



ФАКУЛЬТЕТ
ПОЧВОВЕДЕНИЯ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ПОЧВОВЕДЕНИИ

ШЕИН
ЕВГЕНИЙ ВИКТОРОВИЧ

ФАКУЛЬТЕТ ПОЧВОВЕДЕНИЯ МГУ

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН
СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ
ПРОФ. РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ
СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ.
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ
НА [VK.COM/TEACHINMSU](https://vk.com/teachinmsu).

ЕСЛИ ВЫ ОБНАРУЖИЛИ
ОШИБКИ ИЛИ ОПЕЧАТКИ,
ТО СООБЩИТЕ ОБ ЭТОМ,
НАПИСАВ СООБЩЕСТВУ
[VK.COM/TEACHINMSU](https://vk.com/teachinmsu).

Шеин Евгений Викторович

Конспект лекций

Математическое моделирование
в почвоведении

Конспект выполнен студентом факультета ВМК
Ахмадеевым Ильдаром Илнуровичем

Содержание

1	Лекция 1. Экспериментальное обеспечение моделей	5
1.1	Основные физические законы в моделях переноса.	5
1.2	Образ почвы в физически обоснованных моделях	6
1.3	Физическое обоснование. Уравнение неразрывности	7
1.4	Вывод уравнения неразрывности.	7
1.5	Основные уравнения.	9
2	Лекция 2. Физические основы модели теплопереноса	14
2.1	Нижние граничные условия	14
2.2	Тепловой режим почвы	16
2.3	Педотрансферные функции	20
2.4	Нейронные сети	22
3	Лекция 3. Аппроксимация эмпирических зависимостей	24
3.1	Математические уравнения для описания эмпирических данных	24
3.2	Определение параметров аппроксимации	28
3.3	Статистики для анализа параметров	31
3.4	Анализ ошибок	32
4	Лекция 4. Аппроксимация экспериментальных данных	33
4.1	Анализ ошибок	33
4.2	Анализ на систематические погрешности	35
4.3	Функции, наиболее употребительные в почвоведении	36
4.4	Непараметрический критерий Вильямса-Клюта	36
4.5	Модели равновесия и переноса веществ в почвах	37
4.6	Модели переноса веществ в почвах	39
5	Лекция 5. Математическое описание члена конвективного-диффузионного уравнения «источник-сток»	44
5.1	Сорбция	45
5.2	Движение растворов по межагрегатному пространству почвы.	48
5.3	Полевой фильтрационный эксперимент	49
5.4	Модели переноса пестицидов (на примере $MACROD_B$)	52
6	Лекция 6. Работа с физически обоснованными моделями	55
6.1	Модель водо- и солеобмена почв в <i>HYDRUS</i>	56
6.2	Основные расчетные процессы модели <i>HYDRUS</i>	58
6.3	Формирование препроцессора	59
6.4	Постпроцессор	61

6.5	Сравнение моделей. Критерий Сайерта	62
6.6	Проверка моделей на систематические ошибки	63
6.7	Модель поглощения питательных элементов растениями	63
6.8	Основные уравнения модели	65
6.9	Определение чувствительности модели	65

Лекция 1. Экспериментальное обеспечение моделей

Основные физические законы в моделях переноса.

Физически обоснованные модели

Два важнейших закона лежат в основе всех физически обоснованных моделей, называемых детерминистическими. Один из них – это **закон неразрывности**:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial q}{\partial z} \quad (1.1)$$

x – переменная состояния, t – время, q – поток переменной состояний, z – глубина, ∂ – частная производная, дифференцирование происходит как по времени, так и по расстоянию.

Модель будет изучать динамику во времени и изменение переменной состояния по глубине. Закон говорит о том, что необходимо соблюдать закон баланса. Пока что нет никаких сомнений в том, что закон баланса где-то и когда-то нарушался, во всяком случае в солнечной системе. Закон баланса действует, и все модели используют этот закон как в своей сути, так и для проверки своих решений. Если баланс сходится, значит модель работает адекватно.

Второй закон – **закон потока**. Поток любой субстанции: воды, тепла, соли, любой другой субстанции в почве или в природе.

$$q = K \frac{d\psi}{dz} \quad (1.2)$$

Определяется градиентом движущей силы и постоянной величиной K – коэффициент проводимости, способность среды проводить этот поток. Например, аналогами закона потока являются: закон Дарси, закон Фурье, закон Ома, закон переноса газов, воды, тепла. Он справедлив для множества явлений.

Пространственно-распределенные модели характеризуются изменением переменной состояния по расстоянию $\frac{dx}{dz}$.

Динамические модели характеризуются изменением переменной состояния по времени $\frac{dx}{dt}$.

Имитационные модели требуют специальной математической процедуры. Это так называемый «сеточный» метод решения. Если вы используете этот метод, то, как правило, ваша модель имитационная, и наоборот, если ваша модель имитационная, то вы обязаны почти всегда использовать сеточный метод расчета. Это метод

основанный на специальных численных решениях поставленных задач, а не на аналитических.

Образ почвы в физически обоснованных моделях

В ландшафте это выглядит следующим образом:

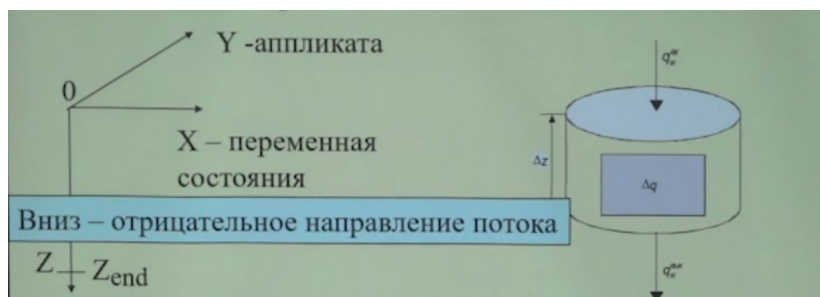


Рис. 1.1. Образ почвы в физически обоснованных моделях

X - переменная состояния, направлена горизонтально, Z - глубина, ось направлена вниз, Y - аппликата

Уравнение неразрывности в отношении воды:

$$\frac{\Delta \Delta V}{\Delta t} = \frac{\Delta \theta \cdot \Delta z}{\Delta t} = q_w^{\text{вх}} - q_w^{\text{вых}} \quad (1.3)$$

Изменение запасов влаги во времени, характеристика водного режима почв, будет определяться изменением влажности во времени и разницей входящих и выходящих потоков в той или иной почвенной толще.

Выражение преобразуется в:

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{dq}{dz} \quad (1.4)$$

Изменение влажности определенной толщи почвы во времени пропорционально изменению потока в рассматриваемой толще колонки.

$$\frac{dC}{dt} = \frac{dq_c}{dz}$$

Уравнение касающееся концентрации вещества - C . Если переменная - состояние концентрации иона, то уравнение практически не меняет свой вид. Здесь подразумевается поток данного вещества по расстоянию.

Физическое обоснование. Уравнение неразрывности

Уравнение неразрывности (закон баланса), в случае отсутствия боковых оттоков и притоков веществ:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial q_x}{\partial z} \quad (1.5)$$

Однако, так в жизни не бывает во время передвижения влаги в почвенном профиле.

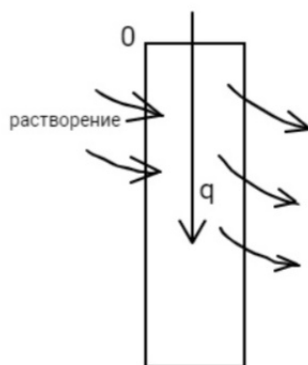


Рис. 1.2. Почвенный профиль

0 – верхняя граница, q – потоки. Во время движения того или иного вещества (воды, солей) будет происходить сорбция – удаление вещества. Так же оно может потребляться растениями. С другой стороны может происходить растворение из окружающей почвы (растворение минералов) – поступление ионов в процессе вертикального переноса. Во время вертикального переноса невозможно избежать процессов отбора или поступления, все эти процессы обозначаются $\pm I$, где I – источник/сток.

В случае боковых притоков и оттоков веществ:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial q_x}{\partial z} \pm I \quad (1.6)$$

Вывод уравнения неразрывности.

Цилиндр – объем почвы z , площадь $-S$, q входящее и выходящее, втекает и вытекает. Подчиняется закону неразрывности.

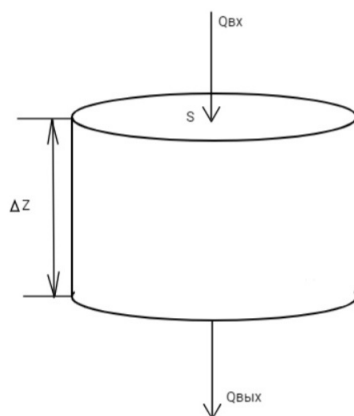


Рис. 1.3. Объем почвы

$$q_w = \frac{Q_w}{\Delta t \cdot S} \quad (1.7)$$

Рассматриваем в отношении водного баланса. Поток $-q_w$, Q_w – количество вещества. Поток – это количество вещества, протекающее через единицу площади в единицу времени. Такова физическая основа потоков.

$$Q_c = q_c \cdot \Delta t \cdot S$$

$$q_{\text{вх}} \cdot \Delta t \cdot S - q_{\text{вых}} \cdot \Delta t \cdot S = \Delta \theta \cdot \Delta Z \cdot S$$

$$(q_{\text{вх}} - q_{\text{вых}}) = \frac{\Delta \theta \cdot \Delta Z \cdot S}{\Delta t \cdot S}$$

Площади сокращаются. Обозначаем разницу выходящего потока.

$$\frac{\Delta q_w}{\Delta Z} = \frac{\Delta \theta}{\Delta t}$$

При выведении уравнения неразрывности использовался только закон баланса. Вода никуда не девается из общего объема, она только входит и выходит и не трансформируется в другие формы. Размерность левой части должна соответствовать размерности правой части.

Левая:

$$\frac{\text{см водн.слоя}}{\text{сут} \cdot \text{см}} = \frac{1}{\text{сут}}$$

Правая:

$$\frac{\text{см}^3}{\text{см}^3} = \frac{1}{\text{сут}}$$

Размерности равны. Закон неразрывности – это первый закон, который мы можем применять, чтобы использовать значение потоков во времени, связывающих пространственно-временные соотношения.

Основные уравнения.

Уравнение Дарси для насыщенной влагой почвы:

$$q_w = K \frac{dP}{dZ} \quad (1.8)$$

K_f – коэффициент фильтрации. Закон Дарси используется для процессов фильтрации, но в почве фильтрационные явления крайне редки, поэтому используется модифицированный закон Дарси для ненасыщенной влагой почвы. P – это перепад гравитационных составляющих. Дарси говорил, что вода потечет по градиенту напора. Это происходит в насыщенной толще.

В модифицированном законе вместо гравитационного давления используется капиллярно-сорбционное, которое возникает в почвенных капиллярах за счет менисковых сил, за счет сорбционных сил поверхности твердой фазы. Это первая модификация. За рубежом его называют матричным давлением. Вторая модификация: вместо константы коэффициента фильтрации надо использовать функцию влагопроводности, то есть зависимость коэффициента влагопроводности от капиллярно-сорбционного давления $K_{в.л} = f(P_{к.-с.})$.



Рис. 1.4. Зависимость коэффициента влагопроводности от капиллярно-сорбционного давления

Уравнение Дарси для ненасыщенной влагой почвы:

$$q_w = K_{\text{вл}}(P_{k.-c.}) \cdot \left(\frac{dP_{k.-c.}}{dz} - 1 \right) \quad (1.9)$$

Для области фильтрации закон Дарси справедлив в чистом виде, для случаев с ненасыщенной влагой необходимо его модифицировать.



Рис. 1.5. Перепад давления в почве

При вычислении разницы давлений используется гравитационная составляющая Z , которая так же передвигает воду. Она сокращается в уравнении, отсюда -1 в уравнении Дарси.

Капиллярно-сорбционное давление измеряем в единицах [см.водн.ст], который давит на определенную поверхность, это внесистемная единица. Если расстояние в [см], то получается безразмерная величина, что очень удобно для математических преобразований. Так как мы работаем с физически обоснованными моделями, то надо обязательно соблюдать первое правило физики: правило размерностей (обязательно соблюдать необходимые размерности). Подчиняясь этому правилу, влажность будет измеряться в [см³/см³](см³ воды/см³ почвы). В таком случае безразмерная величина в моделях обозначается $[-]$. Расстояние в [см], время измеряется в сутках [сут].

При подставлении уравнения Дарси для ненасыщенной влажности почвы в уравнение неразрывности, получаем единое уравнение:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial \left[K_{\text{вл}}(Pk - c) \cdot \left(\frac{dP_{k-c}}{dz} - 1 \right) \right]}{\partial z} \quad (1.10)$$

Решение такого уравнения невозможно, потому что здесь есть и переменная влажность, и переменное давление. Тогда гидрологи и гидрофизики предложили следующий подход: надо ввести относительную величину для влажности и давления влаги.

Эта величина была придумана и названа дифференциальной влагоемкостью. Дифференциальная влагоемкость обозначается C , характеризует изменение влажности к изменению давления:

$$C = \frac{d\theta}{dP_{k-c}} \quad (1.11)$$

Если в уравнении одна переменная, то его решение возможно. Таким образом, основной всех передвижений влаги, газов и других веществ является *уравнение Ричардса*, в котором большое значение имеет величина C . Основная гидрофизическая характеристика – это зависимость между объемной влажностью и капиллярно-сорбционным давлением. Вместо величин давления используют логарифм PF (давление влаги, взятого по абсолютной величине и выраженного в см. водного столба).

Для каждой почвы эта зависимость уникальна. Зависимость характеризует все водные процессы водоудерживания и влагопроводности почвы, и является зависимостью между влажностью и давлением влаги. Давление влаги стремится к нулю, где почва насыщенная, а дальше влажность уменьшается и близка к влажности завядания или почвенно-гидрологическим константам.

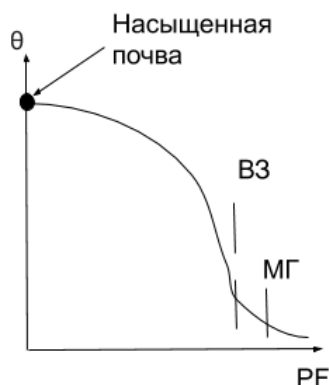


Рис. 1.6. Зависимость между влажностью и давлением влаги

Получается, что дифференциальная влагоемкость есть отношение изменения давления при изменении ΔP . Теперь возможно решить дифференциальное уравнение, после решения которого можно дать математическое описание движения влаги, можно узнать сроки полива и время полива, рассчитать дренаж и управлять водным режимом.

