

Я. А. ПАЧЕПСКИЙ

**Математические модели
процессов
в мелиорируемых
почвах**

**ИЗДАТЕЛЬСТВО
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
1992**

**МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА**

Я. А. ПАЧЕПСКИЙ

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПРОЦЕССОВ
В МЕЛИОРИРУЕМЫХ ПОЧВАХ**

Издательство Московского университета

1992

ББК 40.6
II 2I
УДК 63I.4

Рецензенты:

доктор биологических наук Е.А.Дмитриев,
доктор технических наук И.П.Айдаров

Печатается по постановлению
Редакционно-издательского совета
Московского университета

Пачепский Я.А.

II 2I Математические модели процессов в мелиорируемых
почвах. - М.: Изд-во МГУ, 1992. - 85 с.

ISBN 5-211-02374-9

В пособии рассмотрены вопросы применения математического моделирования для исследования и прогноза изменений некоторых свойств почв под воздействием мелиораций. Уделено внимание классификации моделей, оценке и сравнению их адекватности и качества, способам построения полуэмпирических моделей. Проанализированы принципы составления и использования полуэмпирических моделей переноса влаги и солей, основанных на фундаментальных соотношениях термодинамики и механики. Описано применение ЭВМ для моделирования и даны примеры использования специально разработанных программ.

Пособие рассчитано на студентов старших курсов, аспирантов, слушателей факультета повышения квалификации и специалистов в области почвоведения и мелиорации почв.

077 (02) - 92 - заказное

ББК 40.6

ISBN 5-211-02374-9

© Московский государственный университет,
1992

К числу важнейших задач мелиоративного почвоведения относится поиск путей для количественного и качественного описания процессов, происходящих в мелиорируемых почвах. Среди существующих методов наибольший интерес представляют те, которые способны обеспечить прогноз изменений в почвах при реалистических вариантах состава, порядка и объемов мелиоративных работ. Сопоставление результатов прогнозирования позволяет выбрать тот вариант, который наиболее приемлем по экономическим и экологическим критериям.

В настоящее время одним из основных подходов к количественному описанию и прогнозированию почвенных процессов становится применение математического моделирования в сочетании с более традиционными методами исследований. Наиболее развитые модели активно используются для предсказания переноса и аккумуляции в почвах влаги и химических соединений, формирования и движения поверхностного стока, переноса тепла и других процессов, протекание которых необходимо учитывать при обосновании, проектировании, проведении и оценке последствий мелиоративных мероприятий.

Математическое моделирование в почвоведении следует, в основном, общенаучным тенденциям. Для него характерна, в частности, множественность моделей для описания одного и того же явления или процесса. Все чаще возникает необходимость выбрать из нескольких уже разработанных моделей одну наиболее подходящую и затем наиболее эффективно ее применить. Исходя из этого, в данном пособии основное внимание уделено не разработке моделей, а их характеристике, оценке и выбору в связи с конкретными целями последующего использования. Для этого вполне достаточна математическая подготовка студентов-почвоведов в объеме университетского курса.

Практическая работа с современными моделями предполагает, как правило, применение ЭВМ. Приобрести некоторые навыки в этом направлении могут помочь упражнения с использованием учебных программ, упоминаемых в тексте. Описания программ и упражнений можно получить в ходе непосредственной работы с компьютером; в текст пособия они не включены.

Автор считает своим приятным долгом выразить искреннюю признательность профессору А.Д.Вороницу, по чьей инициативе был подготовлен лекционный курс, а также ст.н.с. Е.В.Шенну и н.с.Л.Б.Пачепской за полезные советы и консультации в процессе подготовки настоящего пособия.

I.I. Общие представления о моделировании и моделях.

Моделирование в почвоведении

Идея моделирования как метода исследования состоит в том, что объект, непосредственно интересующий исследователя, замещают другим объектом – моделью. В наиболее общем понимании модель – это система, воспроизводящая определенные стороны, связи или функции исследуемого объекта. Моделирование понимается как построение, исследование и использование моделей.

Модели классифицируют по характеру воспроизводимых свойств и отношений оригинала, способам реализации и др. Мы рассмотрим классификацию по степени абстрактности /21/, показанную на рис. I.

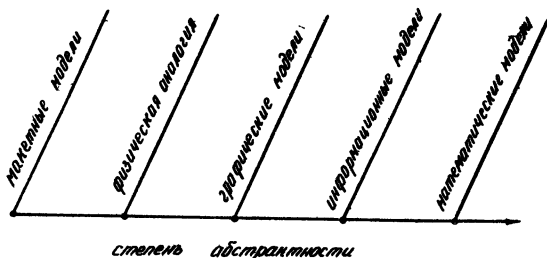


Рис. I. Классификация моделей по степени абстрактности

Наименее абстрактны, доступны непосредственному восприятию макетные модели. Примерами могут служить кабины-тренажеры летчиков, макеты горных систем и т.д. К этой группе относятся и почвенные монолиты, используемые для иллюстрации морфологического строения и окраски профиля почв.

Модели, основанные на физической аналогии, представляют собой следующую ступень абстракции. Примерами могут служить модели самолетов, обдуваемые в аэродинамической трубе, или модель склонового участка территории, подвергающегося размыву в специальном гидродинамическом лотке для изучения действия водной эрозии. Здесь при моделировании происходят те же процессы, что и в природе. Однако есть различие либо в пространственном, либо во временном масштабе протекания процессов. Поэтому прямо перенести результаты моделирования на натурные условия нельзя. Необходим пересчет, и найти правила пересчета удастся не всегда. Это можно проиллюстри-

ровать на результатах моделирования действия оросительной воды разного состава на черноземы /6/. В опытах почва набивалась в колонки и через них фильтровалась вода в количестве, соответствующем 5-10 летнему орошению. Наблюдались изменения, характерные для процессов осолонцевания и осолодения. Здесь физическая (и химическая) аналогия, несомненно, имела место, но конечно, прямой переход по срокам орошения был невозможен. Когда количество воды соответствовало 10 годам орошения, изменения твердой фазы почвы не обязательно должны были быть такими же, как после десятилетнего орошения в натуре.

К этому же типу моделей относятся более сложные модели, основанные на аналогии между законами, которым подчиняются разные по своей природе явления. Например, в мелиоративных исследованиях широко применяется электрогидродинамическая аналогия (ЭГДА). Она основана на том, что распределения потенциалов электрического тока в проводящей жидкости и распределения давлений при фильтрации воды в почвах и грунтах подчиняются идентичным законам. Эта аналогия позволяет вместо исследований фильтрации воды изучать распределение электрических потенциалов на моделях. Здесь уже модель от природы отличают не только масштабы, но и материальная природа.

Дальнейший шаг в сторону абстрагирования - графические модели. Это - графики, выражающие ход процессов, карты распределения чего-либо на поверхности или в глубинах Земли и т.д. На почвенной карте за ограниченным набором информации (цвет, штриховки, спецзнаки) стоит очень сложное понятие о конкретной почвенной разности с ее собственным морфологическим обликом и почвенными процессами; отражено взаимное расположение ареалов распространения разных почв. Степень сжатия информации уже очень высока.

Далее следует широкий спектр так называемых информационных моделей. В этих моделях абстрагируются не только от материального носителя, но и от взаимного расположения частей системы. Реальные связи в объекте исследования моделируются обменом информацией в модельной системе или статическим распределением информации в модельной системе. Например, в системах автоматизированного управления (АСУ) или системах автоматизированного проектирования (САПР) реальный обмен товарами, изделиями и т.п., имитируется обменом информации в ЭВМ. Особенностью информационных моделей является то, что в них легко включается человек. В этом случае появляется возможность моделировать работу сложных систем и вклю-

чать в модели аспект принятия решения.

Другой тип информационных моделей основан на хранении больших объемов данных о разных частях системы и выявлении "наиболее информативных" показателей, позволяющих наиболее точно предсказывать интересующие исследователя свойства объекта. В частности, работы по моделированию плодородия почв /17/ как раз и базируются на составлении информационных моделей по основным почвенным разностям.

Наконец, наиболее абстрактным являются математические модели. Здесь реальные связи в природных объектах (системах) отображаются с помощью математических уравнений. Путем решения этих уравнений находят зависимости реальных показателей состояния систем от времени или от положения в пространстве. Именно такие модели будут рассматриваться далее. В почвоведении, особенно в мелиоративном, их применение неуклонно расширяется с каждым годом. Существуют нормативные документы, предписывающие обязательное применение математических моделей при проектировании мелиоративных систем.

Обзор существующих классов моделей показывает, что в почвоведении все они применяются весьма широко. Выявление на монолитах закономерностей движения влаги и солей в почвах орошаемых массивов, использование вегетационных сосудов, лизиметров — и эти, и многие другие приемы изучения почв представляют собой не что иное, как применение моделирования. В целом можно сказать, что концепция моделирования органически присуща почвоведению как науке. А.А.Роде отмечал /16/, что почвоведение располагает четырьмя основными методами: сравнительно-географическим, сравнительно-аналитическим, стационарным и методом моделирования.

1.2. Виды математических моделей в мелиоративном почвоведении

Будем различать два основных вида моделей: эмпирические (статистические, регрессионные) и полумпирические (дедуктивные, процессные).

В основе эмпирической модели лежит формула, устанавливающая непосредственную связь между искомой величиной и показателями действия факторов, влияющих на эту величину. Модели этого вида — рядовое явление в научной и практической работе. Примером может служить формула, полученная по данным о промывках монолитов засоленных каштановых почв:

$$\frac{S}{S_0} = \exp \left[- \frac{N}{\Pi(2,0 + 2,6 V_f)L} \right]. \quad (I)$$

Здесь S_0 - исходный запас солей; S - их конечный запас; N - промывная норма, $\text{м}^3 \cdot \text{м}^{-2}$; Π - объем пор, $\text{м}^3 \cdot \text{м}^{-2}$; V_f - скорость фильтрации, $\text{м} \cdot \text{сут}^{-1}$; L - длина монолита, м.

Другой пример дает формула, выражающая зависимости расхода грунтовых вод в зону аэрации за вегетационный период U , мм, от суммарного испарения E_c , мм и глубины грунтовых вод H_r , м на орошаемых территориях по данным Одесской гидрогеолого-мелиоративной экспедиции:

$$U = -13 + E_c - 61,7 H_r - 0,244 H_r E_c. \quad (2)$$

Эти примеры иллюстрируют и достоинства, и недостатки эмпирических моделей. Достоинства заключаются в том, что в коэффициентах формул отражен весь комплекс факторов, влияющих на изучаемое явление. При составлении этих моделей ни от чего не абстрагировались. Кроме того, формулы просты - по ним очень легко вести расчеты.

Недостатком является прежде всего то, что в эмпирических формулах число входных показателей, отражающих действие влияющих факторов, обычно невелико. Поэтому и точность этих моделей обычно невелика. Другой недостаток состоит в том, что эмпирические модели, как правило, не вскрывают механизма изучаемого явления. Поэтому их обычно нельзя применять в условиях, отличных от тех, в которых они были получены. Так, нельзя априори утверждать, что еще где-то кроме юга Украины расход грунтовых вод в зону аэрации будет зависеть от суммарного испарения, так, как это предсказывает формула (2).

При записи эмпирических моделей нужно обязательно указывать:

- 1) размерности всех входящих в модель величин;
- 2) диапазоны, в которых они измерялись в экспериментах;
- 3) методики измерения всех величин, входящих в формулу модели.

