geostatistical inductive model + individual based landscape model
Cormont et al. 2005	exposure of mobile animals to metals	biotic	individual/po pulation, ecosystem	NA	Yes	D/S	Models on bioaccumulation based on a combination of empirical regressions, empirical equations, and deterministic assumptions	inductive parts + deductive parts + individual based landscape model (dedicated code)
Park and Jaffe (1996)	vertical distribution of redox potential in sediments	mixed (bioturbation as dispersion)	micro	Numerical (finite difference). To eliminate the nonlinearity, the concentration in the denominator of the Monod kinetic term (C) is replaced by the concentration obtained during the previous iteration.	No	D	six sequential microbial reactions, subsequent chemical reactions, and one dimensional (vertical) advective/dispersive mass transport	deductive (reactive transport model) + simplifying assumptions about redox potential at non-equilibrium
Lia et al. (2007)	contamination of groundwater	abiotic	mezo	Numerical (finite difference scheme)	Yes	S	3-D multiphase multi-component numerical model	deductive, reactive transport model, assessment of general risk levels based on a fuzzy logic approach
Sung et al. 2006	estimation of microbial biomass	mixed, diffusive supply of substrate from the root	micro	Numerical (fully implicit finite difference method)	No	D	one dimensional mass-balance of organic carbon coupled with Monod equation rate of microbial growth	deductive (organic carbon mass-balance and microbial growth model)
Ulbrich et al. 1997	estimation of microbial growth under conditions of contaminated sediment input	mixed	ecosystem	Numerical	Yes	D	Submodel of sediment transport and submodel of microbial growth	Deductive (simplified advection-diffusion equation, logistic equation and a Michaelis-Menten-like approach).

Sistemul de drenare si prelevare a apei de percolare va consta din mai multe straturi de nisip dispuse in interiorul unei palnii care va fi fixata la partea inferioara a fiecarui lisimetru. Primul strat care intra in contact direct cu solul va fi format din particule de dimensiune apropiata stratului de sol, urmat de alte straturi cu particule de dimensiuni din ce in ce mai mari, pana la pietricele din quart, cu un diametru de max. 8 mm. Daca particulele de nisip sunt mult mai mari decat particulele de sol, se creaza o bariera capilara si percolarea apei este mai lenta, formandu-se astfel o zona saturata in partea inferioara a lisimetrelor. Pentru a preveni formarea barierei capilare intre sol si materialul de drenare, se va extrage apa in mod constant, cu ajutorul unei

capsule de succiune Fiecare palnie se va continua cu un tub din rasina acrilica sau PVC, care va fi directionat catre un laborator subteran in cate un vas de colectare, pentru fiecare lisimetru. Pentru protectia lisimetrelor impotriva acizilor si stresului mecanic, se aplica un strat subtire de CORODUR 2K® (Wolfgang Sand, 2007).

Drenarea va fi evaluata prin aplicarea periodica, o data pe saptamana, sau la fiecare eveniment hidrologic abundant, a unor capsule de succiune la fiecare 20 cm de-a lungul coloanei de sol din fiecare lisimetru, permitandu-ne astfel prelevarea de apa de percolare de la diferite adancimi, fara a deranja structura solului, si in volume foarte mici pentru a nu perturba sistemul natural de drenare. (<http://www.igw.uni-jena.de/angeol/lysimeterstation/ausstattung.html>, 2007; M.S. Bowman, 2002; <http://www.ugt-online.de>; www.uit-gmbh.de; www.ums-muc.de). Spre deosebire de lisimetrele cu tensiune zero, in cazul acestor lisimetre cu tensiune usoara, este posibila extragerea solutiei solului si din porii fini, calitatea apei de percolare fiind diferita. Extractia solutiei solului cu ajutorul capsulelor de succiune aplicate in lisimetrele cu tensiune usoara, este necesara in special atunci cand este luata in considerare nutritia plantelor, si cand se porneste de la premiza ca exista un echilibru intre solutie si faza solida.