Решение этого уравнения потребовало других способов – сеточным методом.

$$C_i^j \frac{P_i^{j+1} - P_i^j}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta z} \left[K_{i+\frac{1}{2}}^j \left(\frac{P_i^j - P_{i+1}^j}{\Delta z} - 1 \right) - K_{i-\frac{1}{2}}^j \left(\frac{P_{i-1}^j - P_i^j}{\Delta z} - 1 \right) \right] \quad (1.12)$$

Представлено уравнение в конечно-разностной форме, где j – время, $j + 1$ – время в следующий момент, P^j – давление влаги в настоящий момент, P^{j+1} – давление влаги в следующий момент, i – слои почвы. Для того чтобы решить это уравнение надо использовать конечно-разностную схему. Для этого надо разбить почву на слои и рассматривать этот процесс по времени.

Сеточная схема расчёта

На Рис. представлены слои $i, i - 1, i + 1$ в почвенной толще и расстояние между ними Δz . Столбцы j и $j + 1$ указывают время. Также указаны коэффициенты проводимости ($K_{i+\frac{1}{2}}, K_{i-\frac{1}{2}}$) между слоями, которые необходимы для того, чтобы посчитать перетоки.

Сеточная схема расчёта состоит из таблицы и формулы. Таким образом, можно предсказать давление в следующий момент времени - сделать прогноз. Прогнозировать когда поливать растение, сколько поливать поле, рассчитать дренаж и его глубину. Неизвестное - P_i^{j+1} давление влаги в $j + 1$ момент.

Экспериментальное обеспечение моделей:

- 1) Начальные условия — Начальное распределение давлений по слоям i в момент j
- 2) Граничные условия, давление внизу и наверху. ВГ – верхняя граница почвы или поверхность почвы, на которую падают осадки, испарения, идет полив. НГ – нижняя граница почвы, в которой происходят процессы стока, притока, либо влажность постоянная, как в случае гидроморфных почв, насыщенных

Слои \ Время	j	$j+1$
$i-1$	P_{i-1}^j $K_{i-1/2}$	
i	P_i^j $K_{i+1/2}$	P_i^{j+1}
$i+1$	P_{i+1}^j	

Рис. 1.7. Сеточная схема расчёта

грунтовыми водами. В математике предложили условие трёх родов на нижней границе для того, чтобы расчёты протекали в строгой математической форме.

- 3) Гидрофизические функции – Основная гидрофизическая характеристика (ОГХ), которая в моделях выражается в виде величины дифференциальной влагоемкости.

$$C = \frac{d\theta}{dP}$$

Вторая гидрофизическая функция — это функция влагопроводности или функция проводимости почвы, – способность почвы проводить поток влаги (послойно). Зависит от функции давления влаги.

Лекция 2. Физические основы модели теплопереноса

Экспериментальное обеспечение моделей:

- 1) Начальные условия — это пространственное (по профилю почвы) распределение переменной состояния (температуры, влажности, концентрации вещества пр.) в начальный (нулевой) момент времени, с которого начинаются расчёты.
- 2) Модель движения воды в почве

Условия на верхней границе:

- Испарение, транспирация
- Осадки, поливы

Условия на нижней границе:

- Постоянная влажность (давление влаги)
 - Постоянный градиент
 - Задан поток воды
- 3) Граничные условия — это задание потоков, градиентов или конкретных значений переменной состояния на верхней и нижней границах почвы в каждый момент времени за расчётный период.

Нижние граничные условия

Существуют три типа нижнего граничного условия.

Первый тип: Постоянное. В этом случае на глубине z влажность равна некоторой постоянной величине.

$$\theta(z_{end}, t) = \theta_0 \quad (2.1)$$

z_{end} — глубина, которую мы выбрали как нижнюю границу, не меняется в течение расчёта.

$$\theta_0 = const$$

Первый тип характерен для гидроморфных почв, у которых в нижней границе почвы постоянно присутствуют грунтовые воды. Гидроморфизм — это когда формирование почвы связано с присутствием воды. А влажность в грунтовых водах близка

к насыщению. Также первый тип граничных условий характерен для автоморфных почв, такие как чернозёмы, степные почвы, каштановые почвы. Они не промачиваются ежегодно через профиль, а промачиваются через глубины. В следствии того, что растения имеют глубокую корневую систему, что влага в огромном количестве уходит на испарение, на некоторой глубине задается мертвый запас (засушливый слой), который имеет примерно одну и ту же влажность в течение длительного времени ниже, чем влажность завядания. Если мы интересуемся толщей, который лежит над мертвым запасом, мы можем поместить нижнюю границу в мертвый запас и дальше производить расчёты, приняв, что наша модель использует первого рода граничные условия.

Второй тип: Закрытое. Когда градиент влажности по времени на нижней границе равен нулю.

$$\frac{\partial \theta(z_{end}, t)}{\partial z} = 0 \quad (2.2)$$

Второй тип также называется условием Неймана. Говорит о том, что влажность может быть и не постоянна, может быть низкой или высокой, но изменение влажности по расстоянию равно нулю. В это время в нижней части почвы на нижней границе могут происходить потоки. В почвах это условие используется редко. Используется лишь для некоторой части почвы. Например надо рассчитать как будет вести себя некий слой почвы в какой-то период времени, при этом он может менять влажность, но поток может существовать между верхним и нижележащими слоями. Однако, изменение влажности по расстоянию будет постоянным и равно нулю.

Третий тип: Потокое. Выражается формулой z_{end} по времени, есть величина влажности постоянной, умноженная на потоковую характеристику.

$$\theta(z_{end}, t) = \theta_0 + K \frac{\partial \theta(z_{end}, t)}{\partial z} \quad (2.3)$$

На нижней границе почвы возможны перетоки как вверх, так и вниз. Это условие в наибольшей степени приближается к тем естественным почвам, которые мы описываем. В этом случае необходимо задать коэффициент, который определяет переток воды как вверх, так и вниз, и соответствующую влажность. В почвоведении не так часто применяется условие Коши. Чаще всего это условие используют гидрогеологи, которые считают перетоки грунтовых вод из одного слоя в другой. Если мы решаем какие-нибудь вопросы, связанные с засолением, и нам нужно знать, какое количество веществ (ионов) поступают или уходят с нижней границы почвы, мы

должны использовать третье условие. В частности, в пестицидных моделях используются условия Коши, где пестициды могут двигаться вниз и уходить за пределы нижней границы.

Тепловой режим почвы

Температурный режим почвы – T

Изменение температуры во времени $\frac{\partial T}{\partial t}$ говорит о динамике температуры. Надо уметь предсказывать, как все происходит в почве с динамикой температуры. Например нам необходимо знать сроки посадки картофеля. Мы должны прежде всего ориентироваться на температуру на некоторой глубине, на которой мы будем сажать картофель. Если мы будем сажать картофель при температуре ниже допустимой температуры прорастания, то урожая не будет. А если при более высокой температуре картофель прорастет, но мы потеряем время наступления других стадий плодотворения клубней. Поэтому чрезвычайно важно уметь предрасчитывать динамику температуры в различных слоях почвы.

Перенос тепла в почве

Перенос тепла – это закон Фурье. Закон Фурье говорит о том, что поток тепла q_T равен величине λ и на градиент температуры.

$$q_T = -\lambda \frac{dT}{dz} \quad (2.4)$$

q_T – поток тела в почве [кал.см² сут],

λ – коэффициент теплопроводности [кал.см С⁰ сут],

$\frac{dT}{dz}$ – градиент температуры [С⁰/см].

λ – количество тепла (в кал или Дж), прошедшего в единицу времени (сут или секунду) через единичное сечение почвы (см² или м²) при единичной толщине слоя почвы (1 см или 1 м) и при разнице температур в 1°С (или 1 К).

Знак минус феноменологический. Градиент направлен от меньшего к большему (от меньшей температуры к большей температуры), а поток тепла в обратную сторону.

Уравнение теплопереноса

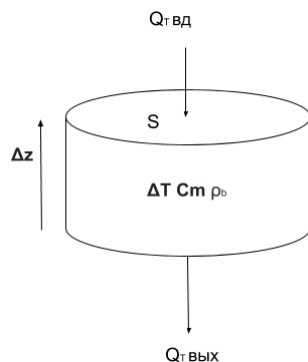


Рис. 2.1. Теплоперенос

Рассматриваем количество тепла, поступившее в некий слой почвы, и количество тепла, которое выходит из этого слоя почвы.

Δz – мощность слоя почвы

S – площадь цилиндра

$\Delta T C_m \rho_b$ – нагрев или остывание которое наблюдается в нашем слое почвы

Для того, чтобы был баланс разность потоков, умноженная на время и площадь, будет равна процессу остывания на объём цилиндра. Сокращаются величины площади, и получаем уравнение: изменение потока тепла по расстоянию есть изменение температуры во времени, умноженное на удельную массовую теплоемкость и на ρ_b .

$$\Delta q_T \times S \times \Delta t = \Delta T \times C_m \times \rho_b \times S \times \Delta z \quad (2.5)$$

$$\frac{\Delta q_T}{\Delta z} = \frac{\Delta T}{\Delta t} \times C_m \times \rho_b$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_T \frac{\partial T}{\partial z} \right) = C_m \times \rho_b \times \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.6)$$

Подставляем уравнение для закона Фурье и получаем основное уравнение теплопереноса — изменение температуры во времени есть величина коэффициента пропорциональности, умноженная на вторую производную температуры по расстоянию.

$$\frac{T}{\partial t} = k \times \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (2.7)$$

где

$$k = \frac{\lambda}{C_m \times \rho_b}$$

k – коэффициент температуропроводности, имеющий размерность [см²/сут, см²/с], совпадающую с коэффициентом диффузии для солей. Синоним — термодиффузивность.

Расчёт переноса тепла внутри почвы

Надо найти динамику температуры $T(z, t)$ по амплитуде на поверхности.

Записываем уравнение теплопереноса в конечных разностях:

$$\frac{T_i^j - T_i^{j+1}}{\Delta t} = k \left[\frac{(T_{i-1}^j - T_i^j) - (T_i^j - T_{i+1}^j)}{\Delta z^2} \right] \quad (2.8)$$

$$T_i^{j+1} = T_i^j - k \times \Delta t \times \left[\frac{T_{i-1}^j - 2T_i^j + T_{i+1}^j}{\Delta z^2} \right] \quad (2.9)$$

T_i^j – температура слоя i в моменте j .

T_i^{j+1} – температура в следующий момент времени, который мы должны уметь предсказывать.

Получается, что мы имеем возможность по значениям температуры в слоях рассчитать температуру в следующий момент времени — сделать прогноз температуры. Чем меньше промежутки по времени (шаг по времени) и чем подробнее мы будем брать шаг по расстоянию, тем точнее будут расчёты. И так мы получили уравнение, в котором экспериментальным обеспечением будут являться начальные значения температуры в расчётах и величина температуропроводности. Мы не сможем рассчитывать движение пестицида без модели переноса тепла (без нагревания), ведь пестицид будет разлагаться в зависимости от температуры, которая будет изменяться. Мы не сможем считать никакие биологические процессы, если мы не будем знать температуру.

Сеточная схема решения — это необходимое следствие использования имитационных физически обоснованных моделей. С помощью сеточной схемы мы можем найти

Время \ Слой	j	$j+1$
$i-1$	T_{i-1}^j	
i	T_i^j	T_i^{j+1}
$i+1$	T_{i+1}^j	

$K_{i-1/2}$ (между $i-1$ и i)
 $K_{i+1/2}$ (между i и $i+1$)

Рис. 2.2. Сеточная схема расчёта

температуру в следующий момент времени в слое i . А если мы знаем температуру верхнего слоя и нижнего слоя, то мы можем найти температуру в следующий момент в слоях $i+1$ и $i-1$. Так осуществляется прогноз температуры. В этом случае экспериментальным обеспечением будет являться:

- Верхние граничные условия — температура которая наблюдается на поверхности почвы.
- Нижние граничные условия — температура которая будет наблюдаться на нижней границе почвенного профиля.
- Экспериментально определяемый коэффициент температуропроводности для слоев почвы.

Условия для применения расчётной схемы

- Большое количество слоев. Каждый горизонт с конкретными свойствами разбивается на большое количество отдельных слоев.
- Малый (переменный) шаг по времени. Задается начальный (минимальный) и допустимый (максимальный) шаг по времени.

Раньше в предыдущих моделях малый шаг по времени был постоянным, и чем меньше был период расчёта по времени, тем подробнее работали модели. Но иногда случалось так, что происходило резкое нагревание поверхности, и возникали мощные перетоки тепла, когда температура изменяется быстро на поверхности. И в этом случае, надо делать более мелкий шаг по времени чтобы модель успела свести балансы

за эти маленькие промежутки времени. Для этого математики придумали процедуру переменного шага по времени. Когда на верхней границе наблюдаются интенсивные переносы энергии или вещества, автоматически модель в современных программах подбирает более маленькие шаги по времени. А если процессы постепенные, температура почвы изменяется плавно, нет интенсивных нагреваний или остываний, то модель начинает увеличивать шаг по времени.

Педотрансферные функции

Педотрансферными функциями называют зависимости, позволяющие восстанавливать основные свойства и характеристики по традиционным (известным из материалов Почвенных служб) или легкоопределяемым свойствам почв.

Две необходимые составляющие нужны для получения педотрансферных функций:

- 1) Банк данных в Почвенных службах
- 2) Математическая процедура, которая должна сопровождать расчёты неизвестного, трудноопределяемого свойства из известных свойств почвы, которые представлены в банке данных.

Педотрансферные функции определяют методами пошаговой регрессии и безмасштабных (нейронных) сетей.

Пошаговая регрессия – точечный

Используя многочисленные экспериментальные данные гранулометрического состава и ОГХ, методом наименьших квадратов находят эмпирические коэффициенты a, b, c, d, t, f множественной регрессии, например, такого вида:

$$\theta_i = a_i + b_i \omega_{\text{песок}} + c_i \omega_{\text{пыль}} + d_i \omega_{\text{ил}} + e_i \omega_{\text{с}} + f_i \rho_b \quad (2.10)$$

где i относится к одной из равновесных точек $pF - \theta$ на ОГХ, а ω – доля соответствующей фракции в гранулометрическом составе почвы по международной классификации, $\omega_{\text{с}}$ – содержание органического вещества, ρ_b – плотность почвы.