При построении эмпирических моделей одного и того же процесса или явления в разных районах или разных условиях формулы модели могут различаться. Например, для оценки расхода грунтовых вод на эвапотранспирацию в степной зоне применяют формулу вида $U = b_1 \exp(-b_2 H_r)$, а в зоне полупустынь $U = b_1 \cdot H_r^{-b_2}$. В обоих случаях зависимость от глубины грунтовых вод H_r , в обоих случаях два числовых коэффициента b_1 и b_2 , но сами формулы (и значения b_1 и b_2) разные.

Полуэмпирические модели отличаются от эмпирических тем, что строятся на основе формул, выражающих фундаментальные законы природы, которые справедливы, разумеется, и в почвах. Это может быть закон сохранения массы, закон сохранения энергии, термодинамические уравнения химических равновесий, [] -теорема теории подобия [11] и др. Эти формулы дополняются эмпирическими моделями отдельных почвенных микропроцессов, и таким образом составляется "синтетическая" модель, описывающая изучаемое явление в целом.

В качестве примера рассмотрим модель переноса влаги в почве. В ее основе лежит дифференциальная формулировка закона сохранения массы, которая получается следующим образом. Рассмотрим слой почвы между глубинами $z - \Delta z$ и $z + \Delta z$, имеющий площадь сечения A (рис.2).

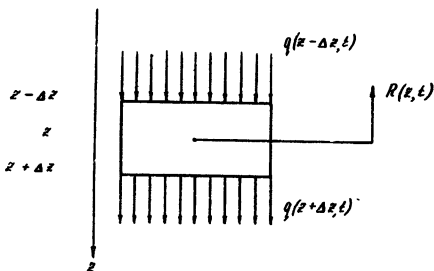


Рис.2. Балансовый слой и потоки влаги

Обозначим запас влаги на единицу массы почвы на глубине z в момент t через $w(z, t)$, кг раствора на кг почвы. В объеме выделенного слоя запас влаги равен $G = \rho w \cdot 2\Delta z \cdot A$, где ρ - плотность сложения почвы, $\text{кг} \cdot \text{м}^{-3}$. Приращение его за время от t до $t + \Delta t$ составит

$$\Delta G = [\rho w(z, t + \Delta t) - \rho w(z, t)] \cdot 2\Delta z \cdot A. \quad (3)$$

Изменение запаса влаги в слое возникает вследствие ее притока через сечение на глубине $z - \Delta z$ и оттока через сечение $z + \Delta z$, а также из-за внутрипочвенного потребления внутри этого слоя. Обозначим поток влаги сквозь единичное сечение почвы в направлении оси z через q , $\text{кг} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$. Через всю поверхность сечения за время Δt проходит $q A \Delta t$ кг раствора. Через R обозначим потребление влаги внутри почвы (корни, испарение), происходящее в единичном объеме за единицу времени, $\text{кг} \cdot \text{м}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$. За время Δt в рассматриваемом объеме потребляется влаги в количестве $R \cdot 2\Delta z \cdot A \Delta t$. Вследствие течения и потребления влаги изменение ее запаса в слое

приближенно будет равно

$$\Delta G = [q(z - \Delta z, t) - q(z + \Delta z, t)] A \Delta t - R \cdot 2 \Delta z \cdot A \cdot \Delta t. \quad (4)$$

Приравнивая два выражения для ΔG - (3) и (4) - и переходя к пределу при $\Delta z \rightarrow 0$ и $\Delta t \rightarrow 0$, находим искомое дифференциальное выражение закона сохранения массы:

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} = - \frac{\partial q}{\partial z} - R. \quad (5)$$

Чтобы на основе (5) получить полуэмпирическую модель, нужны подмодели процессов, влияющих на перенос. Рассмотрим один из часто используемых вариантов. Будем полагать, что набухание и усадка не приводят к заметным изменениям плотности сложения и не вызывают перемещения твердой фазы почвы через верхнее и нижнее сечение балансового слоя. Тогда можно принять $\rho = \text{Const}$.

Считаем, что перенос влаги, в основном, определяется градиентами матричного Ψ_m и гравитационного Ψ_g потенциалов в соответствии с законом Дарси:

$$q = - \frac{\kappa}{g} \frac{\partial}{\partial z} (\Psi_m + \Psi_g), \quad (6)$$

где κ - коэффициент влагопроводности, $\text{м} \cdot \text{с}^{-1}$; g - ускорение силы тяжести, $\text{м} \cdot \text{с}^{-2}$; Ψ_m и Ψ_g в $\text{дж} \cdot \text{м}^{-3} = \text{Н} \cdot \text{м}^{-2}$. Если ось z направлена вниз, то $\Psi_g = -\rho_w g z + \Psi_g^0$, где ρ_w - плотность раствора, $\text{кг} \cdot \text{м}^{-3}$, Ψ_g^0 - постоянное значение Ψ_g на глубине, принятой для его отсчета, где $z = 0$. Вместо Ψ_m часто применяют приведенную его величину $\psi = -\Psi_m / (\rho_w g)$, м. С учетом этого, полагая, что плотность раствора незначительно изменяется, вместо (6) можно записать

$$q = \rho_w \kappa \frac{\partial}{\partial z} (\psi + z). \quad (6a)$$

Модели для R будут рассмотрены в п.2.3; в данном случае будем считать, что корневое потребление отсутствует, т.е. $R = 0$.

Полагаем, что существуют однозначные эмпирические зависимости коэффициента влагопроводности и влагосодержания от ψ : $\kappa = \kappa(\psi)$ и $w = w(\psi)$. Примеры таких зависимостей можно увидеть на рис.3.

Вставляя перечисленные эмпирические зависимости и соотношения в (5), приходим к искомому уравнению полуэмпирической модели:

$$\frac{\rho}{\rho_w} \left(- \frac{dw}{d\psi} \right) \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\kappa \frac{\partial}{\partial z} (\psi + z) \right). \quad (7)$$

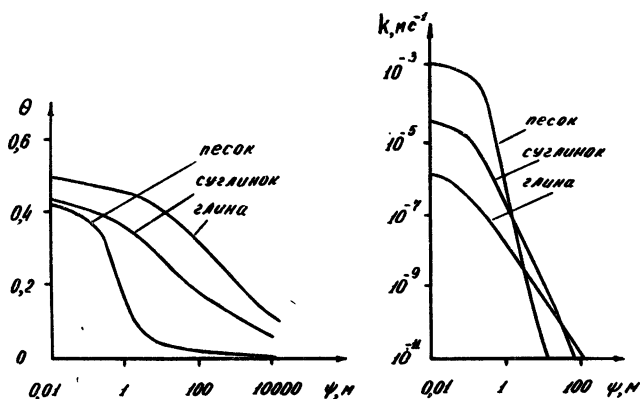


Рис.3. Зависимости коэффициента влагопроводности и влажности w от всасывающего давления ψ

Достоинством полуэмпирических моделей является неизменность исходной формулы, выражающей закон сохранения. Другим преимуществом оказывается возможность рассчитать детальное распределение показателя протекания изучаемого процесса во времени и по глубине.

Слабым местом полуэмпирических моделей является отсутствие гарантии того, что в модель включены описания действительно всех почвенных процессов, существенных при протекании рассматриваемого явления. Это можно увидеть и на примере описания влагопереноса в модели (7). В самом деле, в некоторых случаях перенос влаги определяется не только градиентом матричного и гравитационного потенциалов, но и потоком солей или пара. Игнорируется горизонтальный перенос. Не приняты во внимание пневматические эффекты. Этот список можно продолжать.

Общее положение таково, что из всей совокупности идущих процессов выбираются только некоторые, и такая идеализация неизбежно влечет за собой погрешности. Поэтому при работе с полуэмпирической моделью необходим, во-первых, четкий перечень исходных предположений и, во-вторых, ее проверка перед практическим использованием.

Если в число почвенных процессов, дающих существенный вклад в изучаемое явление, входят такие, для которых нет еще хороших эмпирических моделей, то и полуэмпирической модели этого явления построить не удастся. Так, например, пока обстоит дело с моделированием влияния анаэробизиса на почвенные режимы и свойства.

Таблица I

Примеры почвенных процессов разной продолжительности

Долгосрочные	Среднесрочные	Краткосрочные
Разложение гумуса	Образование глинист-	Испарение
Оподоливание	рых минералов	Перенос тепла
Отлеение	Разрушение глинист-	Диффузия газов
Осолодение	рых минералов	Ионный обмен
Латеритизация	Псевдоотглеение	Минерализация
	Эрозия	Иммобилизация
	Засоление	Уплотнение
		Рассоление

На выбор вида модели во многом оказывает влияние временной масштаб изучаемого процесса или явления. В табл. I даны примеры процессов с разным характерным временем их протекания /23/, т.е. временем, за которое происходят заметные изменения характеризующих их показателей. Как видно, сложность процессов снижается слева направо, т.е. процессы справа более просты и в то же время представляют наибольший интерес для практики мелиорации почв. Временной масштаб процессов уменьшается слева направо: слева стоят медленные, долгосрочные процессы, важные для эволюции почв. Справа стоят быстрые процессы, которые обычно принимают во внимание в первую очередь в связи с управлением продуктивностью агроценозов. Если для описания процессов, перечисленных в первой колонке, обычно применяют эмпирические модели, то для процессов, указанных в последней колонке, чаще стремятся использовать полуэмпирические. Процессы, представленные в центральной колонке, занимают промежуточное положение и с точки зрения моделирования: для их описания применяют и эмпирические, и полуэмпирические модели.

Быстрые процессы относятся к тем, которые А.А.Роде относил к "почвенным микропроцессам". Рассматривая перспективы моделирования в почвоведении, он отмечал, что "представляется целесообразным широкое внедрение этого метода для изучения отдельных микропроцессов различной природы, а затем - постепенно усложняющихся систем из этих процессов" /4/. Применение полуэмпирических математических моделей в мелиоративном почвоведении развивалось, в целом, в соответствии с этой точкой зрения.

Раньше других появились модели ионообменных равновесий в почвах. Их ввел и широко использовал в 30-х годах Е.Н.Гапон. Уравнение Гапона по сей день широко применяется при оценке качества оросительной воды по ее катионному составу. Для этих целей оно было использовано в США в 50-х годах. Уже в 30-х годах Т.Н.Зелениной-Черниковой была построена модель, описывающая совместное протекание ионного обмена Ca-Na и растворения или осаждения кальцита или гипса. Сходная модель была предложена позже Ч.Даттом и К.Танджи в начале 60-х годов. В 30-х годах В.А.Чернов и Н.А.Комарова использовали модель Фика для описания процесса молекулярной диффузии в почвах. В 60-х годах эту же модель стали применять в исследованиях в США (У.Портер). В 50-х годах сначала в СССР (Н.Н.Веригин, В.В.Рачинский, С.Ф.Аверьянов) и затем в США (П.Дэй, У.Форсайт, У.Гарднер) были начаты исследования по применению моделей гидромеханики к описанию миграции солей и ионов в почвах. В 60-х годах в Голландии (Д.Винд, И.Рубин) и СССР (И.И.Судницын) были начаты работы по моделированию движения влаги в профиле почвы. В 70-х годах появились модели миграции и превращения соединений азота в почвах (Д.Нильсен, П.Рольстон, Т.Г.Гильманов). Сейчас, в 80-х годах моделируют динамику соединений фосфора (О.Г.Усъяров, Д.Хортон). Появились хорошие модели динамики микробиологической активности (П.Лодлу, Н.С.Паников). Есть удачные разработки по моделированию трансформации органических соединений почв.