O problema majora in cazul lisimetrelor o reprezinta posibila scurgere a apei pe langa peretii lisimetrelor, ceea ce ar determina o crestere a conductivitatii hidraulice, conducand astfel la o supraestimare a ratei de percolare a apei si la o subestimare a concentratiei poluantilor, datorita faptului ca apa nu este in contact direct cu solul. Aceasta problema se va evita utilizand un gel necontaminant care sa fie aplicat intre perete si stratul de sol.

Solul din cinci dintre lisimetre va fi cultivat cu un amestec de minim doua specii de plante, iar pe perioada celor trei ani de experiment, in fiecare sezon de vegetatie, se va aplica rotatia culturilor. Sopul pentru care se cultiva plantele fiind de fitostabilizare a poluantilor (se va determina mobilitatea macro si microelementelor si se va evalua rata de transfer a acestora in fiecare parte de planta), dar si de a simula conditiile naturale incluzand evapotranspiratia, radacinile care pot forma canale etc. Cel de-al saselea lisimetru va fi pastrat fara plante si va functiona drept control.

Instrumentarea lisimetrelor

In scopul monitorizarii proprietatilor fizice si chimice ale apei de percolare si solului, se vor instala echipamente la adancimi diferite (din 20 in 20 cm): sonde redox, sisteme dielectrice tip TDR (Time Domain Reflectometry) pentru masurarea umiditatii, solului, pH-metre, termistoare utilizate pentru masurarea temperaturii in interiorul solului, capsule de succiune, sisteme de masurare a volumului de precipitatii (rain gauge), sisteme de cantarire pentru fiecare lisimetru.

Deasupra laboratorului va fi amplasata o microstatie climatica, iar in laboratorul subteran vor fi instalate dataloggere.

Parametri meteorologici care vor fi masurati: cantitatea de precipitatii (mm), temperatura minima si maxima a aerului ($^{\circ}\text{C}$), umiditatea minima si maxima a aerului (%), viteza vantului (ms^{-1}), radiatia solara ($\text{cal. cm}^{-2}/\text{zi}$), potentialul de evapotranspiratie (mm). In plus, se va determina umiditatea solului la adancimi diferite, cu un sistem dielectric (similar TDR) care ne va permite sa calculam rata de infiltrare si apa preluata de plante in conditii naturale. Rezolutia temporala pentru toate datele va fi de 10 min.

Media zilnica a intensitatii precipitatiilor se va determina prin cantarirea intensitatii precipitatiilor la fiecare 10 min., si utilizand volumului de precipitatii, se va calcula valoarea aritmetica medie.

Parametri hidraulici ai solului

Se vor determina: conductivitatea hidraulică de saturatie ($\text{mm} \times \text{h}^{-1}$) și conținutul de apă de saturatie ($\text{g} \times \text{g}^{-1}$ substanța uscată), după metode standard.

Parametri chimici și biochimici ai solului: pH, carbon organic (%), textura solului (granulometrie - conținut de nisip, argila etc) (%), CEC ($\text{meq} \times 100^{-1}$), activitatea biologică estimată prin respirația solului ($\text{mg CO}_2/\text{g}$ substanța uscată/12 h), concentrația de micro și macroelemente.

Activitatea 3.1 Distribuția sarcinilor și monitorizarea

În această etapă a avut loc angajarea tuturor membrilor echipei în cadrul Centrului de Cercetare pentru Servicii Ecologice (CESEC) și s-au organizat săptămânal întâlniri de lucru administrative (lunea la ora 9) și științifice (joia la ora 16). S-a participat la un workshop organizat în cadrul consorțiului național pentru biogeochimia microelementelor, la o sesiune de comunicări organizată de catedra de geochimie a Universității Alexandru Ioan Cuza din Iași și la un workshop pentru tineri cercetători organizat de Institutul de Geografie al Academiei Române.

3 Concluzii

Din punct de vedere managerial activitățile prevăzute în proiect au fost desfășurate cu succes. Este încă prematură extragerea unor concluzii științifice, însă activitățile de analiză comprehensivă a modelelor existente în domeniul biogeochimiei microelementelor confirmă faptul că strategia adoptată în proiect este în acord cu cele mai noi tendințe pe plan internațional, și anume cuplarea modelelor de tipuri diferite și de același tip la același nivel ierarhic și între niveluri ierarhice.