А дальше находят какое из составляющих имеет наименьшее значение методом элиминации. Считают F критерий (критерий Фишера) для этого уравнения. F критерий – это отношение квадрата расчетной дисперсии к квадрату экспериментальной дисперсии. Если например исключим содержание пыли, а дисперсия данного уравнения не изменится, мы можем элиминировать этот параметр из уравнения. Но в

результате, если мы элиминировали несколько параметров, и критерий Фишера не изменил свое значение, тогда мы можем использовать это уравнение для нахождения θ_i для конкретного значения давления.

$$\theta_{330} = b_1 + b_2 \times \Phi\Gamma + b_3 \times \rho_b \quad (2.11)$$

$\Phi\Gamma$ – содержание физической глины

С помощью критерия Фишера мы доказали, что две величины физической глины и плотность почвы определяют влажность при 330 см водного столба. Так же мы можем определить влажность при 1000 см водного столба θ_{1000} . Взаимосвязь для влажности и давления будут иметь разные коэффициенты при θ_{300} и при θ_{1000} . Так мы получаем несколько точек на кривой ОГХ и рассчитываем соответствующую дифференциальную водоемкость.

Если необходимо рассчитать функцию температуропроводности от влажности, имея банк данных и свойства, мы можем подобрать педотрансферное выражение. Но возникают некоторые сложности. Есть максимум переноса тепла и низкие теплопереносы. Такая форма зависимости связано с несколькими механизмами теплопереноса. При низкой влажности — это пароперенос, в период, когда появляется жидкая влага, наступает действие менисковых механизмов, которые приближают частицы почвы, и наблюдается контактный способ переноса тепла. Значение температуропроводности будет уменьшаться с увеличением влажности, частицы будут иметь более толстую пленку воды, и начинает преобладать струйный перенос тепла. Этот способ передачи тепла медленнее, чем контактный способ переноса тепла.



Рис. 2.3. Зависимость температуропроводности от влажности

$$k_{\theta} = b_1 + b_2 \times \Phi\Gamma + b_3 \times \rho_b \quad (2.12)$$

Второй способ: Параметрический

$$\theta = \theta_{min} + (\theta_{max} - \theta_{min}) \times \left(\frac{1}{1 + (\alpha \times P)^n} \right)^{1 - \frac{1}{n}} \quad (2.13)$$

Уравнение ван Генухтена для описания ОГХ. Получают регрессионные выражения для параметров уравнения ван Генухтена (n , α и θ_{max} , θ_{min}) от фундаментальных свойств почвы. Температуропроводность зависит от плотности почвы, но и от минералогического состава. В качестве минералогической характеристики используют отношение емкости катионного обмена к содержанию физической глины. Основное значение в минералогии имеет емкость катионного обмена, и основную емкость катионного обмена будет представлять физическая глина.

Нейронные сети

Нейросетевые алгоритмы — функционирование нейронов в корковых частях мозга.



Рис. 2.4. Нейрон

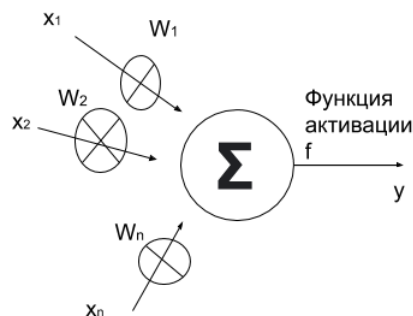


Рис. 2.5. Математическая модель нейрона

- Мозг хорошо решает задачи распознавания образов и прогноза.
- Исследования мозга направлены на поиск системности его работы.
- Были предложены различные математические модели его функционирования.

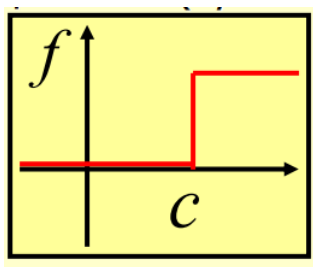


Рис. 2.6. Двоичная функция

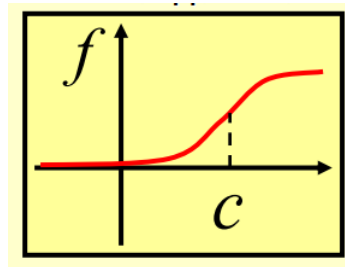


Рис. 2.7. Сигмоидальная функция

Математики предложили, что дендриты будут свойствами (физическая глина, плотность, отношение, характеризующее минералогию), а выходным импульсом будет зависимость между температуропроводностью и влажностью, между влажностью и давлением влаги, между коэффициентом влагопроводности и давлением влаги. Два вида функций активации нейронов: двоичная и сигмоидальная.

$$y = f\left(\sum_{i=1}^n x_i w_i\right) \quad (2.14)$$

Лекция 3. Аппроксимация эмпирических зависимостей

Математические уравнения для описания эмпирических данных

Во время эксперимента получили зависимость y от x и экспериментальные данные. Наша задача — подобрать функцию, которая прошла бы наиболее близко к этим экспериментальным данным и наилучшим образом описала бы эти экспериментальные данные и зависимости между ними. Все функции делятся на шесть больших групп:

- Убывающие функции — когда с ростом аргумента x , убывает y .
- Возрастающие функции
- Функции с одним максимумом
- Функции с одним минимумом
- Функции с несколькими экстремумами
- Функции с изломом

Убывающие функции

Четыре основных вида убывающей функции:

- 1) Линейная — с увеличением x , y уменьшается. Выражается эта функция этим уравнением:

$$y = b_1 - b_2x \quad (3.1)$$

Для процессов в природе или для взаимосвязи свойств природных тел, как правило, линейные функции очень редко встречаются.

- 2) Степенная — выражается как:

$$y = \left(\frac{x}{b_2}\right)^{-b_1} \quad (3.2)$$

Имеет характер убывающей кривой.

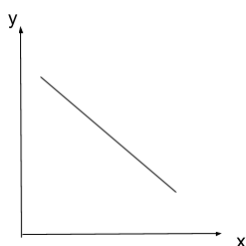


Рис. 3.1. Линейная функция

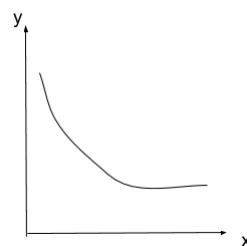


Рис. 3.2. Степенная функция

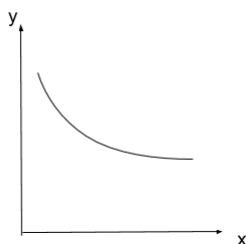


Рис. 3.3. Экспоненциальная функция

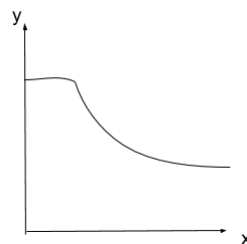


Рис. 3.4. Логистическая функция

3) Экспоненциальная — выражается как:

$$y = b_1 \times \exp(-b_2 \times x) \quad (3.3)$$

Она по виду ближе к степенной. Иногда встает проблема, какую из функций выбрать для убывающего процесса.

4) Логистическая — выражается в двух видах:

$$y = \frac{b_1}{1 + (\frac{b_2}{x})} \quad (3.4)$$

$$y = \frac{b_1}{1 + (\frac{b_2}{x})^{b_3}} \quad (3.5)$$

Логистические функции используются чрезвычайно часто.

Для всех этих функций мы имеем параметры функций (b_1 и b_2). Все виды функций кроме (3.5) имеют двухпараметрические выражения. И только (3.5) имеет трёхпараметрический вид, и параметр b_3 даёт более сильный изгиб этой функции. Иногда это требуется для описания интенсивных процессов. Везде перед аргументом стоят минусы. Если эти минусы поменять на плюсы, то функции из убывающих превращаются в возрастающих. Таким образом, возрастающие функции имеют аналогичный вид только с плюсом. В таком случае смена знака ведет к изменению вида функции.

Функции с одним максимумом

1) Параболические — выражается как:

$$y = b_1 - \left(\frac{x}{b_2}\right)^{b_3} \quad (3.6)$$

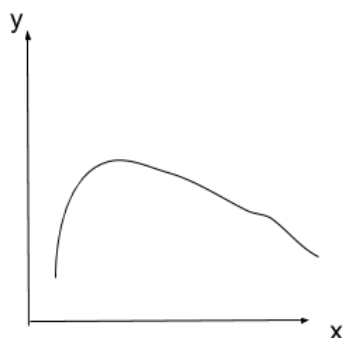


Рис. 3.5. Параболическая функция

Парабола может быть несимметричной. В этой параболе с неравномерными ветвями есть и максимум величина.

2) Гауссиана — выражается как:

$$y = b_1 \times \exp \left[- \left(\frac{(x - b_2)^2}{b_3} \right) \right] \quad (3.7)$$

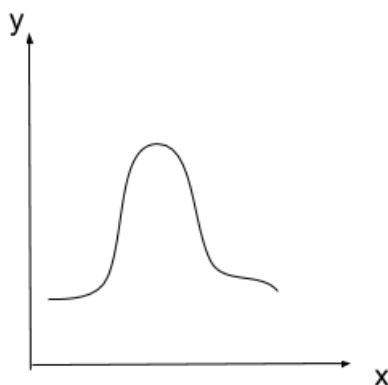


Рис. 3.6. Функция Гауссиана

b_1 —обилие вида

b_2 – биологический оптимум

b_3 – толерантность (мера экологической амплитуды)

Отличается тем, что образует равномерный и симметричный график с одним максимумом, который выражен в виде b_2 . Эта функция широко используется в почвоведении, в экологии и во всех естественных науках.

Эти функции являются трёхпараметрическими для того, чтобы использовать при математическом моделировании. Функция с одним максимумом превращается в функцию с одним минимумом сменой знака аргумента.

Функции с несколькими экстремумами

Будут наблюдаться и максимумы, и минимумы. Эти функции значительно сложнее описать. Если мы имеем подобные процессы, которые надо описать, то используются полиномы различной степени.

$$y = b_1 + b_2x + b_3x^2 + b_4x^3 + \dots \quad (3.8)$$

Если полинома будет многостепенным, то можно будет описать сложные зависимости. В качестве примера можно использовать сплайн-функцию. Это полином 3-й степени, хорошо описывающий прохождение кривой через многочисленные максимумы и минимумы. Используется при картографировании (горизонталы на картографических картах) и не имеет конкретного функционального выражения.

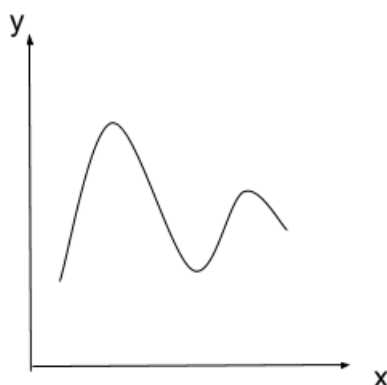


Рис. 3.7. Функция с несколькими экстремумами

Определение параметров аппроксимации

Параметр — это числовой коэффициент или свободный член уравнения, полученный операцией подбора (аппроксимацией) выбранной функцией экспериментальных данных.

Аппроксимация — это операция подбора параметров выбранной функции экспериментальных данных, основанная на нахождении минимума среднеквадратической ошибки (S_r).

$$S_r = \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^n n_j \times \Delta_j^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.9)$$

N — общее количество наблюдений

$$\Delta_j^2 = y_{\text{экспериментальное}} - y_{\text{расчетное}}$$

Разница указывает величину ошибки или погрешности. Δ_j имеют различные знаки, как положительные, так и отрицательные, поэтому Δ_j^2 возводится в квадрат.

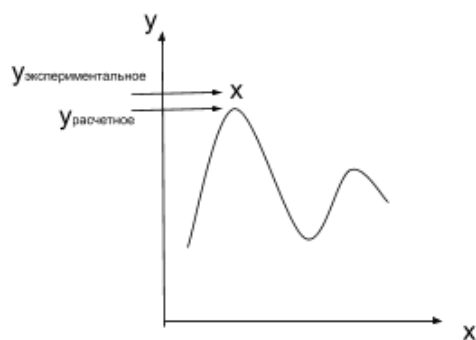


Рис. 3.8. Определение значения Δ_j^2

X	Y
2	1.5
5	2.4
10	3.0
20	4.0

Рис. 3.9. Наблюдение за критической глубиной грунтовых вод в Средней Азии

Расчет среднеквадратической погрешности

x — минерализация

y — глубина

Первая задача: подобрать функцию и найти параметры аппроксимации.

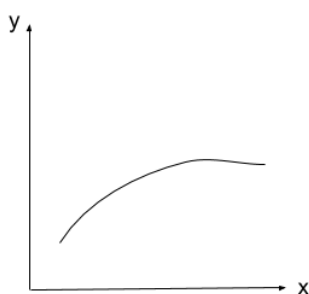


Рис. 3.10. График зависимости критической глубиной грунтовых вод в Средней Азии

Рисуем график зависимости.

По графику видно, что функция степенная возрастающая и стремящаяся максимуму.

$$y = \left(\frac{x}{b_1}\right)^{b_2} \quad (3.10)$$

Задача: найти численные выражения b_1 и b_2 для этого графика зависимости.

$$S_r = \frac{1}{\sqrt{4}} \left[\left[1.5 - \left(\frac{2}{b_1}\right)^{b_2} \right]^2 + \left[2.4 - \left(\frac{5}{b_1}\right)^{b_2} \right]^2 + \right. \\ \left. + \left[3.0 - \left(\frac{10}{b_1}\right)^{b_2} \right]^2 + \left[4.0 - \left(\frac{20}{b_1}\right)^{b_2} \right]^{2\frac{1}{2}} \right] \quad (3.11)$$

Для того, чтобы найти числовые значения b_1 и b_2 , приступаем к сканированию.

Мы имеем площадь, где в левой стороне квадрата изложена величина b_1 , а внизу величина b_2 . Задаем значение для b_1 и b_2 0.3 и в точке пересечения считаем величину S_r , которая равна 0.28. Дальше мы передвигаемся и задаем другие значения вокруг начальной точки, пока не дойдем до $\min S_r$. Из точки $\min S_r$ находим величину b_1 (0.48) и величину b_2 (0.32). Наше выражение приобретает вид:

$$y = \left(\frac{x}{0.48}\right)^{0.32} \quad (3.12)$$

Таким образом, мы знаем численное значение для процесса взаимосвязи уровня грунтовых вод и их засоленности. Мы можем пользоваться этой зависимостью для того, чтобы оценить засоленность, если уровень грунтовых вод будет 30 м. Точки, с которых мы начали (0.3), называются начальными приближениями.