В последние годы наряду с улучшением существовавших и построением новых моделей отдельных процессов проявляется тенденция к объединению существующих моделей отдельных процессов движения влаги, транспорта и трансформации химических соединений в почвах в комплексные модели, предназначенные для описания почвенных режимов, возникающих вследствие проведения мелиораций /1,12/. В некоторых случаях удается соединять указанные модели почвенных процессов с моделями движения и превращения влаги и химических соединений в растениях и приземном воздухе /7/.

1.3. Необходимость и особенности применения ЭВМ

Реальный прогресс в применении математических моделей в большинстве областей знания был достигнут после распространения ЭВМ в 70-х годах. Компьютеры свели на нет две основные трудности, неизбежно сопутствующие применению математических моделей: необходимость проведения больших объемов вычислений, а также хранения

и обработки больших объемов исходных данных и промежуточных результатов расчетов. По оценкам академика А.Н.Тихонова, за последние 40 лет скорость вычислений возросла в 100 миллионов раз. Сейчас уже можно решить систему уравнений самой сложной из известных математических моделей.

Если расчеты по формулам эмпирических моделей обычно не требуют больших объемов вычислений, то для полумэмпирических моделей объем расчетов может быть очень большим. Рассмотрим, например, один из возможных вычислительных процессов для решения уравнения влагопереноса в почве (7) методом конечных разностей. Ограничимся диапазоном высоких влажностей, близких к влажности полного насыщения. Тогда согласно данным рис.3 можно принять простые эмпирические модели для зависимостей κ и w от ψ :

$$\kappa = b_1, \quad w = b_2 - b_3 \psi, \quad (8)$$

b_1, b_2, b_3 - постоянные величины. При этом уравнение (7) принимает вид:

$$\frac{\partial}{\partial w} b_3 \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} = b_1 \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}. \quad (9)$$

Будем рассматривать интервал глубин от 0 до L и промежуток времени от 0 до t_k . Идея метода состоит в том, чтобы заменить уравнение модели на систему балансовых уравнений для слоев конечной толщины. Для этого разобьем интервал $[0, L]$ на отрезки длиной Δz точками $z_1 = \Delta z, z_2 = 2\Delta z, z_3 = 3\Delta z, \dots, z_{N-1} = (N-1)\Delta z$. Промежуток времени $[0, t_k]$ разобьем на отрезки длиной Δt точками $t_1 = \Delta t, t_2 = 2\Delta t, t_3 = 3\Delta t, \dots, t_{M-1} = (M-1)\Delta t$. Величина Δz - шаг по пространственной координате, а Δt - шаг по времени. Если в плоскости переменных нарисовать линии $z_m = \text{Const}$ и $t_m = \text{Const}$, то получится прямоугольная сетка (рис.4). Узел (i, j) этой сетки имеет координаты $(m \cdot \Delta z, n \cdot \Delta t)$. Например, узел А на рис.4 - это узел (3,2) и его координаты $(z_3 = 3\Delta z, t_2 = 2\Delta t)$. Чтобы найти приближенное решение уравнения модели (7), заменим это дифференциальное уравнение системой более простых алгебраических уравнений, в которые войдут значения неизвестной величины - в нашем случае ψ - только в узлах сетки. Для этого производные в уравнениях модели нужно приближенно заменить разностями. Например, в узле (m, n) имеют место соотношения:

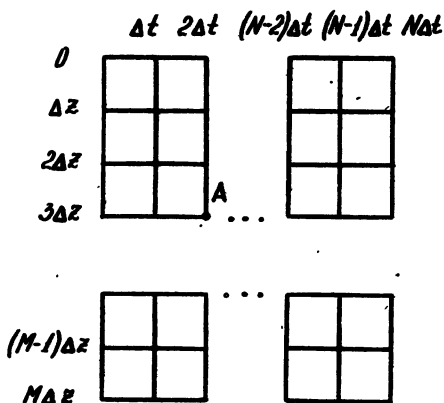


Рис. 4. Сетка для численного решения уравнения модели влагопереноса

$$\left(\frac{\partial \Psi}{\partial t}\right)_{m,n} \approx \frac{\Psi(z_m, t_{n+1}) - \Psi(z_m, t_n)}{\Delta t}; \quad (I0)$$

$$\left(\frac{\partial \Psi}{\partial z}\right)_{m+1,n} \approx \frac{\Psi(z_{m+1}, t_n) - \Psi(z_m, t_n)}{\Delta z}; \quad \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z}\right)_{m,n} \approx \frac{\Psi(z_m, t_n) - \Psi(z_{m-1}, t_n)}{\Delta z} \quad (II)$$

$$\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}\right)_{m,n} \approx \frac{\left(\frac{\partial \Psi}{\partial z}\right)_{m+1,n} - \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z}\right)_{m,n}}{\Delta z} \approx \frac{\Psi(z_{m+1}, t_n) - 2\Psi(z_m, t_n) + \Psi(z_{m-1}, t_n)}{\Delta z^2} \quad (I2)$$

Проверим, например, первое из уравнений (II). Раскладывая в ряд Тейлора близ точки (z_m, t_n) ; имеем:

$$\Psi(z_{m+1}, t_n) \approx \Psi(z_m, t_n) + \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z}\right)_{m,n} \cdot \Delta z \quad (I3)$$

откуда непосредственно следует (II). Обозначим для удобства $\Psi_{m,n} = \Psi(z_m, t_n)$. Путем подстановки в (9) выражений для $(\partial \Psi / \partial t)_{m,n}$ из (I0) и для $(\partial^2 \Psi / \partial z^2)_{m,n}$ из (I2), найдем в узле (m, n)

$$\frac{s}{S_w} b_3 \frac{\Psi_{m,n+1} - \Psi_{m,n}}{\Delta t} = b_1 \frac{\Psi_{m+1,n} - 2\Psi_{m,n} + \Psi_{m-1,n}}{\Delta z^2}$$

или окончательно

$$\Psi_{m,n+1} = \alpha \Psi_{m+1,n} + (1-2\alpha) \Psi_{m,n} + \alpha \Psi_{m-1,n}, \quad (I4)$$

где $\Delta t = b_1 b_2 \xi_w / (\rho b_2 \Delta z^2)$.

Покажем теперь, как вести расчеты происходящих со временем изменений профильного распределения всасывающего давления. Допустим, что в начальный момент $t = 0$ (т.е. при $n = 0$) все значения $\Psi_{m,0}$ известны. Тогда по формуле (14) при $n = 0$ можно вычислить $\Psi_{m,1}$ для всех m от 1 до $M-1$ — узнать искомую величину через время Δt . А на границах $z = 0$ ($m=0$) и $z=L$ ($m=M$) зависимости Ψ от времени будем считать заданными. Значит $\Psi_{0,1}$ и $\Psi_{M,1}$ можно определить согласно этим зависимостям. После этого будут известны уже все $\Psi_{m,1}$. Теперь по формуле (12) можно уже рассчитать $\Psi_{m,2}$ для $n = 1, 2, \dots, N-1$, а $\Psi_{0,2}$ и $\Psi_{M,2}$ вновь найти из зависимостей Ψ от t на границах. Дальше открыт путь к расчету $\Psi_{m,3}$ и т.д., пока n не станет равным $N-1$.

Рассмотрим пример таких расчетов. Пусть в почвенном монолите высотой 0,3 м исходное равновесное распределение всасывающего давления по профилю соответствовало формуле $\Psi = 0,8 - z$ при условии, что $z = 0$ на верхнем торце. В начальный для расчетов момент нижний торец монолита приводят в контакт с поверхностью воды и начинается капиллярный подъем. Таким образом, $\Psi(z,t) = 0$ при $z=L$. На верхнем торце поток жидкой влаги равен нулю, т.е. согласно формуле (6а) $\frac{\partial \Psi}{\partial z} = 1$, откуда $\frac{\Psi_{i,n} - \Psi_{0,n}}{\Delta z} = -1$ и $\Psi_{0,n} = \Psi_{i,n} + \Delta z$. Поэтому всякий раз, рассчитав $\Psi_{i,j}$ по (14), будем находить $\Psi_{0,n}$, увеличивая $\Psi_{i,n}$ на Δz .

Результаты вычислений при $t_k = 2 \cdot 10^{-3}$ с, $\rho = 1,5 \cdot 10^3$ кг·м⁻³, $\xi_w = 10^3$ кг·м⁻³, $b_1 = 3,5 \cdot 10^{-6}$ м·с⁻¹, $b_2 = 4 \cdot 10^{-2}$ м⁻¹, $\Delta z = 0,01$ м, $\Delta t = 0,4$ с приведены в табл.2 и на рис.5. Можно проследить постепенное снижение капиллярного давления, соответствующее формированию профиля капиллярной каймы. На рис.5 показана и соответствующая динамика влажности, рассчитанная по формуле (8) при $b_2 = 0,3$ кг·кг⁻³.

Наше приближенное решение имеет, конечно, погрешность. Погрешность можно снизить, уменьшая Δz и Δt , или применяя более точную конечно-разностную аппроксимацию уравнений. При этом объем вычислений возрастает. При выбранных нами Δz и Δt для завершения расчетов требовалось 150 000 раз провести вычисления по формуле (14). Персональному компьютеру средней мощности (РС/АТ) на это потребовалось всего 20 сек.

Некоторые уравнения полуэмпирических моделей, у которых все

коэффициенты постоянны, имеют точные - так называемые аналитические - решения. Рассмотренный нами случай - как раз такой /2/,

Таблица 2

Ход расчета изменений всасывающего давления при
формировании капиллярной каймы

m	Глубина, м	Всасывающее давление, м								
		$t=0$	$t_1=1\Delta t$	$t_2=2\Delta t$	$t_3=3\Delta t$	t_{50}	t_{60}	t_{500}	t_{510}	t_{5000}
0	0	0,80	0,80	0,80		0,80	0,80	0,75	0,74	0,32
1	0,01	0,79	0,79	0,79		0,79	0,79	0,74	0,73	0,31
2	0,02	0,78	0,78	0,78		0,78	0,78	0,73	0,72	0,30
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
25	0,25	0,55	0,55	0,55	0,55	0,40	0,38	0,18	0,18	0,06
26	0,26	0,54	0,54	0,54	0,54	0,33	0,31	0,14	0,14	0,05
27	0,27	0,53	0,53	0,53	0,52	0,26	0,24	0,11	0,11	0,03
28	0,28	0,52	0,52	0,49	0,46	0,18	0,17	0,07	0,07	0,02
29	0,29	0,51	0,39	0,33	0,29	0,09	0,08	0,04	0,04	0,01
30	0,30	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

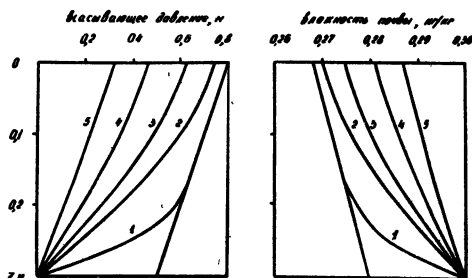


Рис.5. Расчетная динамика формирования капиллярной каймы в почвенном монолите:

1 - 20 с с момента контакта нижнего торца с водной поверхностью, 2 - 200 с, 3 - 400 с, 4 - 2000 с, 5 - 5000 с

и сравнение данных табл.2 с результатами расчетов по формулам аналитических решений показало хорошее соответствие (совпадение первых трех значащих цифр), т.е. погрешность принятого алгоритма невелика. По формулам аналитических решений можно считать без

мощных компьютеров, используя таблицы. Но это также довольно трудоемко. Что более важно, практически применимые полуэмпирические модели всегда имеют переменные коэффициенты и аналитических решений получить не удастся – применение ЭЕМ неизбежно.

В целом приведенный пример показывает, что применение ЭЕМ для решения уравнений полуэмпирических моделей, с одной стороны необходимо, а с другой – позволяет получать результаты за вполне приемлемое время.

Если составлена программа для ЭЕМ для вычислений по модели, говорят, что эта модель реализована на ЭЕМ в виде (или с помощью) программы. Программам обычно дают имена, чтобы отличать их друг от друга. Например, программа для расчета движения влаги в почве, которая используется в части 2 данного курса, называется MOIST, а программа, составленная для тех же целей во ВНИИ гидротехники и мелиорации – WAT2.

Программа, реализующая модель на ЭЕМ, представляет собой средство для исследований. Ситуация очень похожа на случай, когда вы имеете дело с прибором для научных исследований. Действительно, когда вы работаете с прибором, вы, во-первых, на основании методического руководства представляете, как готовить пробу для исследования. Во-вторых, знаете, как интерпретировать результаты. В-третьих, обычно знаете физический принцип, положенный в основу работы прибора, но чаще всего не представляете себе детали его устройства. В случае работы с программой для ЭЕМ, реализующей модель, вы знаете из инструкции, как готовить данные для расчетов. Знаете, как интерпретировать результаты вычислений, отраженные в машинной выдаче. Знаете, какие предположения положены в основу математической модели, но обычно не представляете себе, как конкретно организованы вычисления.

Если оставить в стороне различия психологического восприятия прибора и программы, то аналогия здесь очень тесная.

Так же, как приборы обычно делают для многократных измерений, так и программы для ЭЕМ обычно пишут для многократного их использования в расчетах. Если программа реализует некоторую модель, то многократные вычисления по этой программе часто называют вычислительными экспериментами на ЭЕМ. Вычислительный эксперимент – это основной способ использования математических моделей.

Человека или организацию, использующих готовые программы для ЭЕМ, часто называют пользователем. Пользователю, работающему с

программами, реализующими модели на ЭВМ, нужна определенная сумма знаний, позволяющая проводить вычислительные эксперименты. Чем выше квалификация и богаче опыт такого пользователя, тем более эффективно он сможет применять модели.

Вычислительный эксперимент заключается в проведении нескольких расчетов по модели при разных сочетаниях входных величин модели. Среди входных величин моделей могут быть: а) управляемые входные переменные, например, длина монолита L в модели (1); б) неуправляемые входные переменные, характеризующие факторы протекания процесса, например, суммарное испарение U в модели (2) и в) коэффициенты уравнений модели, характеризующие условия протекания процесса и не меняющиеся, если не меняются эти условия; такие коэффициенты называются параметрами моделей (и соответствующих им процессов).

По окончании вычислительного эксперимента сравниваются значения заранее выбранной величины — переменной отклика. Выбор переменной отклика входит в задачу пользователя и зависит от целей, для которых используется моделирование.

Например, пусть мы располагаем моделями для расчета влаго- и солепереноса в почве и хотим оценить, как разные варианты режима водоподачи на промывку будут влиять на рассоление почвы в связи с солеустойчивостью растений, которые потом будут расти на этой почве. Тогда переменная отклика должна интегрально характеризовать засоление почвы "с точки зрения растений". Наши модели сами по себе не могут подсказать, как выбрать такой интегральный показатель. Они лишь позволяют рассчитать зависимости влажности и минерализации почвенного раствора, а также потоков влаги и солей от глубины и времени. Но если, скажем, из натурных опытов по солеустойчивости планируемых к выращиванию культур известно, что хорошим интегральным показателем опасности засоления является среднее засоление почвы в слое $0,1-0,4$ м, то переменной отклика будет величина, полученная осреднением расчетного профиля минерализации почвенного раствора в этом слое. Результаты сравнения тех же вариантов водоподачи могут анализироваться под другим углом зрения, например, в связи с нагрузкой на дренаж. Тогда переменной отклика может быть величина инфильтрационных потерь. Некоторые варианты выбора переменных отклика рассмотрены в последующих разделах.

Как любой эксперимент, вычислительный эксперимент требует,

во-первых, предварительного планирования и, во-вторых, применения статистических процедур для обработки его результатов. Для обработки результатов экспериментов обычно применяют безразмерные величины, с помощью которых можно проверять статистические гипотезы. Такие величины называют статистиками. Для проверки одной и той же гипотезы могут быть применены разные статистические критерии. Каждому критерию соответствует определенный способ расчета статистики.

При проверке статистических гипотез обычно задают критическое значение уровня значимости α , при превышении которого рассматриваемую гипотезу принимают. Каждому уровню значимости соответствует критическое значение статистики критерия. Используемые ниже критерии таковы, что если значение статистики критерия, найденное по экспериментальным данным, меньше критического, то фактическое значение уровня значимости гипотезы оказывается большим, чем критическое - гипотезу можно принимать. Обычно значение $\alpha = 0,05$ вполне приемлемо для почвенно-мелиоративных расчетов.

В зависимости от целей моделирования выделяют следующие типы вычислительных экспериментов:

- 1) определение параметров моделей;
- 2) оценка и сравнение моделей;
- 3) анализ чувствительности моделей;
- 4) поливариантный прогноз;
- 5) поиск оптимальных управляющих воздействий;
- 6) последовательное планирование натурных экспериментов с помощью вычислительных экспериментов;
- 7) приближенная замена сложной модели на более простую.

Различные виды вычислительных экспериментов будут рассмотрены в последующих разделах. Обозначения, которые будут при этом использованы, сведены в табл.3.

1.4. Параметры моделей и методы их определения

Рассмотрим подробнее понятие параметра модели, введенное в предыдущем разделе. В эмпирических моделях всякий параметр является постоянным коэффициентом и наоборот. В полумэмпирических моделях это может быть не так. Разберем этот вопрос на примере модели, задаваемой уравнением (7), когда эмпирические модели отдельных процессов задаются формулами (8). Параметрами этих моделей являются постоянные величины b_1, b_2, b_3 , а параметры полумэмпирической модели (7) оказываются функциями $w(\psi)$ и $\kappa(\psi)$. Хотя значения

функции $w(\psi)$ изменяются, но формула ее эмпирической модели остается во все время протекания изучаемого процесса неизменной. Таким образом, параметрами полумпирических моделей являются функции, выражающие эмпирические модели отдельных процессов. Кроме того, параметры полумпирических моделей могут быть функциями от пространственных координат и даже времени.

Таблица 3

Величины, используемые при описании вычислительных экспериментов с моделями

Обозначение	Величина
K	Количество разных вариантов измерений
j	Номер варианта измерений
Q	Количество входных переменных
$x_1^{(j)}, x_2^{(j)}, \dots, x_Q^{(j)}$	Набор значений входных переменных в j -том варианте измерений
n_j	Количество повторностей измерений в j -том варианте
y_{ij}	Значение выходной переменной по данным i -той повторности в j -том варианте измерений
$\bar{y}_j = \frac{1}{n_j} \sum_{i=1}^{n_j} y_{ij}$	Среднее по повторностям значение выходной переменной в j -том варианте измерений
$\bar{Y}_j$	Рассчитанное по модели значение выходной переменной для j -того варианта измерений
$\Delta_j = \bar{y}_j - \bar{Y}_j$	Абсолютная погрешность модели для j -того варианта измерений
$\delta_j = 1 - \bar{Y}_j / \bar{y}_j$	Относительная погрешность модели для j -того варианта измерений
P	Количество параметров
$b_1, b_2, \dots, b_P$	Значения параметров модели
$N = \sum_{j=1}^K n_j$	Общее число измерений с учетом повторностей

Если иметь в виду применение моделей, необходимо следить за употреблением термина "параметр". Дело в том, что часто параметрами почти называют показатели ее свойств, которые меняются в ходе исследований: засоление, влажность и др. Это неправильно. Речь идет именно о показателях или характеристиках состава или свойств.

Часть параметров моделей поддается непосредственному измерению

например, плотность сложения ρ в модели (7). Но некоторые параметры не могут быть измерены и их определяют расчетным путем, например, коэффициент b_3 в эмпирической модели (8). Эта операция называется идентификацией модели, ее калибровкой или настройкой, иногда говорят об оптимизации параметров. Идентификация обычно трудоемка и осуществляется в ходе специальных вычислительных экспериментов.

Мы будем рассматривать только наиболее распространенную задачу определения параметров (коэффициентов) эмпирических моделей. Для вычислительных экспериментов, проводимых в этих случаях, в качестве переменной отклика часто берут среднеквадратическую абсолютную Φ_Δ или относительную Φ_δ погрешность:

$$\Phi_\Delta = \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N n_j \Delta_j^2 \right)^{1/2}, \quad \Phi_\delta = \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N n_j \delta_j^2 \right)^{1/2} \quad (15)$$

в обозначениях табл.3.

План вычислительного эксперимента задается алгоритмом, обеспечивающим нахождение такого набора значений параметров $b_1, b_2, \dots, b_p$, при котором достигается минимум Φ_Δ или Φ_δ .

Если вычисления по модели относительно трудоемки, то используют алгоритмы сканирования или симплекс-метод. Мы рассмотрим применение метода сканирования на примере модели с двумя параметрами b_1 и b_2 . Область в плоскости переменных, где могут находиться искомые их значения, покрывается прямоугольной сеткой. В узлах рассчитываются величины переменной отклика, например Φ_Δ . Близ узла, где Φ_Δ оказалось минимальной, сетка измельчается. Рассчитывается Φ_Δ в узлах новой сетки, область, содержащая искомые значения параметров, находится более точно. Затем проводят следующее измельчение возле узла минимума и т.д. Обычно вычисления можно прекращать, когда в пределах сетки относительные изменения Φ_Δ не превосходят 10^{-M} , где M — количество точных значащих цифр в значениях измеренный $\bar{y}$.

Рассмотрим пример. Пусть зависимость между критической глубиной грунтовых вод ($\bar{y}$, м) и их минерализацией (x_1 , г.л⁻¹) дается таблицей:

x_1	0,8	2,0	5,0	10,0	20,0
$\bar{y}$	1,1	1,5	2,4	3,0	4,0

Модель возьмем в виде: $\bar{y} = (x_1/b_1)^{b_2}$. В обозначениях табл.3 имеем

$K = 4, P = 2, Q = 1$, все $n_j = 1$. Величина Φ_A будет равна:

$$\Phi_A = \frac{1}{4^{1/2}} \left\{ \left[1,1 - \left(\frac{0,8}{b_1} \right)^{b_2} \right]^2 + \left[1,5 - \left(\frac{2,0}{b_1} \right)^{b_2} \right]^2 + \left[2,4 - \left(\frac{5,0}{b_1} \right)^{b_2} \right]^2 + \left[3,0 - \left(\frac{10}{b_1} \right)^{b_2} \right]^2 + \left[4,0 - \left(\frac{20}{b_1} \right)^{b_2} \right]^2 \right\}.$$

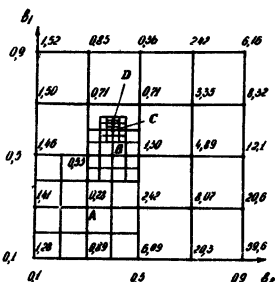


Рис. 6. Последовательное измельчение сетки при поиске параметров методом сканирования. В узлах — значения среднеквадратичной погрешности модели

Результаты расчетов на исходной крупной сетке 5 x 5 узлов и ход последующего ее измельчения по-

казаны на рис. 6. Первое измельчение провели близ узла А, так как именно в нем Φ_A достигла наименьшего значения 0,28. В последующих центрах более мелких сеток — узлах В, С и Д имели значения соответственно, 0,253, 0,077 и 0,063. Расчеты были прекращены при $b_1 = 0,628$ и $b_2 = 0,401$.