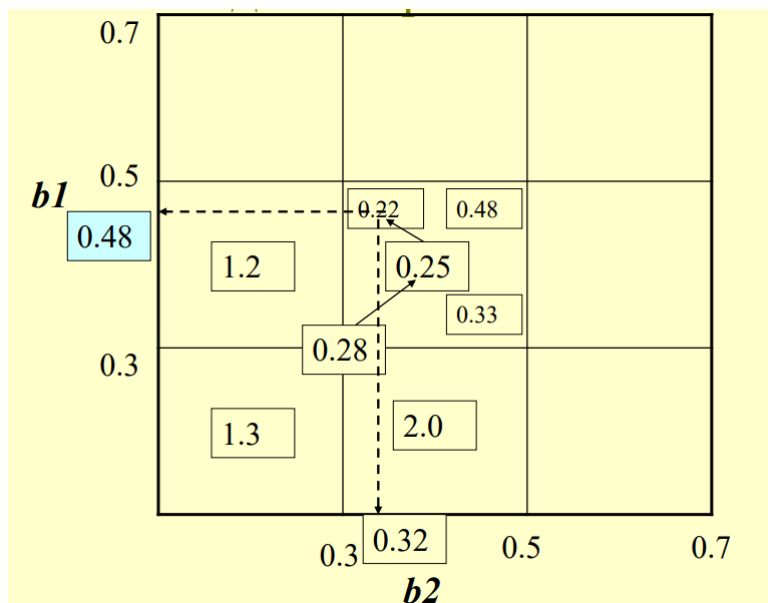


Рис. 3.11. Метод сканирования

Если начальные приближения будут величинами, которые не доступны для процедуры аппроксимации, то мы получим локальный минимум, который дает ложные представления о процессе аппроксимации.

Выбор начальной аппроксимации

Если выбрали степенную возрастающую функцию, угол наклона кривой, с которой кривая стремится асимптоте, является характеристикой b_2 . Из графика возможно найти приблизительное значение b_2 , которое можно использовать как начальное приближение.

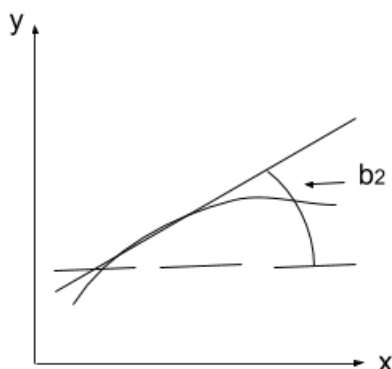


Рис. 3.12. Выбор начального приближения

- 1) Построить график, проанализировать и определить приблизительные величины параметров аппроксимации.
- 2) Метод наискратчайшего спуска.

Статистики для анализа параметров

Для того, чтобы найти достоверность параметра аппроксимации, применяется критерий Стьюдента.

$$t = \frac{\bar{b}}{S_b}$$

\bar{b} – среднее значение параметра

S_b – среднеквадратическая ошибка

Формулируется нулевая гипотеза. По нулевой гипотезе равенство между гипотетической величиной и средней величиной равно нулю.

$$H: \bar{b} = 0$$

И если t расчетная для нашей величины \bar{b} будет превышать t для величины определенной вероятности, то нулевая гипотеза не принимается.

$$t_{\text{расчетная}} > t_{\alpha, n}$$

Это означает, что с уровнем значимости (вероятностью) α можно утверждать, что наш параметр b значимо отличен от нуля. Параметр b достоверен.

Грамотная программа, как STATISTICA, сравнивает полученную расчетную величину с табличной. Если число параметра обозначено красным, то параметр значен с уровнем значимости $\alpha = 0.05$.

Получили коэффициент корреляции ($r = 0.99$), который показывает линейную связь. Но для этого коэффициента корреляции надо посчитать его достоверность. С помощью этой достоверности будет определена достоверность коэффициента корреляции.

Анализ ошибок

Ошибки могут быть случайными и систематическими.

- Строят график $y_{\text{эксп}}$ от $y_{\text{расч}}$
- Коэффициент корреляции

Систематические ошибки

- Гистограмма Δ
- Графический анализ зависимости Δ от $y_{\text{эксп}}$
- Аналитический анализ зависимости Δ от $y_{\text{эксп}}$

Регрессия Δ на $y_{\text{эксп}}$:

$$\Delta = a + by_{\text{эксп}}$$

Оцениваются параметры a и b . Если параметры не достоверны, то это означает, что нет систематической ошибки.

Лекция 4. Аппроксимация экспериментальных данных

Анализ ошибок

После того, как получаем значение $u_{\text{эксп}}$ и $u_{\text{расч}}$ строим график зависимости. Если все точки находятся около биссектрисы угла, то это означает, что расчетные данные совпадают с экспериментальными данными.

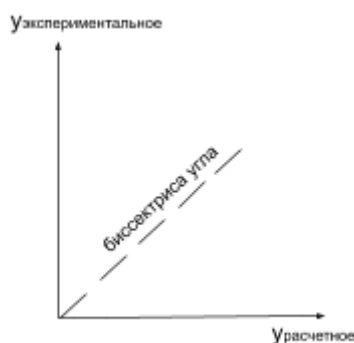


Рис. 4.1. Зависимость $u_{\text{эксп}}$ от $u_{\text{расч}}$

Также рассчитывают коэффициент корреляции. Не всегда это приводит к убедительному доказательству того, что аппроксимация хорошо совершилось. Дело в том, что коэффициент корреляция показывает тесноту линейной связи, но не показывает место прохождения линии. Также не убеждает в том, что отсутствуют систематические ошибки.

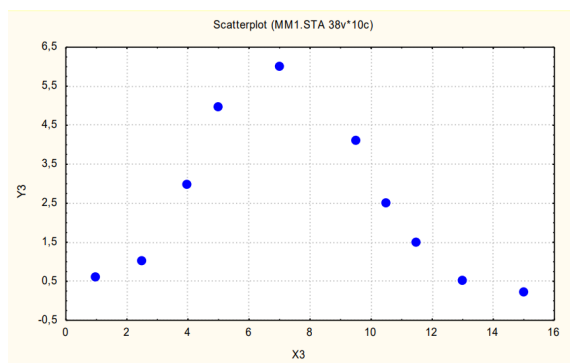


Рис. 4.2. Зависимость y от x

Model: $v2=b1*\exp(-((v1-b2)**2)/b3)$			
Dep. var: Y3 Loss: (OBS-PRED)**2			
Final loss: ,424475197 R=,99427			
Variance explained: 98,8			
	b1	b2	b3
Estimate	6,21813	7,05382	13,53232
Std.Err.	,21240	,07867	,89626
t(7)	29,27611	89,66772	15,09865
p-level	,004230	,00005	,0876210

Рис. 4.3. Выдача параметров после аппроксимации

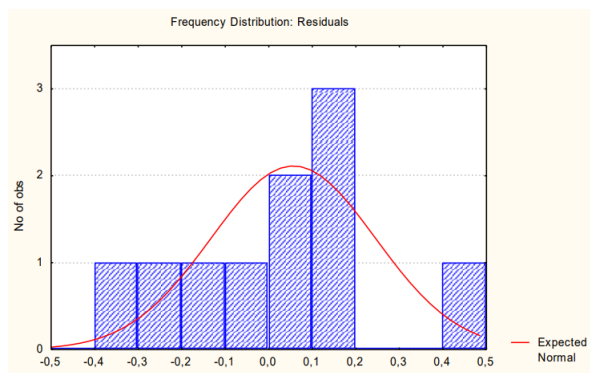


Рис. 4.4. Гистограмма погрешностей

Систематические ошибки могут возникать при аппроксимации, при отклонении расчетных данных от экспериментальных данных. В этом случае, для убедительности надо построить зависимость y от x , получить выдачу параметров (b_1, b_2, b_3) и построить гистограмму погрешностей $U_{расч} - U_{экср}$.

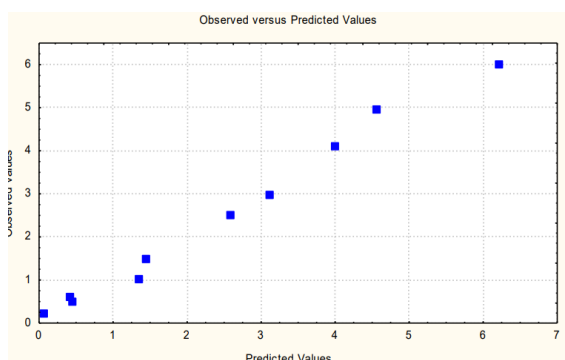


Рис. 4.5. Гистограмма погрешностей

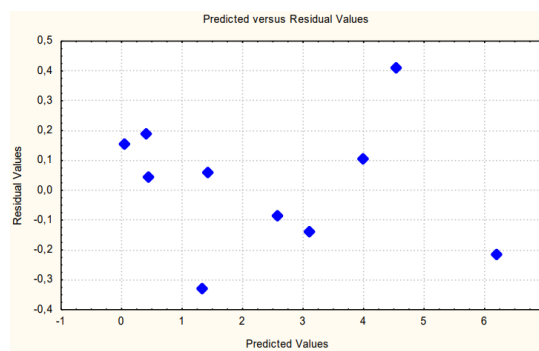


Рис. 4.6. График зависимости погрешностей от расчетной величины

Гистограмма показывает ошибки, которые возникли в результате аппроксимации, и получаем нормальную линию. Дальше надо построить график зависимости погрешностей от расчетной величины.

Если при увеличении расчетных данных точки ошибок находятся около значений близко к нулю, то это показывает, что ошибки лежат по обе стороны функции Гауссиада. Если при возрастании ошибки начинают стремиться и возрастать, то это неблагоприятная ситуация. Область соответствующих y называется областью применения. В этой области ошибки не велики и лежат по обе стороны от нуля.

Анализ на систематические погрешности

Для того, чтобы статистически доказать, что систематические ошибки не велики, строят график зависимости регрессии Δ от $a + by_{\text{реальное}}$, линейную регрессию, где a и b являются коэффициентами линейной регрессии. Если a достоверно отличается от нуля, то присутствует систематическая ошибка, если

$$b \neq 0$$

то есть зависимость погрешности от измеряемой величины.

$$\Delta = a + by_{\text{реальное}} \quad (4.1)$$

Если мы получаем две выборки значения x_1, y_1 и x_2, y_2 для одной и той же функции, то нас интересует отличаются ли эти две выборки друг от друга.

Таким образом, мы используем формулу для статистического доказательства значимости различий параметров.

$$t_{\text{расч}} = \frac{|b'_n - b''_n|}{\sqrt{(S_{b'_n})^2 + (S_{b''_n})^2}} \quad (4.2)$$

b'_n – значение из первой выборки

b''_n – значение из второй выборки

Если расчетное значение больше, чем табличное значение ($t_{\text{расч}} > t_{\text{табл}}$) для N, α , то параметры двух аппроксимаций значимо различаются.

$$t_{7,0.95} = 2.36 ; t_{8,0.95} = 2.31$$

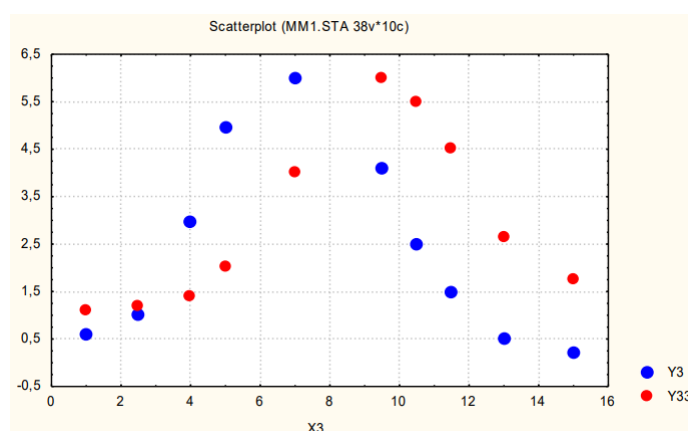


Рис. 4.7. Сравнение параметров

Функции, наиболее употребительные в почвоведении

В химии почв: уравнения сорбции.

- Степенная функция — уравнение Фрейндлиха.

$$Q = mC^n \quad (4.3)$$

Параметры имеют физические свойства, и n указывает на количество сорбционных центров и их активность.

- Логистическая функция — уравнение Ленгмюра

$$A = A_{\infty} \frac{K_L C}{1 + K_L C} \quad (4.4)$$

A – абсорбция

K_L – коэффициент Ленгмюра

C – концентрация

Коэффициент Ленгмюра указывает на характеристику процесса абсорбции.

- Гауссиана (агрохимия, биология почв) для оценивания урожая.

Иногда бывает, что мы не знаем вид кривой и не можем подобрать к полученным данным функцию из тех шести видов. Например, кривая сорбции паров воды на почвенной матрице. Получается S -образная функция. Для этого надо использовать принцип элиминирования с использованием пошаговой регрессии, начиная с полинома.

$$\theta = b_1 + b_2x + b_3x^2 + \dots + b_6x^5 \quad (4.5)$$

На основании F критерия, можно исключать поочередно степени полинома для описания этой кривой и достоверно по анализу критерия Фишера.

Непараметрический критерий Вильямса-Клюта

Используется для сравнения двух функций и выбора лучшей. Основан на расчетах двух величин этого критерия V_i (полусумма соответствующих ошибок) и U_i (разность этих ошибок).

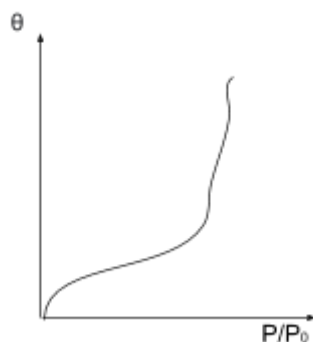


Рис. 4.8. Зависимость влажности от давления

$$V_i = \frac{1}{2}(\Delta'_i + \Delta''_i) \quad (4.6)$$

$$U_i = (\Delta''_i - \Delta'_i) \quad (4.7)$$

$$V_i = \alpha \times U_i \quad (4.8)$$

Δ'_i – ошибка первой модели

Δ''_i – ошибка второй модели

Дальше строится регрессия (4.8). Чем больше α , тем значительнее отличаются модели. Дальше оценивается достоверность α по критерию Стьюдента. Если α достоверно, то модели достоверно различаются. Если $t_{\text{критерий}}$ больше нуля, то первая модель лучше, а если $t_{\text{критерий}}$ меньше нуля, то вторая модель лучше.

Модели равновесия и переноса веществ в почвах

Модели равновесия ионов в почвах

- Гомо- и гетерогенный обмен
- Сорбция (мгновенная и динамическая)
- Другие (разложение, разбавления, осаждения)

Гомогенный обмен возникает тогда, когда n молекул A встречается в растворе, в расплаве с n молекулами B , и формируется n молекул C и n молекул D . Это называется стехиометрическими коэффициентами.



v1	v2	Δ'	Δ''	V $V_i = \frac{1}{2}(\Delta'_i + \Delta''_i)$	U $U_i = (\Delta''_i - \Delta'_i)$	a $V_i = a \cdot U_i$	t-value	p-level для a
2	1.5	-0.08	-0.431	-0.25560	-0.3512	0.6210	4.250	0.02385
5	2.4	0.111	0.210	0.160635	0.09885			
10	3	-0.029	0.299	0.13506	0.3289			
20	4	-0.009	-0.106	-0.05797	-0.0965			

ВЫВОД: 1. Модели достоверно различаются, т.к. a достоверно;
2. Степенная функция лучше, т.к. t -value положителен.