Если соединить между собой узлы А, В, С, Д и т. д., близ которых проводилось очередное измельчение сетки, то получится ломаная линия, показывающая траекторию поиска в плоскости переменных $b_1 - b_2$. Оказывается, изменение направлений траектории поиска можно автоматизировать. С этой целью для эмпирических моделей, когда расчет выходной переменной несложен, чаще всего применяют алгоритмы градиентных методов поиска минимума Φ_A (или Φ_s). Например, при использовании так называемого метода наискорейшего спуска

- выбирают начальное приближение значений параметров $b_1^{(0)}, b_2^{(0)}, \dots, b_p^{(0)}$;
- в пространстве переменных $\{b_1, b_2, \dots, b_p\}$ находят направление, при продвижении в котором переменная отклика Φ_A уменьшается наиболее быстро; если даже на этом направлении Φ_A убывает очень слабо — вычисления прекращают, в противном случае переходят к п. (в);
- делают несколько шагов в выбранном направлении, вычисляя на каждом шагу Φ_A и следя за тем, чтобы на каждом шагу Φ_A уменьшалась;
- когда Φ_A перестает убывать, переходят к п. (б).

Разные варианты алгоритмов градиентных методов отличаются 1) способом определения направления наиболее быстрого убывания и 2) спо-

способом определения величин шагов, с которыми продвигаются по выбранному направлению. Один из них - алгоритм Марквардта - реализован в учебной программе ЕМРІ .

Результаты работы алгоритмов поиска параметров допускают статистическую трактовку. Так, величины параметров, находимые путем минимизации Φ_{Δ} можно рассматривать как оценки средних значений этих параметров $\bar{b}_1, \bar{b}_2, \dots, \bar{b}_r$ /11/. Некоторые алгоритмы, в том числе и заложенный в основу ЕМРІ, позволяют вычислить и ошибки этих средних $\Delta \bar{b}_1, \Delta \bar{b}_2, \dots, \Delta \bar{b}_r$, а значит, и найти доверительные интервалы, коэффициенты вариации, показатели точности и другие величины, важные для статистических оценок и сравнений. В частности, если параметры находят по данным опытов, одинаковых по методике, но различающихся по условиям проведения, то проверяя гипотезу о достоверности различия средних значений параметров, можно выявить, на какие параметры модели оказывают влияние условия проведения, а на какие - нет. Для этого нужно вычислить величину t -статистики $t_{b_i} = |\bar{b}_{i1} - \bar{b}_{i2}| / \sqrt{(\Delta \bar{b}_i)_1^2 + (\Delta \bar{b}_i)_2^2}$, где индексы 1 и 2 относятся к двум разным вариантам опыта. Здесь рассмотрен простой случай, когда нет достоверного различия между $(\Delta \bar{b}_i)_1$ и $(\Delta \bar{b}_i)_2$. Значение t_{b_i} нужно сравнить с критическим значением функции распределения Стьюдента $t_{k-p, 1-\alpha/2}$ с $k-p$ степенями свободы, α - принятый уровень значимости. Если $t_{b_i} < t_{k-p, 1-\alpha/2}$, то можно утверждать, что влияние фактора на значение параметра b_i не обнаружено.

Рассмотрим пример. При оценке влияния кислотности почв содового засоления на их водопроницаемость (после шестого часа наблюдений) была использована модель $Y = (x_1/b_1)^{b_2}$. Здесь Y - водопроницаемость, мм·мин⁻¹, x_1 - доза внесения мелиоранта, т·га⁻¹, в пяти опытах

менялось от 0 до 50. Применяли два вида мелиоранта: серную кислоту из дымовых газов и товарную серную кислоту. Для первого варианта нашли $\bar{b}_1 = 56,5$; $\bar{b}_2 = 0,471$; $\Delta \bar{b}_1 = 2,75$; $\Delta \bar{b}_2 = 0,0305$, а для товарной серной кислоты $\bar{b}_1 = 60,2$; $\bar{b}_2 = 0,612$; $\Delta \bar{b}_1 = 2,56$; $\Delta \bar{b}_2 = 0,0281$. Величина $t_{b_1} = 0,98$; $t_{b_2} = 3,40$, а $t_{3;0,975} = 3,18$, так что на b_1 вид мелиоранта влияния не оказал, а на b_2 - оказал.

Следует отметить, что при фиксированном количестве вариантов наблюдений увеличение количества параметров модели обычно влечет за собой увеличение ошибок средних значений параметров. Идентификация модели вообще недопустима, если $P > K/2$. Чем больше параметров, тем больше экспериментальных данных нужно для их опреде-

ления. Поэтому при моделировании всегда приходят к компромиссу между точностью модели и затратами на проведение опытов для определения параметров. Обычно придерживаются принципа последовательного усложнения моделей /8/. Начинают с весьма простых моделей с небольшим числом параметров, постепенно усложняют модели, пока не будут выполнены критерии, по которым модель можно считать удовлетворительной. Эти критерии рассмотрены в следующем разделе.

1.5. Оценка и сравнение моделей

Обычно от модели требуют, чтобы она обеспечивала соответствие между расчетными $\bar{Y}$ и измеренными $\bar{y}$ величинами, т.е. чтобы погрешности Δ были невелики по сравнению с $\bar{y}$. Желательно также, чтобы большие погрешности встречались реже, чем небольшие, и чтобы средняя погрешность была близка к нулю. В то же время априори ясно, что не стоит добиваться того, чтобы разброс погрешностей модели был мал по сравнению с разбросом экспериментальных данных. Если по данным измерений мы сами не в состоянии оценить средние $\bar{y}$ достаточно точно, то и от модели не следует требовать этого.

Неопределенным выражениям типа "соответствие", "невелики" и т.п., употребленным в предыдущем абзаце, может быть придан конкретный количественный смысл с помощью применения статистических критериев, которые описаны в данном разделе.

Перед оценкой модели целесообразно провести анализ статистического распределения погрешностей Δ (их еще называют остатками). Величины Δ получаются одновременно со значениями параметров модели при применении методов, описанных в п.1.4. Типичные эмпирические функции распределения Δ показаны на рис.7 а-в. На рис.7а изображена наиболее желательная форма функции распределения погрешности: среднее близко к нулю, вероятность получения больших по абсолютной величине значений Δ небольшая. Рис.7б демонстрирует случай, когда относительно велика вероятность обнаружения больших погрешностей. Часто это означает, что модель не отражает качественных особенностей поведения объекта (как на рис.7г, где модель не улавливает колебательную составляющую динамики) или есть зависимость разброса значений Δ от абсолютных значений измеренных величин, как на рис.7д. Рис.7в относится к случаям, когда есть выпадающие из общей тенденции экспериментальные точки (как на рис.7е) или были сделаны грубые ошибки при вводе данных в ЭВМ для идентификации.

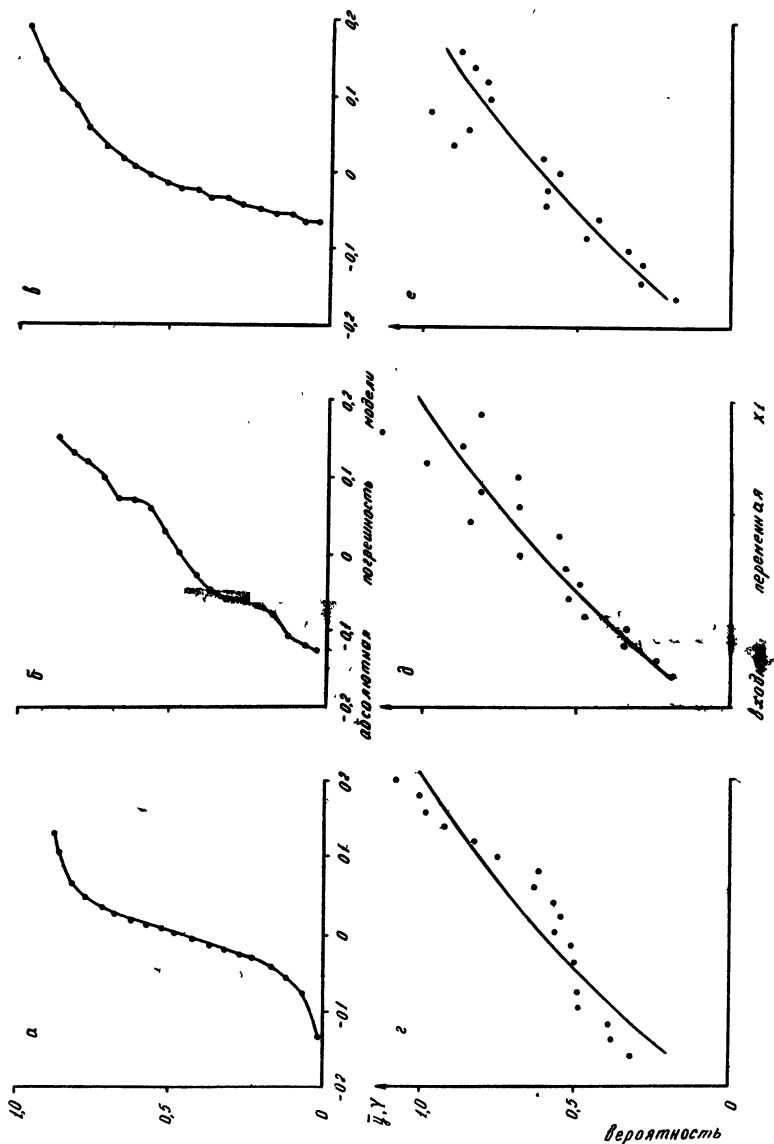


Рис.7. Примеры функций распределения погрешностей модели (а - в), возникающих при разном характере соответствия расчетных и экспериментальных значений (г - е)

Одним из основных направлений оценки моделей является оценка их адекватности. При этом оценивается достоверность отличия разброса погрешностей модели от разброса экспериментальных данных, вызванного природными причинами и особенностями методов измерений или анализа. Если разброс погрешностей модели не отличается достоверно от разброса экспериментальных данных, то модель считается адекватной.

Мерой разброса погрешностей является средний квадрат неадекватности:

$$S_a^2 = \frac{1}{K-P} \sum_{j=1}^K n_j \Delta_j^2, \quad (I6)$$

а мерой разброса данных измерений – средний квадрат чистой ошибки:

$$S_e^2 = \frac{1}{N-K} \sum_{j=1}^K \sum_{i=1}^{n_j} (y_{ij} - \bar{y}_j)^2, \quad (I7)$$

обозначения – из табл.3. Проверяется гипотеза о равенстве S_a^2 и S_e^2 , статистикой критерия является отношение $F = S_a^2/S_e^2$, используется критерий Фишера. Значение F сравнивают с табличной величиной $F_{K-P, N-K}$ на принятом в исследовании уровне значимости. Если $F < F_{K-P, N-K}$, то гипотеза об адекватности модели может быть принята.

Рассмотрим пример, основанный на данных табл.4, где представлены материалы опытов по промывке засоленных почв при разовой водоподаче $0,25 \text{ м}^3 \cdot \text{м}^{-2}$ ($2500 \text{ м}^3 \text{ га}^{-1}$). Входных переменных две – общая промывная норма x_1 , м, и x_2 – межтактовый промежуток, сут. Выходная переменная – остаточное засоление метровой толщи в долях от исходного. Эмпирическая модель задается формулой

$Y = 1 / \{1 + [x_1(b_1 + b_2 x_2)]^{b_3}\}$. Таким образом $K = 4$, $P = 3$, $Q = 2$, $N = 3 + 4 + 4 + 5 = 16$. Значения параметров: $b_1 = 1,05$; $b_2 = 0,4$; $b_3 = 2,5$. Согласно (I6) и (I7), будем иметь:

$$S_a^2 = \frac{1}{4-3} [3 (-0,0286)^2 + 4 (-0,0035)^2 + 4,00057^2 + 5 \cdot 0,0116^2] = 1,670 \cdot 10^{-3}$$

$$S_e^2 = \frac{1}{16-4} [(0,56-0,52)^2 + (0,52-0,52)^2 + (0,48-0,52)^2 + (0,38-0,3275)^2 + (0,37-0,3275)^2 + (0,29-0,3275)^2 + (0,27-0,3275)^2 + (0,22-0,1825)^2 + (0,21-0,1825)^2 + (0,17-0,1825)^2 + (0,13-0,1825)^2 + (0,11-0,0920)^2 + (0,011-0,0920)^2 + (0,09-0,0920)^2 + (0,08-0,0920)^2 + (0,07-0,0920)^2] = 1,569 \cdot 10^{-3}.$$

Таблица 4

Результаты измерений и расчетов приведенного остаточного засоления метровой толщ
 солончака в зависимости от общей промывной нормы α_1 и продолжительности перерыва
 между тактами водоподачи α_2

Номер вари- анта	Значения входных переменных		Число повтор- ностей, n_j	Приведенное остаточное засоление							Погреш- ность расчета Δ_j
	$x_1^{(j)}$, м	$x_2^{(j)}$, сут		И з м е р е н и я					Расчет по мо- дели		
				Значения до повторностям y_{ij}					Средние по вари- анту $\bar{y}_{.j}$	$\bar{y}_j$	
				$i=1$	$i=2$	$i=3$	$i=4$	$i=5$			
1	0,5	2	3	0,56	0,52	0,48	-	-	0,5200	0,5486	-0,0286
2	0,5	4	4	0,38	0,37	0,29	0,27	-	0,3275	0,3310	-0,0035
3	1,0	2	4	0,22	0,21	0,17	0,13	-	0,1825	0,1768	0,0057
4	1,0	4	5	0,11	0,11	0,09	0,08	0,07	0,0920	0,0804	0,0116

Отношение $F = s_1^2 / s_2^2 = 1,06$. По статистическим таблицам (например, /4/) при уровне значимости $\alpha = 0,05$ находим $F_{\alpha, p, n-p} = F_{1,12} = 4,75$. Поскольку F меньше, чем $F_{1,12}$, то гипотеза о равенстве s_1^2 и s_2^2 может быть принята и модель можно признать адекватной.

Можно видеть, что для оценки адекватности модели обязательно нужны наблюдения в повторностях. При этом количество параметров должно быть меньше количества вариантов опыта (именно вариантов, а не суммарного числа повторностей N во всех вариантах). Примененный критерий Фишера чувствителен к нормальности распределений, поэтому необходима предварительная проверка гипотезы о нормальности распределения как погрешностей, так и отклонений от среднего в повторностях, т.е. разностей $y_{ij} - \bar{y}_j$.

Если адекватность не удастся оценить из-за того, что не является нормальным распределение отклонений в повторностях, то целесообразно изменить выходную переменную модели или переменную отклика. Чаще всего требуется устранить асимметрию, для чего при небольших n_{ij} достаточно применить логарифмическое преобразование: в качестве выходной переменной модели вместо y_{ij} взять $\ln y_{ij}$ или $\log_{10} y_{ij}$.

Если же адекватность не удастся оценить из-за того, что не является нормальным распределение погрешностей, как на рис. 7б, или 7в, то

а) есть очень большие выбросы значений измеренных величин; надо проанализировать источники их появления и возможность исключения некоторых данных из рассмотрения, например, на основе статистической выбраковки;

б) здесь также целесообразно преобразование выходной переменной; например, формулировка модели относительно $\ln y$ может улучшить положение;

в) наличие качественное несоответствие расчетных и измеренных зависимостей; тогда модель нуждается в улучшении; направления улучшения могут указать показатели качества моделей, которые рассмотрены ниже.

В случаях, когда модель имеет единственную входную переменную (например, время), распределение погрешностей может достоверно отличаться от нормального из-за того, что форма расчетной кривой не совпадает с формой графика измеренной зависимости. Для проверки гипотезы о сходстве формы измеренной и рассчитанной кривых применяется статистика $\hat{\alpha}$ — коэффициент автокорреляции погрешностей,

т.е. коэффициент корреляции двух рядов: $\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_{k-1}$ и $\Delta_2, \Delta_3, \dots, \Delta_k$. Смысл использования этой величины состоит в следующем. Если погрешности образуют серии из величин одного знака и эти серии чередуются, то положительным Δ_j будут скорее всего соответствовать положительные Δ_{j+1} , а отрицательным Δ_j - отрицательные же Δ_{j+1} . Поэтому можно ожидать высоких положительных величин ε . Если же знаки погрешностей четко чередуются, то положительным Δ_j будут соответствовать отрицательные Δ_{j+1} , и можно ожидать высоких отрицательных ε . В обоих рассмотренных случаях экспериментальная зависимость как бы колеблется около расчетной кривой - случай, показанный на рис.7г.

Проверяемая статистическая гипотеза состоит в недостоверности отличия ε от нуля. Формула для вычисления ε имеет вид:

$$\varepsilon = \frac{(k-1) \sum_{j=1}^{k-1} \Delta_j \Delta_{j+1} - \sum_{j=1}^{k-1} \Delta_j \sum_{j=1}^{k-1} \Delta_{j+1}}{\sqrt{[(k-1) \sum_{j=1}^{k-1} \Delta_j^2 - (\sum_{j=1}^{k-1} \Delta_j)^2] [(k-1) \sum_{j=1}^{k-1} \Delta_{j+1}^2 - (\sum_{j=1}^{k-1} \Delta_{j+1})^2]}} \quad (18)$$

Критические значения $\varepsilon_{кр}$ для уровня значимости 0,05 указаны в табл.5 (для других α см./10/). Если $|\varepsilon| < \varepsilon_{кр}$, то можно полагать, что формы расчетной и измеренной кривых схожи.

Таблица 5

Критические значения коэффициента автокорреляции погрешностей при $\alpha = 0,05$

k	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$\varepsilon_{кр}$	0,997	0,950	0,878	0,811	0,755	0,707	0,666	0,632	0,602

k	13	14	15	16	17	18	19	20	21
$\varepsilon_{кр}$	0,576	0,553	0,532	0,514	0,497	0,482	0,468	0,456	0,444

k	22	23	24	25
$\varepsilon_{кр}$	0,433	0,422	0,413	0,404

Рассмотрим пример. Ряд наблюдений за скоростью впитывания воды в почву представлен в табл.6. Модель, описывающая зависимость скорости впитывания V от времени t , взята в виде

$$V = b_2 + (b_1 - b_2) \exp(-b_3 t),$$

Таблица 6.

Результаты измерений и расчетов средней скорости впитывания
воды в почву

Номер варианта	Период наблюдений, ч	Средняя скорость впитывания, см·ч		Погрешности расчета Δ_j
		Измерения $\bar{U}_j$	Расчет по модели $\bar{U}_j$	
I	0 - 2	4,27	4,23	0,04
2	2 - 4	4,00	3,88	0,12
3	4 - 6	3,76	3,58	0,18
4	6 - 8	3,39	3,32	0,07
5	8 - 12	2,98	3,01	-0,03
6	12 - 16	2,62	2,70	-0,08
7	16 - 20	2,42	2,47	-0,05
8	20 - 24	2,29	2,31	-0,02
9	24 - 28	2,23	2,19	0,04
10	28 - 31	2,20	2,12	0,08
11	31 - 36	2,07	2,05	0,02
12	36 - 40	2,06	2,00	0,06
13	40 - 44	1,95	1,97	-0,02
14	44 - 48	1,92	1,95	-0,03

так что средняя за время от t_1 до t_2 скорость впитывания равна

$$\bar{U}_j = b_1 + (b_2 - b_1) [\exp(-b_3 t_1) - \exp(-b_3 t_2)] / [b_3 (t_2 - t_1)] \quad (19)$$

Значения параметров: $b_1 = 4,43$; $b_2 = 1,89$; $b_3 = 0,082$. Подсчет сумм, входящих в формулу для χ^2 , дает: $\sum \Delta_j = 0,41$; $\sum \Delta_{j+1} = 0,34$; $\sum \Delta_j^2 = 0,0759$; $\sum \Delta_{j+1}^2 = 0,0752$; $\sum \Delta_j \Delta_{j+1} = 0,0489$ и значение χ^2 равно 0,591. Согласно табл.5, при $\alpha = 0,05$ и $K = 14$ имеем $\chi_{кр}^2 = 0,553$ и $\chi^2 > \chi_{кр}^2$, т.е. имеет место различие форм расчетной и измеренной кривых. Этого можно было ожидать, судя по данным последнего столбца табл.6: сначала серия положительных погрешностей, потом серия отрицательных, потом опять серия положительных - измеренная кривая как бы "вьется" вокруг расчетной.

Заметим, что при этом погрешности модели невелики - относительная погрешность не достигает и 0,06. То есть такая модель вполне может быть адекватна и она может годиться для практических целей, но какой-то механизм она не отражает.

Иногда для характеристики качества моделей приводят величину

Таблица 7

Результаты измерений и расчетов дополнительного запаса влаги в почву близ лесополосы в зависимости от приведенного расстояния от лесополосы

Номер варианта i	Приведенное расстояние x_1	Дополнительный запас влаги, $\text{м}^3 \cdot \text{м}^{-3}$		Погрешность расчета Δ_j
		Измерения $\bar{y}_j$	Расчет y_j	
1	2,5	0,055	0,0641	-0,0091
2	5,0	0,030	0,0401	- 0,0101
3	7,5	0,020	0,0274	-0,0074
4	10,0	0,015	0,0201	-0,0051
5	12,5	0,012	0,0155	-0,0035
6	15,0	0,008	0,0124	-0,0044
7	17,5	0,006	0,0102	-0,0042
8	20,0	0,004	0,0086	-0,0046

коэффициента корреляции между вычисленными и измеренными величинами (т.е. между y_j и $\bar{y}_j$). И когда его величина высока, утверждают, что модель хорошо воспроизводит данные опыта. Пример, приводимый ниже, показывает, что это может быть и не так.

Рассмотрим модель и экспериментальные данные по увеличению влагозапасов в почве за лесной полосой, полученные в ходе агролесомелиоративных исследований. Для описания опытных данных в зоне каштановых почв была построена эмпирическая модель, выражающая зависимость дополнительного запаса влаги в почве близ лесополосы от расстояния от лесополосы L , отнесенного к ее высоте H : $y = b_1 / [1 + (x_1 / b_2)^{b_3}]$ с параметрами $b_1 = 0,1$; $b_2 = 3,77$; $b_3 = 1,415$. Значения y в $\text{м}^3 \cdot \text{м}^{-3}$, $x_1 = L/H$. Севернее на южных черноземах были также получены экспериментальные значения дополнительного запаса влаги. В табл. 7 представлены эти данные и результаты расчетов по модели, разработанной для каштановых почв. Видно, что все погрешности имеют один и тот же знак, т.е. модель дает систематическую погрешность. Но коэффициент корреляции между y и $\bar{y}$ равен 0,9972 – это очень высокое значение, но его величина вовсе не характеризует пригодность модели. Есть и другие варианты зависимости погрешности от измеренных величин, когда коэффициент корреляции y и $\bar{y}$ дает неверную информацию о качестве модели.