Рис. 4.9. Пример расчета критерия Вильямса-Клюта

Для того, чтобы использовать уравнения надо термодинамически выразить показатели этого химического уравнения в виде активности. Для реальных растворов используется активность:

$$\mu_i = \mu_0 + RT \ln a_i \quad (4.10)$$

А для идеальных растворов используется концентрация:

$$\mu_i = \mu_0 + RT \ln c_i \quad (4.11)$$

Концентрация не отражает полностью взаимодействия в химической реакции. Дальше на основании концентрации определяется коэффициент активности.

$$\ln a_i = \frac{\mu_i - \mu_0}{RT} \quad (4.12)$$

$$a_i = \gamma_i \times c_i \quad (4.13)$$

Основные уравнения равновесий

$$K_{\text{равн}} = \frac{a_D^{n_D} \times a_C^{n_C}}{a_A^{n_A} \times a_B^{n_B}} \quad (4.14)$$

Уравнение Дебая-Хюккеля

$$-\lg \gamma_i = \frac{z_i^2 \times A \sqrt{I}}{1 + r^0 \times B \sqrt{I}} \quad (4.15)$$

Уравнение материального баланса

$$I = \frac{1}{2}(c_1 z_1^2 + c_2 z_2^2 + \dots + c_n z_n^2) \quad (4.16)$$

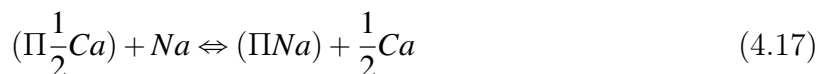


Рис. 4.10. Схема равновесных физико-химических гетерогенных реакций в почвах

Ионные равновесия при наличии твердой фазы (гетерогенный обмен)

П – почвенный поглощающий комплекс, где происходят процесс обмена, сорбции и дисорбции.

Если сначала почвенный поглощающий комплекс содержал кальций, то при вводе в эту среду натрия, натрий вытесняет кальций и формирует двойной диффузный слой.



Гапон предложил и для этой реакции вывести константу и вводить активность поглощенного натрия. Это позволило ему предложить параметр константа селективности, как характеристика твердой фазы.

$$K_{\text{селект}} = \frac{a_{\text{SNa}} \times \sqrt{C_{\text{Ca}}}}{a_{\text{SCa}} \times a_{\text{Na}}} \quad (4.18)$$

Получается, что если есть почвенный раствор, гетерогенная реакция может вызывать труднопредставляемые последствия. Этот ион может участвовать и формировать твердофазные соединения, которые выпадут в осадок и могут частично раствориться и снова войти в почвенный поглощающий комплекс (ППК).

Была предложена модель, в которую помещены константы селективности для различных почвенных минералов, расчеты константов активности по различным уравнениям. Это — модель моментального типа и в ней нет времени.

Модели переноса веществ в почвах

Конвективно-диффузионные процессы являются основными при переносе веществ в почвах.

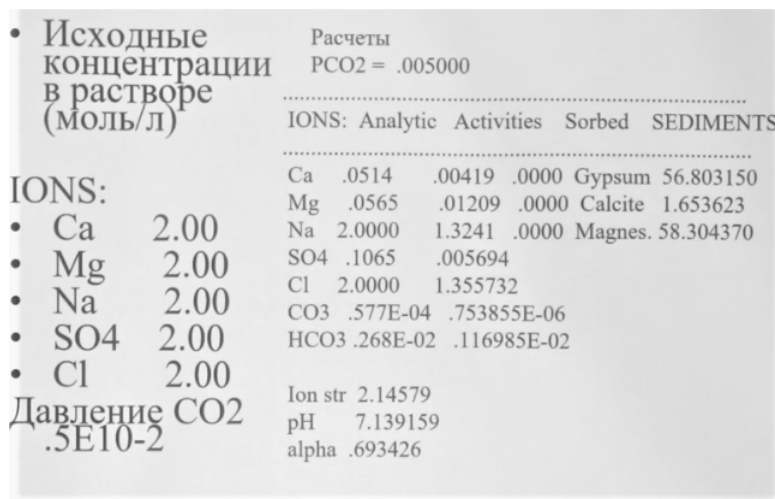


Рис. 4.11. Программа LIBRA

В колонку поместили вещество, и всё истекающее собирается в лабораторный стакан. Сначала ввели чистую воду и добавили некую концентрацию не сорбирующегося иона. На графике зависимости концентрации от времени мы видим, что сначала ничего не вытекает, а потом резко появляется на нижней границе колонки и начинает вытекать с той концентрацией, которой мы вводили c_0 .

Конвекция сопровождается и процессом диффузии.

Уравнение неразрывности для переноса ионов (веществ)

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial q_c}{\partial z} \quad (4.19)$$

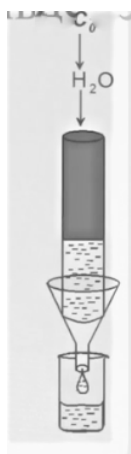


Рис. 4.12. Конвективный перенос

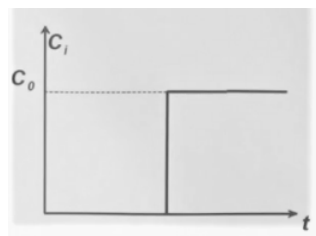


Рис. 4.13. Зависимость концентрации от времени

Изменение концентрации солей во времени пропорционально изменению потока солей в рассматриваемой толще колонки.

Уравнение конвективного переноса (уравнение неразрывности) связывает изменение концентрации растворимого вещества во времени со скоростью потока раствора в условном единичном капилляре, определяемой по уравнению Дарси, и изменение концентрации на границах рассматриваемого слоя.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = v \times \frac{\partial c}{\partial z} \quad (4.20)$$

$$v = \frac{q_w}{\epsilon} \quad (4.21)$$

q_w – макроскопическая скорость потока по Дарси.

Любое дисперсное тело имеет и гидродинамическую дисперсию.

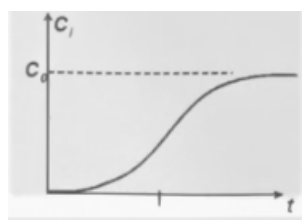


Рис. 4.14. Гидродинамическая дисперсия и диффузия Рис. 4.15. Зависимость концентрации от времени при диффузии

$$D^* = D_{эфф} + D_h \quad (4.22)$$

$$q_c = -D^* \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \quad (4.23)$$

Стрелками указаны движение ионов между стенками почвы. В центральной части пор они будут двигаться быстрее, чем около стенки. На втором примере можно увидеть передвижение ионов по почвенным порам между почвенными частицами.

Эффективная диффузия и гидродинамическая дисперсия формируют гидродинамическую диффузию в почвах $-D^*$.

D^* – коэффициент гидродинамической диффузии.

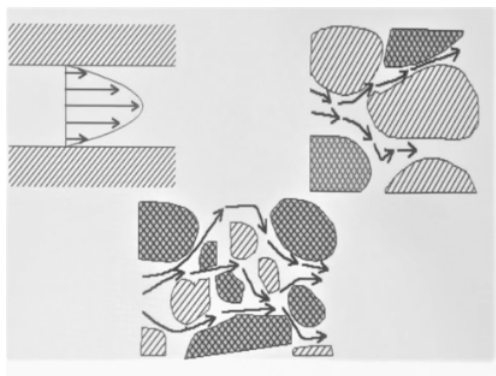


Рис. 4.16. Явление гидродинамической дисперсии

λ – шаг смещения

$$D^* = \lambda \times v \quad (4.24)$$

Физической основой гидродинамической дисперсии является структура порового пространства.

Движение в почве с учетом гидродинамической диффузии:

$$q_c = -D^* \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + v \times \frac{\partial c}{\partial z} \quad (4.25)$$

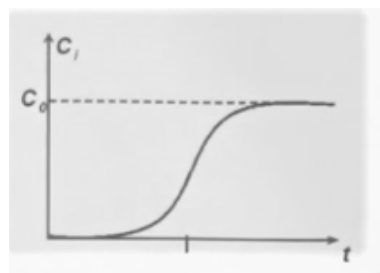
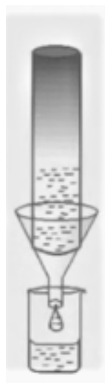


Рис. 4.17. Движение в почве с учетом гидродинамической диффузии

Рис. 4.18. Зависимость концентрации от времени при диффузии

По оси x отложены такты, которые показывают количество смен порового раствора. Один такт говорит о том, что один раз объем порового раствора сменился. Если движущийся ион не имел абсорбционных характеристик, то возникает резкий всплеск при одном такте раствора. А если движется катион, то мы можем увидеть

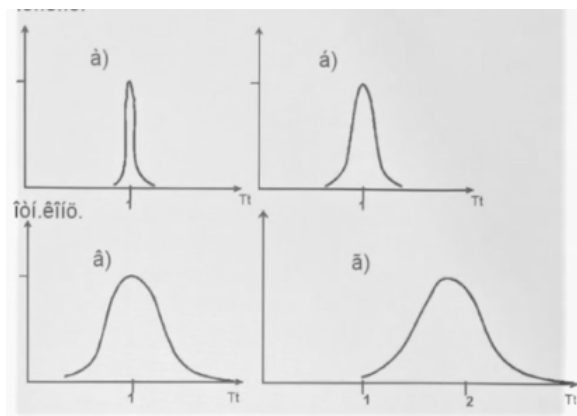


Рис. 4.19. Выходные кривые для различных веществ

два с лишним такта до его максимального выхода. Это говорит о том, что смешиваются процессы связанные с сорбцией этого катиона.

Анионы выходят раньше, чем полностью сменится раствор в поровом пространстве. Потому что анион будет двигаться быстро, отталкивая себя от отрицательно заряженной поры и стенки, формируя около стенки нерастворяющийся объем (θ^*).

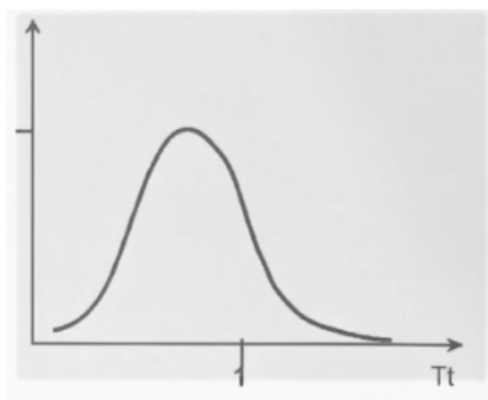


Рис. 4.20. Выходная кривая для анионов

Это конвективно - диффузионное уравнение, но без учета процессов, которые могут приводить к появлению дополнительных количеств мигранта (растворяется осадок). Или, напротив, мигрант может исчезать из движения (растения потребляют). И для этого мы должны ввести в уравнение I процессы появления и исчезновения мигранта.

$$(\theta - \theta^*) \frac{\partial c}{\partial t} = -D^* \times \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + v \times \frac{\partial c}{\partial z} \pm I \quad (4.26)$$

Это конечная форма конвективно - диффузионного уравнения, описывающего перенос заряженных веществ (ионов, пестицидов) в почве.

Лекция 5. Математическое описание члена конвективного-диффузионного уравнения

«ИСТОЧНИК-СТОК»

Модель LIBRA

Основана на том, что почвенный раствор находится в прямой/обратной связи с почвенным поглощающим комплексом (ППК). Ионы, находящиеся в растворе, находятся в равновесии с диффузным слоем ионов в ППК. Также ионы находятся в равновесии с твердофазными соединениями (гипс, кальцит и магнезит). Поступающие ионы от твердофазных соединений участвуют в ППК.

Выходные кривые

Такт (относительное время, безразмерное), T — количество смен порового раствора при фильтрации в рассматриваемой колонке почвы.

Выходная кривая — изменение относительной концентрации вещества-метки на нижней границе фильтрующей колонки в зависимости от тактов при резкой подачи вещества-метки на верхнюю границу фильтрующей колонки.

$$\frac{\Delta C_i}{\Delta c_0} \quad (5.1)$$

В физической основе гидродинамической дисперсии лежит явление, связанное с неравномерностью порового пространства почвы. Выходная кривая имеет постепенное увеличение концентрации при медленном движении ионов из-за различия порового пространства. Гидродинамическая дисперсия — это характеристика порового пространства почвы, его извилистости, непрерывности и линейности. Чем больше линейности, тем меньше получится коэффициент гидродинамической дисперсии. Эта схема позволяет нам представить, как происходит движение ионов, и в чем физический смысл параметров, описывающих гидродинамическую диффузию.

Конвективно - диффузионное уравнение

$$(\theta - \theta^*) \frac{\partial c}{\partial t} = -D^* \times \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + v \times \frac{\partial c}{\partial z} \pm I \quad (5.2)$$

θ находится в левой стороне этого уравнения, потому что все вещества движутся в поровом пространстве, заполненного водой.

«Источник-сток» в конвективно-диффузионном уравнении обозначается, как $\pm I$. Источником- стоком могут быть:

- 1) Ионный обмен – связано с диффузионным слоем почвенного поглощающего комплекса.
 - Гомогенный
 - Гетерогенный
- 2) Сорбция – связано с появлением или исчезновением мигранта.
 - Мгновенная
 - Динамическая
 - Отрицательная – связано с θ^* , с нерастворяющим объемом, когда анионы отталкиваются от твердофазной стенки порового пространства и вынуждены двигаться в более узкой поре.
- 3) Разложение (органических веществ, пестицидов)
 - Биологическое
 - Распад

Сорбция

Основные параметры переноса солей, используемые при математических расчетах миграции веществ в почвах

θ^* – влажность нерастворяющего объема (при движении анионов). Величина, имеющая важное значение при прогнозировании миграции многих веществ.

D^* – гидродинамическая диффузия и ее основная составляющая «шаг смешения» α , см.

$K_{\text{сорбции}}$ – константа сорбции (при движении сорбирующихся веществ).

Мгновенная сорбция

Вводится коэффициент сорбции (коэффициент распределения) – K_d .

$$K_d = \frac{C_s}{C_{p-pe}} \quad (5.3)$$

C_s – концентрация вещества в поглощенном состоянии

C_{p-pe} – концентрация вещества в растворе

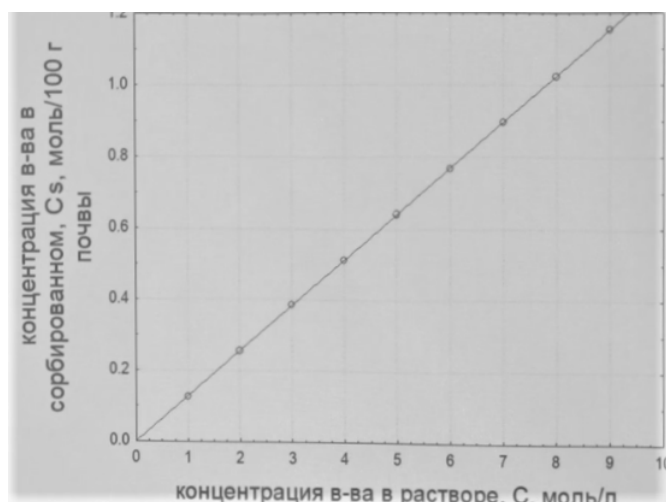


Рис. 5.1. Сорбция равновесная, мгновенная

Определяют константу, задавая различные концентрации иона, исследуемого в растворе, и исследуя количество иона, находящегося в поглощенном состоянии. Угол наклона этой кривой будет характеризовать процессы мгновенной сорбции.

Кинетическая сорбция/десорбция

Вводится зависимость от времени, и сорбция перестает быть мгновенной, а становится динамической или кинетической. Есть несколько видов такой сорбции, описываемых различными уравнениями, которые носят название кинетики определенного порядка.

Кинетика нулевого порядка

Концентрация (C_0) изменяется во времени линейно. При этом кинетика нулевого порядка имеет характеристику, которая связана с полуконцентрацией ($\frac{1}{2}C_0$) от начальной. Это — период полураспада. Для метрибузина $DT50$ составляет около 30 суток.

Кинетика первого порядка

Точка внесения (C_0) равна 1. Дальше во времени можно увидеть падение. Здесь тоже применяется кинетика основанная на полураспаде. Первая половина от внесенной концентрации 0.5 от которой находится соответствующее время полураспада ($T_{\frac{1}{2}}$). Затем от концентрации 0.5 находим концентрацию полураспада.

Кинетика описывается экспоненциальным уравнением.

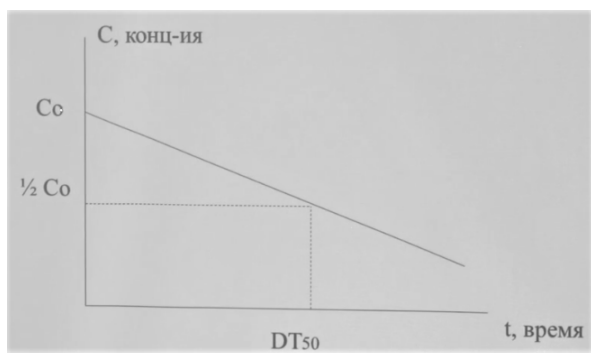


Рис. 5.2. Кинетика нулевого порядка

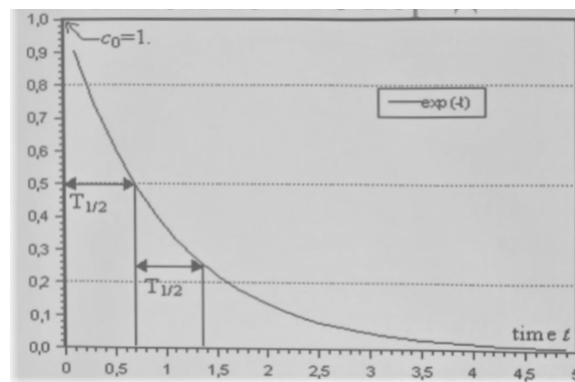


Рис. 5.3. Кинетическая сорбция (разложение) веществ по кинетике первого порядка

- Кинетика нулевого порядка

$$C_i = C_0 - k_0 t \quad (5.4)$$

- Кинетика первого порядка

$$C_i = C_0 \times \exp(-k_1 t) \quad (5.5)$$

- Кинетика второго порядка

$$C_i = \frac{C_0}{1 + k_2 \times C_0 \times t} \quad (5.6)$$

K_0 – константа кинетики нулевого порядка

K_1 – константа кинетики первого порядка, параметр убывающей экспоненциальной функции

K_2 – константа кинетики второго порядка, параметр логистической функции. Отличается тем, что имеется стартовый момент, когда концентрация изменяется мало, а потом довольно интенсивно. Это уравнение описывает более сложную динамику разложения.

В почвоведении в разложении пестицидов используются уравнения кинетики нулевого или первого порядка.

Аналогично сорбции/десорбции описывают и процессы разложения, распада, роста (микроорганизмов).

Если ион не распадается и движется в неизменном виде, то применяются параметры (гидродинамическая диффузия, влажность нерастворяющего объема и константа сорбции). А если в процессе движения вещество разлагается, то используются константы равновесия динамической или кинетической сорбции/десорбции (k_0, k_1, k_2).

Движение растворов по межагрегатному пространству почвы.

Особенности расслоения и необходимость тактовых промывок

Если вносим какое-то вещество, или токсикант попадает на поверхность почвы, то этот токсикант неожиданно против всех законов физических и химических переносов оказывается на большой глубине или в грунтовых водах. Токсикант может передвигаться с грунтовыми водами, попадать в водоисточники и оказать влияние на здоровье.

В прошлом веке в 70-х годах в Германии начали применять пестицид атразин, легко подвижный, который оказался в колодцах. Были отмечены смертные случаи из - за пестицида, который широко применялся на полях. Когда провели расчеты, учитывая миграционные способности, сорбцию/десорбцию, нашли, что атразин не должен был попадать в грунтовые воды, что означает он не двигался по конвективно-диффузионному переносу. Это означает, что есть еще один процесс, который помогает передвижению веществ моментально, быстро и активно. Это — движение растворов по межагрегатному пространству почвы.



Рис. 5.4. Межагрегатное движение растворов

Если мы имеем агрегаты (агрегаты в пахотном слое, педы, сформированные почвенные отдельности) и если рассматривать поток влаги, то в межагрегатном пространстве эти потоки выражены активно. Отличается не только быстротой, но и другим качеством. Практически процессы сорбции или разложения движущегося вещества не выражены. Потоки настолько быстры, что процессы абсорбции или разложения тех самых кинетических процессов не происходят. В самих педах могут тоже содержаться вещества, которые могут быть в сорбированном виде или в несорбированном. И за счет диффузии эти вещества могут поступить в поток влаги. В процессе движения раствора физически две стадии:

- 1) Быстрый перенос по межагрегатному трещинному пространству.
- 2) Более медленная вторая стадия диффузии, когда из агрегатов или педов это вещество снова будет наполнять межагрегатное пространство и, в последствии, при поступлении осадков поливных вод начинать двигаться.

При промывках это явление широко выражено. Особенно важно при хлоридно-сульфатном и сульфатном засолении. Эти соли плохо растворимы и в виде отдельных частиц находятся внутри педов, и промыть такие почвы чрезвычайно сложно. Если дать промывную воду, то она проскочит по межагрегатному пространству, а соли останутся внутри этих почвенных педов. Приходится предпринимать специальные промывки, тактовые промывки. Сначала подают воду, часть воды дренируется и отбирается с теми солями, которые поступают в межагрегатные потоки. Наступает время выхода солей из агрегатного порового пространства, и применяют второй такт. Снова добавляют воду, и соли, которые вышли из педов, вымываются за пределы порового пространства. Эти тактовые промывки приходится делать несколько раз из-за сложно растворимых солей.

Перенос веществ с преимущественными потоками растворов в почве

- Определение преимущественных потоков («preferential flows»).
- Модели конвективно - диффузионного переноса (КДП) или «хроматографические» и модели «двойной пористости».
- Модели MACRO, MACRODB, Pearl

Полевой фильтрационный эксперимент

Опыт проведен на серых лесных почвах. На поверхность почвы ставилась рама, а на некоторой глубине (50 см) были установлены лизиметры (стаканчики для учета почвенного стока) или ячейки, куда должна была собираться лизиметрическая вода. Для того, чтобы отличить эту воду от других была внесена метка в виде иона калий хлор (KCl) и крахмала (использовался растворимый декстрин), который показывал окраску движущихся путей. Когда был проведен полив, поровый раствор проник через толщу, и оказалось, что в лизиметрах мы можем увидеть и объемы движущейся воды, и концентрацию калия и иона хлора в этих объемах.

На Рис 5.6 в некоторых стаканчиках воды очень много, а в других мало. В лизиметрических стаканчиках, где много воды (890 мл, 600 мл, 500 мл) были преимущественные потоки, которые стремительно по трещинам проникли 50 см и поступили в стаканчики на этой глубине. Концентрация иона калия, который очень активно сорбируется с почвой, на этой глубине была почти равна исходной.

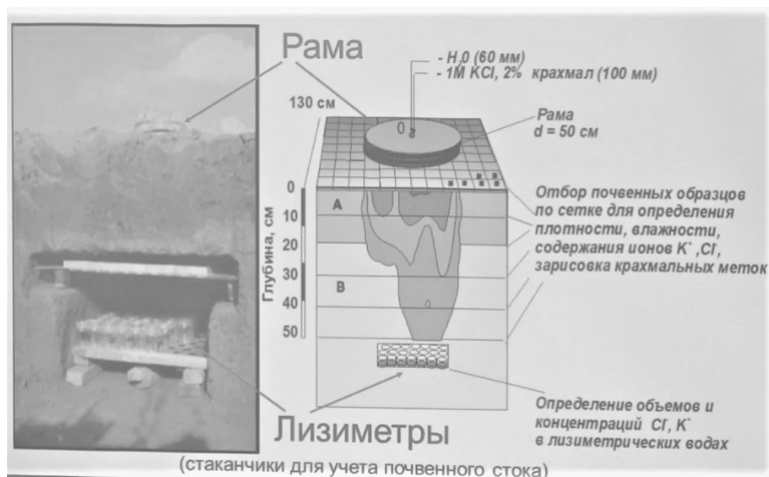


Рис. 5.5. Полевой фильтрационный эксперимент по Умаровой А.Б, 2002

$$\frac{C}{C_0} \approx 0.96$$

И в других ячейках концентрация иона калия была с весьма значительной концентрацией 0.69 и 0.54, по сравнению, если бы мы посчитали ион калия с учетом его сорбционных свойств, мы бы получили весьма маленькие концентрации на глубине 50 см.

Мы имеем явление преимущественных потоков тогда, когда вещество быстро движется с токами раствора по межагрегатному трещинному пространству почвы, практически не сорбируясь с твердой фазой почвы, не исчезая из раствора, а поступая на определенные глубины практически в своем исходном виде. А если это будут вещества токсиканты, они будут там сохраняться, и если на глубине будут грунтовые воды, то эти вещества токсиканты попадут в грунтовые воды и начнут быструю миграцию



Рис. 5.6. Пространственное распределение преимущественных путей миграции веществ в почвенном профиле

по ландшафту, попадая в водоисточники, колодцы и реки. Приблизительно 5% порового пространства почв (макропоры, трещины, межагрегатные поры) проводят до 90% раствора.

Основные уравнения переноса веществ по макропорам

- C_1, θ_1 – концентрация вещества и влажность проточной зоны
- C_2, θ_2 – концентрация вещества и влажность застойной зоны

Выписываем уравнение диффузии, показывающее взаимосвязь влажности в проточной и застойной зоне и взаимосвязь между концентрацией иона в застойной зоне с перепадом концентраций между внутри агрегатном поровом растворе и предевигающимся в проточном поровом пространстве.

$$\theta_2 \frac{\partial c_2}{\partial t} = \alpha [c_1 - c_2] \quad (5.7)$$

Расписывается конвективно-диффузионное уравнение для этих двух зон. Конвективно-диффузионное уравнение переноса по влажности в проточной зоне и второе слагаемое, которое определяет движение ионов прежде всего в диффузионном механизме.

$$\theta_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} + \theta_2 \frac{\partial c_2}{\partial t} = -D^* \frac{\partial^2 c_1}{\partial z^2} + v \frac{\partial c_1}{\partial z} \quad (5.8)$$

Общая влажность составляет сумму влажностей в проточном поровом пространстве и в застойном поровом пространстве.

$$\theta = \theta_1 + \theta_2 \quad (5.9)$$

Рассматривают две зоны в почвах, поровое пространство разделяют на проточное и застойное пространство, что позволяет в дальнейшем учитывать быстрый перенос и более медленный диффузионный перенос.

В каждом случае в зависимости от вида вещества и особенности структуры порового пространства, движение веществ определяется различным напором параметров моделей.

С усложнением явления переноса, усложняются модели и экспериментальное обеспечение этих моделей, и приходится добавлять новые параметры, ответственные за рассматриваемый механизм переноса.

Вид движущего в почве вещества	Параметры переноса, отражающие процессы				
	Диффузия и конвекция	Отрицательная сорбция	Равномерная моментальная сорбция	Константы динамики распада (разложения)	Наличие застойных и проточных зон в поровом пространстве
Несорбирующееся, нераспадающееся нейтральное вещество	D^* - Гидродинам. диффузия или λ - шаг смешения	-	-	-	-
Анион	D^*	θ^* - нерастворяющий Объем			
Катион	D^*	-	K_d - коэффициент распределения		
Распадающееся во времени (по кинетике нулевого порядка) вещество	D^*	В зависимости от свойств вещества	В зависимости от свойств вещества	T_{50} - период полураспада	
Распадающееся во времени (по кинетике нулевого порядка) вещество при движении в структурированной почве	D^*	В зависимости от свойств вещества	В зависимости от свойств вещества	T_{50} - период полураспада	α - коэффициент обмена между зонами порового пространства .

Рис. 5.7. Движение веществ и параметры моделей

Модели переноса пестицидов (на примере MACRO_{DB})

Модели MACRO появились сначала в Швеции. *DB* означает database. Семейство MACRO имеет:

- Условия на верхней границе: метеоусловия месяца и «симулятор» погоды с точными географическими координатами
- Экспериментальное обеспечение:
 - 1) Почвенное: на основе традиционной информации и База Данных. Учитывает застойные и проводящие зоны порового пространства
 - 2) Описание свойств пестицида: растворимость, DT_{50} , $K_{сорб}$.
- Условия на нижней границе

В современных моделях условия на верхней границе задаются по географическим координатам. Если мы укажем географические координаты, то в этой точке есть средняя кривая, определяющая влажность или температуру. Рисуем график зависимости температуры или осадков от времени. Многолетние наблюдения позволяют рисовать такие кривые (средние) с определенной обеспеченностью. Добавляем

экспериментальные данные. Сначала данные идут по сценарию среднесуточной. Но есть и экспериментальные данные, которые не совпадают со средней кривой и показывают уменьшение величины. Поэтому средняя кривая подстраивается под экспериментальные данные. Дальше снова может быть несовпадение с кривой, и величина экспериментальных данных может увеличиться. Так происходит настройка модели на ближайшее время для того, чтобы давать рекомендации фермерам по внесению пестицидов, по обработке почвы или когда заезжать на поле, и управлять операциями на агроландшафтах.