Более эффективный способ оценки качества модели на основе сопоставления погрешностей с измеренными величинами состоит в использовании уравнения линейной регрессии.

$$\Delta = \alpha_2 \bar{y} + \alpha_1 \quad (20)$$

При этом могут быть проверены две статистические гипотезы:

- 1) недостоверность отличия α_1 от нуля, означающая отсутствие систематической погрешности, и
- 2) недостоверность отличия α_2 от нуля, означающая отсутствие зависимости погрешности от значений измеряемых величин, т.е., что не реализуются ситуации типа изображенных на рис.7д и 7е.

Статистиками для проверки этих гипотез служат величины

$$t_1 = \bar{a}_1 / s_{\bar{a}_1} \quad \text{и} \quad t_2 = \bar{a}_2 / s_{\bar{a}_2}, \quad (21)$$

где $\bar{a}_1$ и $\bar{a}_2$ - оценки средних значений α_1 и α_2 , $s_{\bar{a}_1}$ и $s_{\bar{a}_2}$ - оценки ошибок этих средних. Формулы для вычисления таковы:

$$\bar{a}_2 = \frac{K s_5 - s_1 s_3}{K s_2 - s_1^2}; \quad \bar{a}_1 = \frac{s_3 - \bar{a}_2 s_1}{K}; \quad (22)$$

$$s_{\bar{a}_2} = \sqrt{K s_7 / (K s_2 - s_1^2)}; \quad s_{\bar{a}_1} = s_{\bar{a}_2} \sqrt{s_2 / K}.$$

Здесь $s_1 = \sum_{j=1}^K \bar{y}_j$; $s_2 = \sum_{j=1}^K \bar{y}_j^2$; $s_3 = \sum_{j=1}^K \Delta_j$; $s_4 = \sum_{j=1}^K \Delta_j^2$; $s_5 = \sum_{j=1}^K \Delta_j \bar{y}_j$;

$$s_7 = (s_4 + \bar{a}_2^2 s_2 - 2 \bar{a}_2 s_5 - K \bar{a}_1^2) / (K-2).$$

Для проверки гипотезы следует нужную статистику - t_1 или t_2 - сравнить с критическим значением $t_{K-2, 1-\alpha/2}$ распределения Стюдента с $K-2$ степенями свободы и уровнем доверительной вероятности α . Если $t_1 < t_{K-2, 1-\alpha/2}$, то можно полагать, что систематической погрешности у модели нет. Если $t_2 < t_{K-2, 1-\alpha/2}$, то можно считать, что погрешности модели не зависят от диапазона, в котором находится измеряемая величина.

Рассмотрим примеры. Для начала возьмем данные табл.7, для которых мы ранее отметили наличие систематической погрешности. Находим: $s_1 = 0,15$; $s_2 = 4,81 \cdot 10^{-3}$; $s_3 = -4,86 \cdot 10^{-2}$; $s_4 = 3,38 \cdot 10^{-4}$; $s_5 = -1,115 \cdot 10^{-3}$; $\bar{a}_2 = -0,1212$; $\bar{a}_1 = 3,79 \cdot 10^{-3}$; $s_7 = 2,370 \cdot 10^{-6}$; $s_{\bar{a}_2} = 3,44 \cdot 10^{-2}$; $s_{\bar{a}_1} = 8,45 \cdot 10^{-4}$; $t_6; 0,975 = 2,447$; $t_4; 49$; $t_2 = 3,52$.

Таблица 8

Результаты измерений и расчетов испарения влаги из почвы
в зависимости от влажности почвы

Номер варианта j	Влажность почвы x_1 кг·кг ⁻¹	Испарение из почвы, м ³ ·м ⁻² ·сут ⁻¹		Погреш- ность расчета Δ_j
		Измерения $\bar{y}_j$	Расчет $\bar{y}_j$	
I	0,10	0,096	0,0975	-0,0015
2	0,12	0,120	0,1006	0,0194
3	0,15	0,120	0,1132	0,0068
4	0,18	0,120	0,1451	-0,0251
5	0,20	0,144	0,1832	-0,0392
6	0,23	0,264	0,2708	-0,0068
7	0,27	0,384	0,4276	-0,0436
8	0,30	0,552	0,5439	0,0081
9	0,33	0,696	0,6378	0,0582
10	0,35	0,744	0,6875	0,0585
11	0,40	0,792	0,7617	0,0303
12	0,45	0,864	0,7992	0,0648

Поскольку $t_1 > t_{6;0,975}$, то модель имеет систематическую погрешность. Поскольку $t_2 > t_{6;0,975}$, то налицо достоверное влияние величины $\bar{y}_j$ на Δ_j . Действительно, как видно из табл.7, по мере снижения $\bar{y}_j$ уменьшаются и Δ_j .

Другой пример построен по данным о влиянии влажности почвы на интенсивность испарения влаги из почвы под действием ветра, приведенным в табл.8. Эмпирическая модель выбрана в виде

$$\bar{y} = b_1 / [1 + (x_1/b_2)^{b_3}] + b_4.$$

Здесь x_1 - влажность почвы, кг·кг⁻¹, значения параметров $b_1=0,744$, $b_2=0,27$; $b_3=6$; $b_4=0,096$. Подсчет величин, необходимых для применения рассматриваемых критериев качества модели, дает $s_1=4,896$; $s_2=3,007$; $s_3=0,129$; $s_4=0,01653$; $s_5=0,1443$; $s_6^2=0,00678$; $\bar{\alpha}_1=-0,0261$; $\bar{\alpha}_2=0,0905$; $s_{\bar{\alpha}_1}=0,0131$; $s_{\bar{\alpha}_2}=0,0261$; $t_{11;0,975}=2,228$; $t_1=2,00$; $t_2=3,47$.

Поскольку $t_1 < t_{11;0,975}$, то модель не имеет систематической погрешности. Так как $t_2 > t_{11;0,975}$, то зависимость погрешности от величины выходной переменной имеет место. И действительно, просмотр

таблицы показывает, что малым $\bar{U}$ соответствуют, в основном, отрицательные, а большим — положительные погрешности.

В целом для оценки модели необходимо проверить гипотезы об адекватности (по показателю t_2 согласно (16)–(17), соответствия формы расчетных и измеренных зависимостей (по показателю $\bar{x}$ согласно (18)), отсутствия систематической погрешности (по показателю α_1 согласно (20)) и отсутствия зависимости погрешности от величины выходной переменной (по показателю α_2 согласно (20)). Применять можно только адекватную модель. Для ее характеристики полезно указать квантили распределения погрешностей, например, "в 90% случаев абсолютная погрешность не превосходит $\pm 1,2$, а относительная — $\pm 0,17$ ".

В последнее время все чаще возникает задача сравнения разных моделей, разработанных для описания одного и того же явления или процесса. Эти задачи также решаются на основе статистических критериев.

Мы рассмотрим статистический критерий, предложенный Вильямсом и Клутом. Пусть есть две модели, имеющие переменные отклика Y'_j и Y''_j и дающие погрешности Δ'_j и Δ''_j , $j = 1, 2, \dots, K$. Подсчитывают величины $V_j = \frac{1}{2}(\Delta'_j + \Delta''_j)$ и $U_j = \Delta'_j - \Delta''_j$. После этого строят регрессию V на U вида

$$V = \alpha_2 U$$

и вычисляют статистику $t_2 = \bar{\alpha}_2 / \delta \bar{\alpha}_2$, где $\bar{\alpha}_2$ — оценка среднего значения α_2 , а $\delta \bar{\alpha}_2$ — оценка ошибки этого среднего. Чтобы вычислить t_2 достаточно подсчитать суммы $\delta_2 = \sum_{j=1}^K U_j^2$, $\delta_4 = \sum_{j=1}^K V_j^2$,

$\delta_5 = \sum_{j=1}^K U_j V_j$ и средний квадрат неадекватности

$$S_2^2 = (\delta_4 \delta_2 - \delta_5^2) / [\delta_2 (K-1)].$$

Тогда будем иметь $\bar{\alpha}_2 = \delta_5 / \delta_2$ и $\delta \bar{\alpha}_2 = \delta_1 / \sqrt{\delta_2}$.

Величину $|t_2|$ следует сравнить с критическим значением распределения Стьюдента $t_{K-1; 1-2/2}$ с $K-1$ степенью свободы на уровне доверительной вероятности $1-2/2$. Если $|t_2| > t_{K-1; 1-2/2}$, то модели различаются, причем при $t_2 < 0$ лучше вторая модель, а при $t_2 > 0$ — первая.

Рассмотрим пример. В условиях аридной зоны при промывках потери на испарение зависят от интенсивности водоподачи и, следовательно, от интенсивности удаления промывной воды. В табл.9 сведены экспериментальные данные и результаты расчетов по уравнениям

Таблица 9

Результаты измерений и расчетов отношения испарения к суммарной водоподаче в зависимости от интенсивности водоподачи при промывках для условий Средней Азии

Номер варианта	Удельная водоподача, л-га - I сек - I α_1	Отношение испарения к суммарной водоподаче			Погрешности расчетов	
		Измерения $\bar{Y}_j$	Расчет		I-я модель Δ'_j	2-я модель Δ''_j
			I-я модель Y'_j	2-я модель Y''_j		
I	0,40	0,79	0,71	0,79	0,0784	0,0020
2	0,52	0,66	0,64	0,65	0,0212	0,0110
3	0,67	0,53	0,56	0,54	-0,0281	-0,0080
4	0,73	0,50	0,53	0,51	-0,0288	-0,0049
5	0,75	0,49	0,52	0,50	-0,0293	-0,0049
6	0,86	0,44	0,47	0,45	-0,0304	-0,0072
7	0,99	0,41	0,42	0,40	-0,0085	-0,0070
8	0,99	0,42	0,42	0,40	0,0015	0,0170
9	1,05	0,39	0,40	0,39	-0,0065	0,0042
10	1,24	0,34	0,33	0,34	0,0059	-0,0011
11	1,30	0,34	0,32	0,33	0,0234	0,0106
12	1,40	0,30	0,29	0,31	0,0107	-0,0118
13	1,65	0,27	0,23	0,28	0,0390	-0,0061
14	1,81	0,25	0,20	0,26	0,0500	-0,0079

двух эмпирических моделей: $Y' = b_1 \exp(-b_2 \alpha_1)$ при $b_1 = 1,02$; $b_2 = 0,90$ и $Y'' = b_1 \alpha_1^{-b_2}$ при $b_1 = 0,40$; $b_2 = 0,74$. Расчеты V и U , а затем величин, входящих в формулу для t_2 , дали $\Delta_2 = 0,0148$; $\Delta_4 = 0,0042$; $\Delta_5 = 0,0069$; $\Delta_7 = 0,0087$; $\bar{\alpha}_2 = -0,469$; $\bar{\alpha}_2 = 0,0715$ и $t_2 = -6,56$. Критическое значение $t_{13;0,975} = 2,16$. Имеем $|t_2| > t_{13;0,975}$ и модели неравноценны, а т.к. $t_2 < 0$, то вторая модель лучше. Это можно было предположить, просматривая табл.9. Но для доказательства преимущества одной модели над другой нужен статистический критерий.

Почему возникают разные модели для описания одного и того же явления или процесса? Во-первых, возможна разная глубина исследования. Для примера можно рассмотреть эмпирическую модель вида

(18), хорошо описывающую процесс. С другой стороны, существует полуэмпирическая модель (7), описывающая влагоперенос в почве, и полученная дедуктивно, с учетом вклада некоторых процессов. Эта модель также способна описывать инфильтрацию.