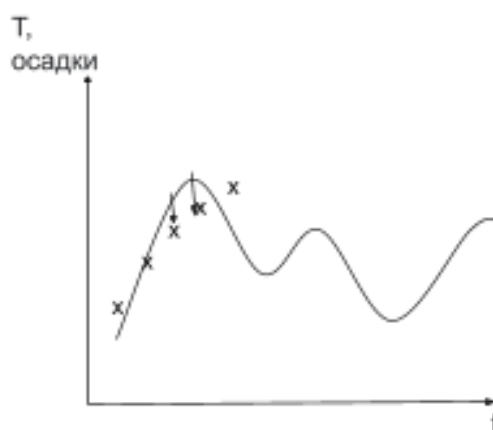


Рис. 5.8. График зависимости температуры или осадков от времени

Симулятор погоды позволяет предсказывать те или иные метеоусловия на ближайшее время на основании средней многолетней кривой, которая подстраивается под метеоусловия, которые наблюдаются в этом году.

Эти модели позволяют нам рассчитывать риск того или иного мероприятия.

- «Риск — это вероятность возникновения какого-либо события с предсказуемыми последствиями за определенный промежуток времени» (Г.Г.Онищенко, С.М.Новиков, Ю.Ф.Рахманин и др.,2002)
- «Риск — сочетание вероятности нанесения ущерба и тяжести этого ущерба» (ГОСТ Р ИСО/МЭК 51-2002. Аспекты безопасности)
- $\text{РИСК} = (\text{опасность}) \times (\text{доза}) \times (\text{время})$

Риск — это вероятность, что значит прогноз. В основе этого прогноза лежит моделирование. Риск невозможно представить или рассчитать, если не знать результаты

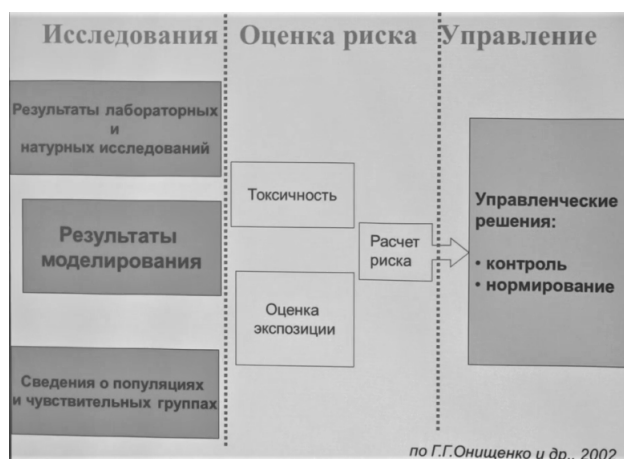


Рис. 5.9. Моделирование с расчетом риска

моделирования. В основе этого моделирования лежит зависимость дозы или концентрации от эффекта производимого этими веществами, которые отложены по оси x . Итог расчета рисков называется кривая «доза - эффект».

- ОБУВ – Ориентировочный Безопасный Уровень Воздействия, действует 3 года
- BD – benchmark dose (реперные или опорные дозы). Зона неясных (стертых) эффектов.
- ED –эффективная доза. Зона заметных функциональных и биохимических изменений.

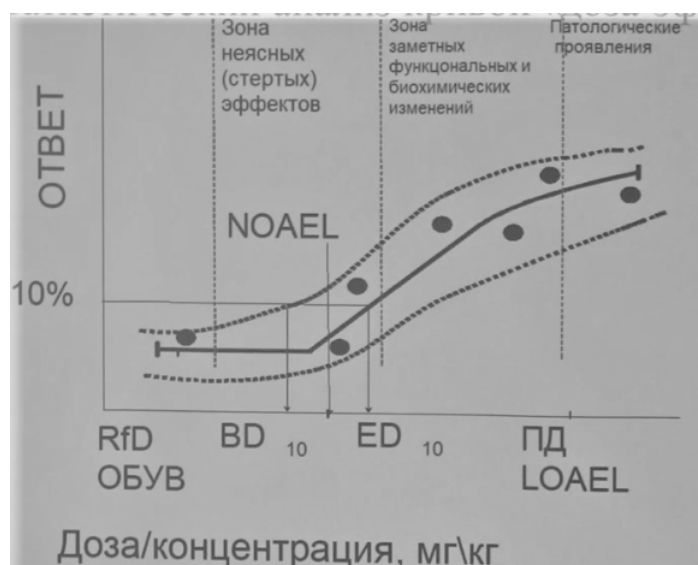


Рис. 5.10. Статистический анализ кривой «доза - эффект»

Лекция 6. Работа с физически обоснованными моделями

Расчет риска основан на кривой «доза - эффект». По оси абсцисс отложены концентрации того вещества, которого необходимо исследовать. На оси у находится ответ, который изучают по количеству смертных случаев животных, микроорганизмов или зоофауны. Это конкретный процент неблагоприятных случаев. На этой кривой можно выделить ориентировочный безопасный уровень, где не изменяются проценты неблагоприятных случаев. Дальше стертые эффекты (BD) и эффективная доза, когда при превышении этой величины (ED) начинают появляться заметные функциональные биохимические изменения.

В этом механизме принимают участие прогнозные математические модели. Без них обсуждать возможные потери здоровья, расчеты риска и возмещения потери здоровья бессмысленно.

Применение пестицидов в связи с метеоусловиями, ростом культурных растений и сорняков – пример с агротехнологиями

Предположим у нас есть характеристика метеоусловий и рост растений за какой-то период времени (ось x). На оси x находится весенний период для того, чтобы оценивать мероприятия, которые возникают на сельскохозяйственных полях. Также знаем когда прогнозируются осадки (в виде столбиков), что также характеризует влажность почвы. Рассматриваем динамику влажности, прогнозируя ее на основании знания законов передвижения влаги в почве, на основании физически обоснованных моделей. Также на графике можно увидеть культурные растения, которых надо обезопасить от влияния сорняков, которые появляются раньше и более активно растут, чем культурные растения. Для этого мы рассчитываем внесение некоторых пестицидов убивающих сорняки. Если внести пестициды весной тогда, когда выпадают осадки в наибольшей степени, и только начинают зарождаться сорняки, то производя расчеты оказывается, что пестициды попадают в грунтовые воды. Тогда делаем второй случай внесения до появления сорняков, чтобы в почве были пестициды, но не попали в грунтовые воды. К появлению сорняков пестициды начинают разлагаться и не действуют на сорняки. Следующее внесение пестицидов происходит после первых осадков тогда, когда влажность почвы начинает уменьшаться, и движение воды в почве снижается. В этом случае пестициды подействуют плохо и будут попадать в культурные растения, и, в последствии, их остатки могут попадать в наш организм вместе с культурными растениями. Ни один из вариантов не подходит для того, чтобы внести пестициды. Вывод: Для оптимизации применения агротехнологий — надо считать с учетом движения токсикантов по макропорам.

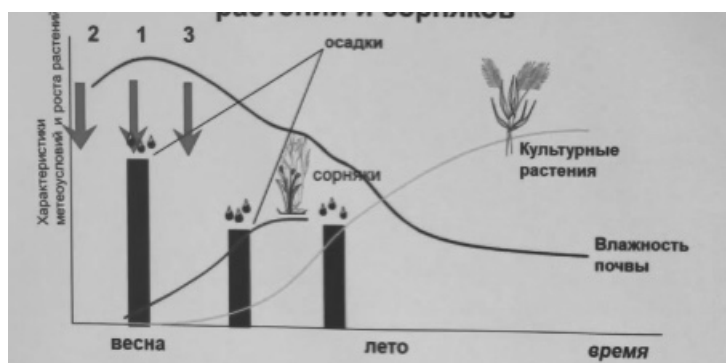


Рис. 6.1. Применение пестицидов в связи с метеоусловиями, ростом культурных растений и сорняков

- 1 - попадает в грунтовые воды
- 2 - не подействует и разложится до появления сорняков
- 3 - плохо подействует и попадает в растения

Модель водо- и солеобмена почв в *HYDRUS*

HYDRUS используется для расчета условия водообеспеченности, условия оптимизации расхода воды в засушливых районах и для других гидрологических задач водообмена. Эта модель имеет следующую структуру. Имеет препроцессор и постпроцессор. Препроцессор состоит из нескольких таблиц, в которые надо ввести экспериментальные данные об объектах, которые мы хотим считать.

- Пространственные данные (сколько слоев, какова расчетная глубина)
- Временные характеристики
- Задание выдач (в какое время надо получить выдачи, характеризующие передвижение веществ в профиле почвы)
- Почвенные данные
- ОГХ
- Коэффициент фильтрации
- Метеоданные, которые могут вводиться в виде прогнозных метеоданных

Принцип и устройство этой модели

На Рис. 6.2 можно увидеть препроцессор, который состоит из основных процессов. В этом случае заказывается движение воды. *HYDRUS* считает не только движение

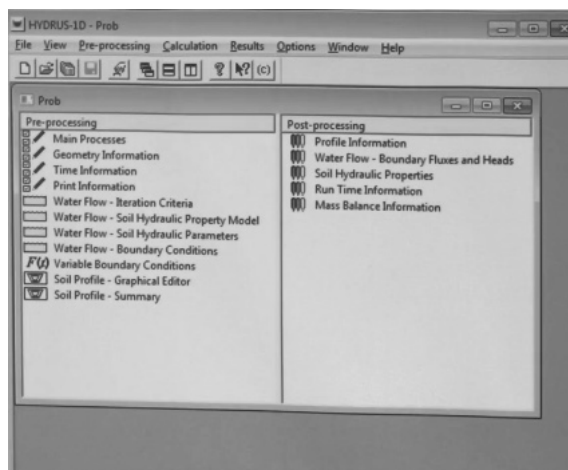


Рис. 6.2. *HYDRUS*

воды, но и движение солей, воздуха, прогревание почвы и теплоперенос. Включает геометрическую информацию, временную информацию тогда, когда требуется время для того, чтобы просматривать те позиции выдачи или профили к определенному промежутку времени. Информация, которую вы заказываете на выдачу фиксируется в *Printinformation*. Все процессы движения воды, ее распределение, распределение солей близки к экспоненциальному закону, и поэтому время выдачи лучше распределять с логарифмическим законом.

Что будем считать?

Опыт по фильтрации: На поверхность почвы (верхняя граница), ставили раму и заливали её водой. Происходило впитывание фильтрация. Потом закрывали плёнкой (нулевое испарение), ждали 2-3 дня для стекания гравитационной влаги и определяли влажность «наименьшую влагоёмкость» (НВ). Мы воспроизведем этот опыт и проверим, когда мы достигали НВ (два, три, пять и 10 дней после начала эксперимента). Какой величине давления соответствует наименьшая влагоёмкость. В мировой практике величина давления влаги при наименьшей влагоёмкости приблизительно равна 330 см водного столба.

$$P_{НВ} \approx 330\text{см водного столба} \quad (6.1)$$

Получится ли такое давление влаги на пятый, десятый день после начала эксперимента, после полива. Это важно для того, чтобы прогнозировать определенные ориентиры в виде гидрологических констант, которые выражены в виде давления влаги. Коэффициент давления влажности при завядании приблизительно равен 15000 см водного столба.

$$P_{ВЗ} \approx 15000\text{см водного столба} \quad (6.2)$$

Не получится достигнуть этой величины, потому что почва закрыта пленкой, и нет испарения воды с поверхности почвы.

Основные расчетные процессы модели *HYDRUS*

Сначала надо выбрать процесс, и выбираем движение воды. Нажимаем на кнопку *OK* и *Next*.

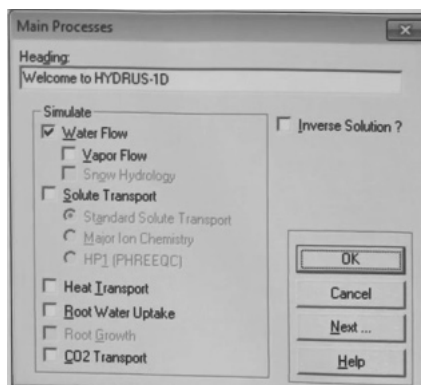


Рис. 6.3. Основные процессы

Дальше выходит таблица, связанная с геометрической информацией, которая касается заданной почвы (количество почвенного материала, количество слоев для расчета баланса). В *Decline from vertical axes* ставится 1, потому что косинус угла вертикальной оси (склона) равен единице.

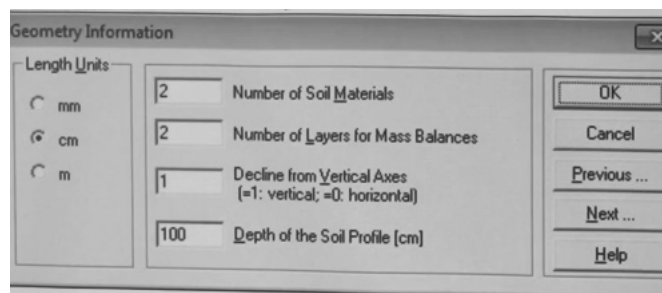


Рис. 6.4. Геометрическая информация

Следующая таблица показывает заказ выдачи, где задаются дни для просмотра выдачи. Сначала надо поставить выдачу на экран (*Screenout put*) и количество времен выдачи, например, пять времен выдачи. Дальше выбираем *Select printtimes* и указываем конкретное время для того, чтобы увидеть, что происходит в почве в это время.

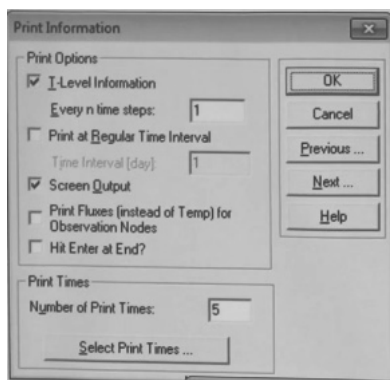


Рис. 6.5. Заказ выдачи

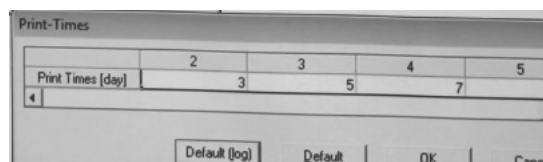


Рис. 6.6. Выбор времени

Дальше можно выбрать временные характеристики, которые будут использоваться при расчетах. Сначала выбираем размерность – дни (*Days*). Соответственно, минимальный и начальный шаг по времени. Здесь указаны средние значения минимального и максимального шага по времени. Это тот переменный шаг, который модель соблюдает. При интенсивных процессах модель соблюдает минимальный шаг. А при медленных, равномерных процессах она берет максимальный шаг до пяти дней расчета.

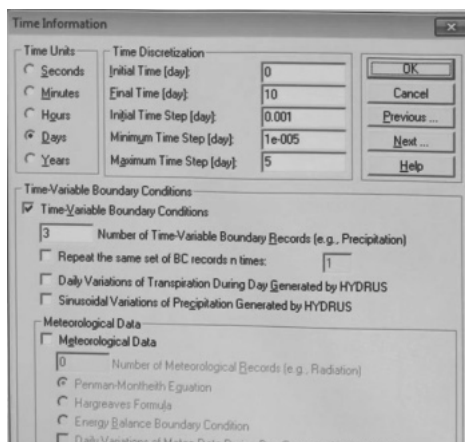


Рис. 6.7. Временные характеристики

Формирование препроцессора

Препроцессор формируется в условиях расчета. Здесь спросят какую модель использовать для расчета гидрологического параметра. Это будет модель Муалема - Ван Генухтена. Но если выбрать эту модель, то *HYDRUS* потребует введение почвенных параметров θ_s , θ_r , α , n и коэффициент фильтрации K_s (численные значения для каждого почвенного слоя). Только с помощью педотрансферной функций (*ClayLoam*)

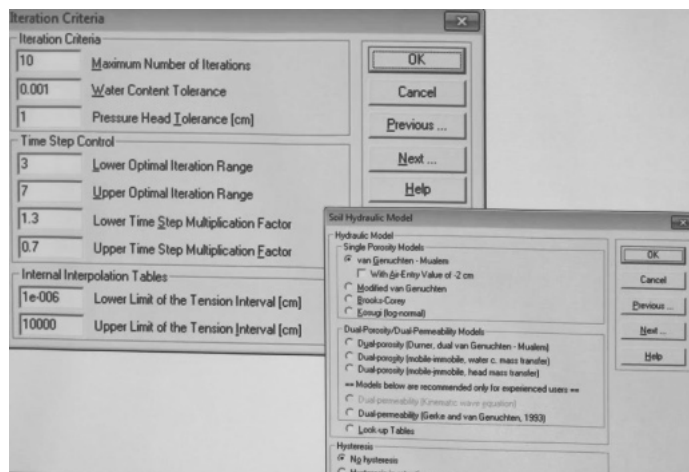


Рис. 6.8. Условия сеточной схемы

возможно получить параметры гидрологической θ_s , θ_r , α , n и коэффициент фильтрации K_s .

The 'Water Flow Parameters' dialog box contains a table with the following data:

Mat	Qr [-]	Qs [-]	Alpha [1/cm]	n [-]	Ks [cm/day]	I [-]
1	0.095	0.41	0.019	1.31	6.24	0.5
2	0.1	0.39	0.059	1.48	31.44	0.5

Below the table, there is a 'Soil Catalog' dropdown menu set to 'Clay Loam', a 'Neural Network Prediction' checkbox, and a 'Temperature Dependence' checkbox. Buttons for 'OK', 'Cancel', 'Previous ...', 'Next ...', and 'Help' are at the bottom.

Рис. 6.9. Параметры ван Генухтена и педотрансферные функции

Международная классификация гранулометрии по названиям почв имеет три фракции (треугольник Ферре). Первая фракция — это глина (*clay*) или частицы меньше 0.002 мм. Дальше идет фракция пыли и фракция песка. В Российской классификации фракций восемь, а отличается фракция ила.

Переходим в таблицу где указываются метеоусловия. На Рис. 6.11 можно увидеть, что осадки в первые два дня равны нулю. От двух до двух с половиной суток заливааете 10 см. И затем оставшееся время до 10 суток снова испарение с поверхности равно нулю. $hCritA$ — это критическое давление, которое может быть в расчетах, и характеризует влагоперенос в жидкой форме.

Можно использовать графический редактор где можно двигать границу между материалами. Также можно задать начальные условия (равномерный профиль дав-

Название почвы по международной классификации (перевод)	Содержание гранулометрических фракций, %			Соответствующее [возможное] название почвы по российской классификации
	clay (глина/ил) <0.002 мм	silt (пыль) 0.002–0.05 мм	sand (песок) >0.05 мм	
Sandy loam (опесчаный суглинок)	15–20	0–15	70–85	Средний [легкий] суглинок (крупнопылеватый)
Loam (суглинок)	5–27	28–50	45–80	Средний [легкий] суглинок (пылеватый)
Clay loam (илватый суглинок)	27–40	60–70	20–45	Средний суглинок (иловато-пылеватый)
Silty clay loam (пылеватый илгневный суглинок)	28–40	60–73	0–20	Тяжелый суглинок (илватый)
Sandy clay (опесчаная глина)	36–55	0–20	45–65	Легкая глина (иловато-крупнопылеватая)
Silty clay (пылеватая глина)	40–60	40–60	0–20	Средняя [легкая] глина (иловато-пылеватая)
Clay (глина)	40–100	0–60	0–45	Средняя [тяжелая] глина
Silty loam (пылеватый суглинок)	0–30	73–88	20–45	Средняя глина (илватая)
Silt (пыль)	0–12	88–100	0–20	Средняя глина (пылеватая)
Sandy clay loam (опесчаный илгневный суглинок)	20–36	0–28	45–80	Тяжелый суглинок (крупнопылево-мелкопесчаный)

Рис. 6.10. Соответствие названий почв по гранулометрии в международной классификации примерному названию в российской

Time [days]	Precip. [cm/days]	Evap. [cm/days]	hCritA [cm]
1	2	0	100000
2	2.5	10	100000
3	10	0	100000

Рис. 6.11. Метеоусловия (условия на верхней границе)

ления влаги). Начальные условия — это распределение давления влаги или влажности в нулевой момент времени.

Постпроцессор

Здесь будут указываться:

- Профильная информация
- Потоки на границах

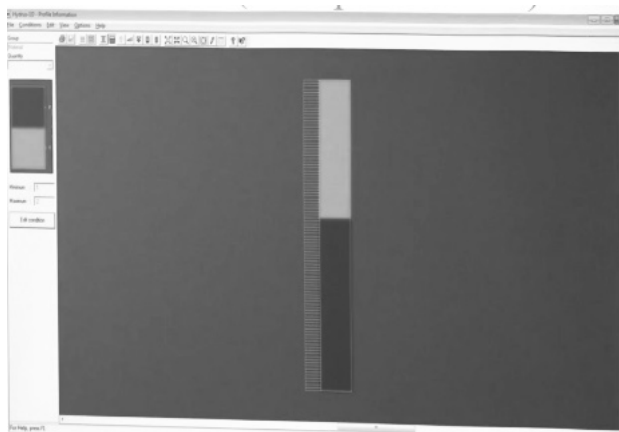


Рис. 6.12. Графический редактор

- Гидравлические свойства почвы
- Информация о времени работы
- Информация о балансе массы

Сравнение моделей. Критерий Сайерта

Качественные критерии, Критерии соответствия (принцип Сайерта). Использование математических моделей при: управлении, проектировании, количественном прогнозе, расчете экологического риска, планировании эксперимента.

Рисуем график зависимости переменной Y от времени (t). Добавляем величины экспериментальных данных и подбираем модели. Задача состоит в том, чтобы подобрать лучшую модель, которая более адекватно описывает экспериментальные данные, которые изображены на графике.

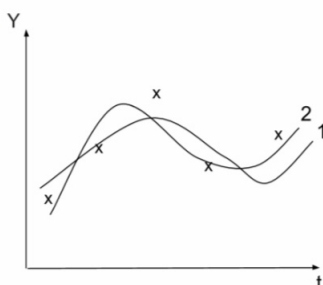


Рис. 6.13. Сравнение моделей

Необходимо два условия для того, чтобы выбрать модель, которая качественно хорошо описывает экспериментальные данные.

- 1) Близость средних по экспериментальным данным.
- 2) Одновременность экстремумов. Близость экстремумов экспериментальных данных и расчетных данных указывают на качественную адекватность моделей.

Проверка моделей на систематические ошибки

Просчитать регрессию погрешностей на реальную величину.

$$\Delta = a + bY_{\text{реальное}} \quad (6.3)$$

a и b – коэффициенты линейной регрессии.

Если a достоверно отличается от нуля, то присутствует систематическая ошибка.

Если

$$b \neq 0$$

то есть зависимость погрешности от измеряемой величины. При увеличении или уменьшении $Y_{\text{реальное}}$ модель дает существенные ошибки, которые статистически доказывают, что присутствуют погрешности, которые изменяются при изменении регистрируемой величины.

Модель поглощения питательных элементов растениями

Корень потребляет питательные вещества (макроэлементы, активные участники биологического обмена растений). Ион калия содержится в состоянии поглощенных катионов. Корень выделяет ион водорода, и происходит ионный обмен. Калий поступает внутрь растения, начинает свое движение по корню и поступает в стебель, лист. Основное сопротивление передвижения питательных веществ наблюдается на эндодермическом участке. Можно описать процессы математически и составить модель питания растения для того, чтобы проанализировать от чего будет зависеть питание растения, какие факторы наиболее существенны для того, чтобы растение хорошо питалось.

Основные параметры модели разделяются на две группы.

- 1) Растительные
 - r_0 – диаметр корня



Рис. 6.14. Схема передвижения веществ к корню растения

- C_{min} – минимальная концентрация раствора, при которой возможно поглощение
- I_{max} – максимально возможное потребление
- K_m – константа Михаэлиса, по которой потребляются корни. Характеризует крутизну кривой.

2) Почвенные

- C – концентрация вещества в растворе
- D^* – гидродинамическая диффузия
- K_d – коэффициент распределения
- V – поток влаги к корню

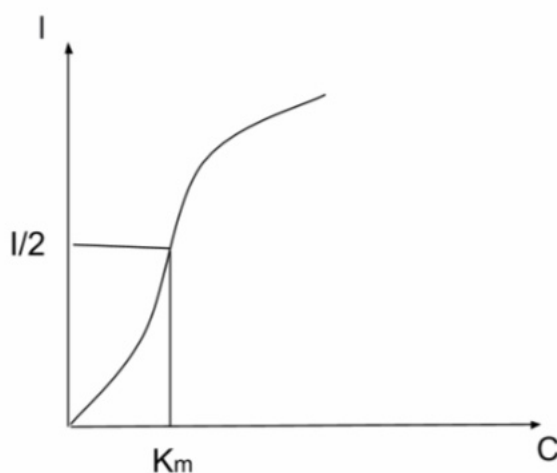


Рис. 6.15. Получение константа Михаэлиса

Основные уравнения модели

Движение вещества к корню будет радиальной характеристики. Это уравнение было составлено Крамером, и эта модель дала возможность просчитать чувствительность модели потребления растений от различных факторов.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{1}{r} \times \frac{\partial}{\partial r} \left(rD^* \frac{\partial C}{\partial r} - r_0 v C \right) - J_r \quad (6.4)$$

$$C = K_d \times C_s \quad (6.5)$$

$$J_r = \frac{I_{max} \times C}{K_m + C} - C_{min} \quad (6.6)$$

Определение чувствительности модели

Чувствительность модели — это скорость изменения искомой переменной состояния в зависимости от относительного изменения начальных, граничных условий и параметров экспериментального обеспечения.

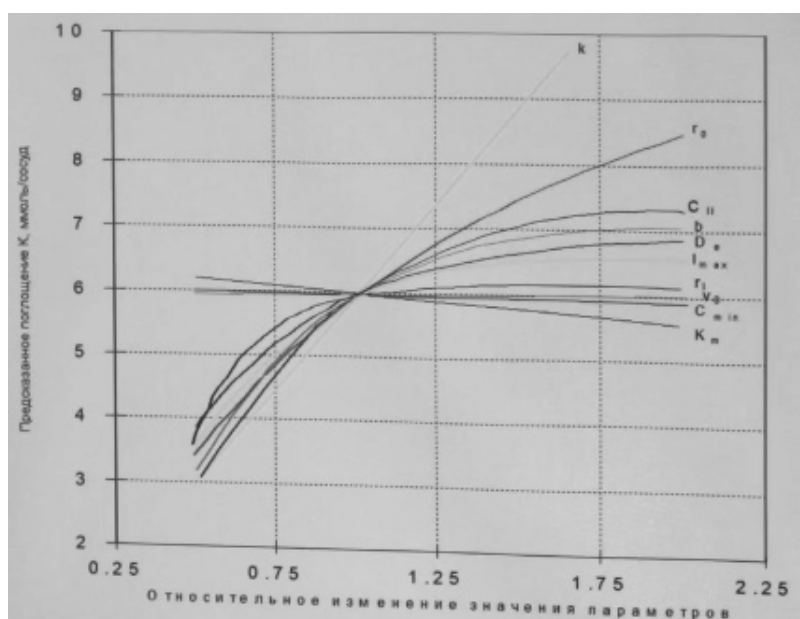


Рис. 6.16. Анализ чувствительности модели Кушмана, предсказывающий поглощение калия растениями

Все параметры были взяты в относительных величинах. Взял среднюю величину параметра и нормировал этим параметром различные значения этой величины.

Таким образом, для всех параметров оказалась единая относительная шкала. Чем интенсивнее будет рост кривой, тем интенсивнее будет изменение поглощения калия растениями от изменения параметров. В наибольшей степени рост наблюдается при изменении скорости роста и радиуса корней. А от константа Михаэлиса зависимость обратно пропорциональная. Чем больше константа Михаэлиса, тем медленнее потребление.

По модели ван Генухтена два параметра характеризуют перенос влаги $-\theta_s$ и n .

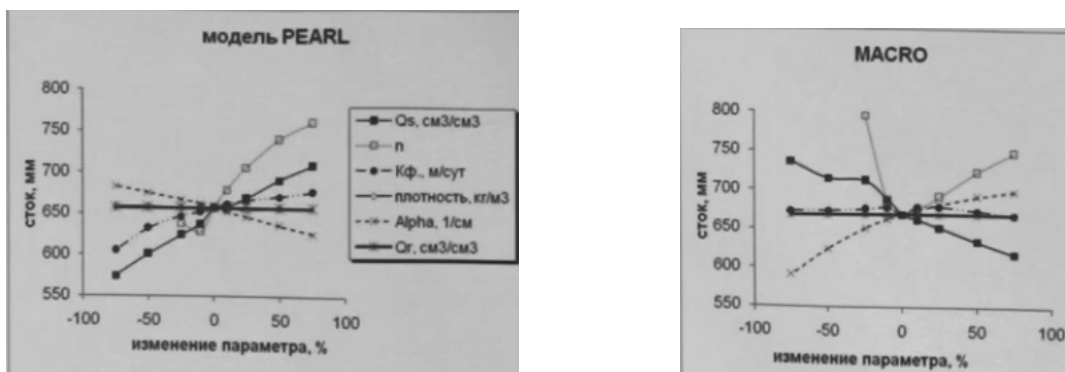


Рис. 6.17. Оценка чувствительности моделей по лизиметрическому стоку к изменению входных параметров ван Генухтена



ФАКУЛЬТЕТ
ПОЧВОВЕДЕНИЯ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