Неверно думать, что полуэмпирическая модель обязательно будет лучше эмпирической, или наоборот. Только оценка их адекватности и сравнение могут позволить отдать предпочтение одной из них.

Вторая причина появления разных моделей заключается в множественности (плюрализме) системных представлений. Системный подход весьма тесно связан с математическим моделированием. Широко распространено следующее определение: "Совокупность любым способом выделенных из остального мира реальных или воображаемых элементов является системой, если 1) заданы связи, существующие между этими элементами, 2) каждый из элементов внутри системы считается неделимым, 3) с миром вне системы она взаимодействует как единое целое, 4) при эволюции во времени совокупность будет считаться одной системой, если между ее элементами в разные моменты времени можно провести взаимно однозначное соответствие". Использование понятия системы и системного анализа весьма ценно, когда обсуждают выделение набора процессов для включения в полуэмпирическую модель, или набор факторов, описание которых должно включаться в эмпирическую модель. В соответствии с представлениями современной системной методологии /14/ любой объект и явление могут быть рассмотрены как система. Системные представления об одном и том же объекте (явлении) могут быть разными, и следовательно, могут быть разными модели. Когда при построении модели движения влаги в почве (7) мы ограничивались лишь несколькими процессами влагопереноса, мы создали некую систему, имитирующую реальную совокупность процессов. Для другой системы процессов модель была бы другой.

Еще одной очевидной причиной существования нескольких моделей является то, что один и тот же ход экспериментальных зависимостей может быть описан с помощью разных эмпирических формул и всегда полезно сравнить несколько таких формул.

1.6. Подбор формул эмпирических моделей

Рассмотрим вначале эмпирические зависимости от одного аргумента. Будем опираться на грубую классификацию функций, близ графиков которых группируются экспериментальные точки (рис.8).



Рис.8. Типизация экспериментальных функций:

а - убывающая, б - возрастающая, в - с одним максимумом, г - с одним минимумом, д - с несколькими экстремумами, е - с изломом

Для монотонных - убывающих или возрастающих - функций (рис.8а или 8б) все практически применяемые формулы моделей могут быть получены из формул простейших функций с помощью четырех типов преобразований: переноса (П), растяжения (Р), степенного (С) и логарифмирования (Л). Преобразованию может подвергаться и аргумент, и функция. В табл.10 показано действие этих преобразований. При выполнении любого из преобразований П, Р или С в формулу добавляется один эмпирический параметр.

Рассмотрим действие преобразований на примере функции $f(x)=x$. Применив к аргументу растяжение, получим $f(Px)=bx$. Применив к аргументу вначале растяжение, а потом перенос, найдем $f(PPx)=b_1x+b_2$; применив затем к функции степенное преобразование, найдем $Cf(PPx)=(b_1x+b_2)^{b_3}$. Далее, применив к функции перенос, получим $PCf(PPx)=(b_1x+b_2)^{b_3}+b_4$ и т.д.

Еще примеры. Для $f(x)=\exp(-x)$ имеем $f(Px)=\exp(-b_1x)$; $Пf(Px)=\exp(-b_1x)+b_2$, $СПf(Px)=[\exp(-b_1x)+b_2]^{b_3}$. Для $f(x)=1/(1+x)$ имеем $ПРf(CPx)=b_3/[1+(b_1x)^{b_2}]+b_4$; $СПf(PPx)=(1/[1/(b_1x+b_2)]+b_3)^{b_4}$.

В качестве исходных простейших формул для построения эмпирических моделей убывающих функций (рис.8а) могут быть взяты

Таблица 10

Изменение функций при действии преобразований переноса (П), растяжения (Р) и степенного (С)*

	П	Р	С
Преобразование аргумента	$f(Пx) = f(x+b)$	$f(Рx) = bx$ $f(Рx) = x/b$	$f(Сx) = f(x^b)$
Преобразование функции	$Пf(x) = f(x) + b$	$Рf(x) = b f(x)$	$Сf(x) = [f(x)]^b$

* b - эмпирический параметр

$$f_1(x) = 1/(1+x); f_2 = 1/x; f_3 = 1-x; f_4 = \exp(-x) \quad (23)$$

для возрастающих (рис.86):

$$f_5(x) = 1/(1+1/x); f_6 = x; f_7 = \exp(x). \quad (24)$$

К этим функциям и применяют описанные преобразования. Обычно начинают с преобразования растяжения для аргумента. Тогда двух-параметрические модели для случая убывания, например, приобретают вид:

$$y = P f_1(Px) = b_2 / (1 + b_1 x); y = П f_2(Px) = b_1 / x + b_2;$$

$$y = C f_2(Px) = (b_1 / x)^{b_2}; y = P f_3(Px) = b_2 (1 - b_1 x);$$

$$y = C f_3(Px) = (1 - b_1 x)^{b_2};$$

$$y = P f_4(Px) = b_2 \exp(-b_1 x); y = П f_4(Px) = \exp(-b_1 x) + b_2.$$

Затем к аргументу и функции можно применять другие преобразования. Модель будет становиться более гибкой, способной за счет увеличения числа параметров описать более сложный ход процесса. В табл. II представлено количество параметров моделей, получающихся при различных вариантах преобразований. Некоторые сочетания преобразований дублируют друг друга, поэтому в табл. II прочерками отмечены варианты, которые нецелесообразно рассматривать.

Из табл. II видно направление подбора модели путем усложнения. Если модель с двумя параметрами неадекватна или по критериям ка-

Таблица II

Количество параметров в формулах эмпирических моделей, получаемых путем преобразований аргументов и функций

Для $f_1 = 1/(1+x)$ и $f_5 = 1/(1+1/x)$ Для $f_3(x) = 1-x$

Преобразование функции	Преобразование аргумента					Преобразование функции	Преобразование аргумента			
	P	ПР	СР	ПСР	СПР		P	СР	СПР	ПСР
P	2	3	3	4	4	P	2	3	-	4
ПР	3	4	4	5	5	П	2	3	4	-
СР	3	4	4	5	5	СР	3	-	-	5
ПСР	4	5	5	6	6	ПР	-	4	-	-
СПР	4	5	5	6	6	СПР	-	5	-	-

Для $f_2(x) = 1/x$, $f_6(x) = x$

Для $f_4 = e^{-x}$ и $f_7 = e^x$

Преобразование функции	Преобразование аргумента					Преобразование функции	Преобразование аргумента		
	P	ПР	СР	ПСР	СПР		P	СР	СПР
П	2	-	3	-	4	P	2	3	4
С	2	3	-	4	-	ПР	3	4	5
СП	3	-	4	-	5	СПР	4	5	6
ПС	-	4	-	5	-				

чества П. I.5 она неудовлетворительна, следует опробовать все варианты трехпараметрических моделей. Если по адекватности и качеству не найдется приемлемого, надо переходить к четырехпараметрическим и т.д. Такой перебор при наличии программы поиска параметров типа упомянутой ЕМРІ не будет трудоемким. В случае убывающих зависимостей его надо выполнить для каждой из функций f_1-f_4 из (23), а в случае возрастающих - для f_5-f_7 из (24). Если при одном и том же числе параметров есть несколько удовлетворительных моделей, то их можно сравнить по критерию Вильямса-Клута (п. I.5) и выбрать лучшую. Если же этот критерий не дает преимуществ сравниваемым моделям, то можно использовать любую из них, руководствуясь соображениями удобства.

Для зависимостей, на графиках которых отмечается один максимум (рис.8в) или минимум (рис.8г), также может быть использован описанный выше подход. Исходные простейшие функции имеют вид:

$$f_8 = 1/(1+x^2), \quad f_9(x) = 1-x^2, \quad f_{10} = \exp(-x^2) \quad (25)$$

для зависимостей с максимумом и

$$f_{11}(x) = 1/(1+1/x^2), \quad f_{12}(x) = x^2, \quad f_{13}(x) = \exp(x^2) \quad (26)$$

для зависимостей с минимумом.

Если экспериментальная зависимость имеет несколько экстремумов, обычно важна не столько аппроксимация с помощью формулы эмпирической модели, сколько анализ физического смысла явления. Нередко встречаются случаи, когда такая зависимость представляет собой сумму нескольких зависимостей с одним экстремумом. Тогда и формула эмпирической модели строится как сумма формул, построенных на базе (25) или (26).

Для зависимостей с изломом целесообразно не игнорировать его, а описывать каждый монотонный участок с помощью отдельной эмпирической модели. Значение независимой переменной, при котором происходит излом, будет входить в число параметров модели и зависимость этого параметра от условий опыта может дать дополнительные сведения об особенностях процесса.

Рассмотрим для примера данные о влиянии содержания обменного натрия x_1 (в долях от суммы обменных катионов) на величину коэффициента фильтрации почвы (в долях от коэффициента фильтрации в почве, где практически нет обменного натрия) при концентрации раствора 2 г.л⁻¹. Видно, что при небольших x_1 значения y_i остаются примерно постоянными; это отвечает и физико-химическим представлениям. После перехода некоторого критического значения x_1 y_i начинают быстро падать. Модель, учитывающая этот излом, может, например, иметь вид:

$$Y = \begin{cases} b_1 & \text{при } x_1 < b_2; \\ \left(\frac{x+b_3}{b_4} \right)^{b_5} & \text{при } x_1 \geq b_2. \end{cases} \quad (27)$$

Количество параметров модели может уменьшить априорная информация, вытекающая из физического смысла исследуемого явления или процесса. Скажем, в случае, отраженном (27), при $x_1 = 0$ должно быть $Y = 1$.

Номер вари- анта	x_1	$\bar{y}$
1	0,03	0,95
2	0,04	1,52
3	0,08	0,97
4	0,12	0,80
5	0,18	0,46
6	0,23	0,31
7	0,31	0,21

Т.е. $b_1=1$ и этот параметр по экспериментальным данным определять не нужно. Далее в точке излома $x_1=b_2$ величина $\bar{y}=1$, поэтому $b_4=b_2+b_3$. Т.е. b_4 известно, если известны b_2 и b_3 . В результате оказывается достаточно определить только 3 параметра: b_2, b_3, b_5 . В случаях наличия колебательной составляющей, как на рис.7г, формула модели строится на базе (23) или (24) с прибавлением периодического слагаемого вида $b_5 \sin(x/b_1 + b_2)$

Иногда для построения эмпирических моделей рекомендуют использовать алгебраические полиномы $\bar{y} = b_1 + b_2 x_1 + b_3 x_1^2 + b_4 x_1^3 + \dots$ или специальные комбинации полиномов (например, полиномы Чебышева), или дробно-рациональные аппроксимации вида $\bar{y} = P_1(x_1)/P_2(x_1)$, где P_1 и P_2 - полиномы. В задачах, связанных с изучением физических процессов, использование полиномов особенно высоких степеней не дает преимуществ, а надежность определения параметров при этом может оказаться невысокой. Следует, однако, отметить, что с помощью уравнений этого типа можно хорошо воспроизвести экспериментальные данные, полученные с высокой точностью, например, тарифовочные кривые.

Последнее замечание касается случая наличия нескольких входных переменных. Опыт показывает, что для случая более чем двух переменных угадать вид эмпирической формулы очень сложно и на практике ограничиваются множественной линейной или квадратичной регрессией. Если речь идет о двух входных переменных в эксперименте, выполненном по полному факторному плану (т.е. когда каждому значению x_1 соответствует один и тот же набор значений x_2 и наоборот), то можно рекомендовать следующий прием. Вначале находим адекватную эмпирическую модель, которая описывала бы зависимость $\bar{y}$ от x_1 при фиксированном x_2 . Затем построим зависимость параметров этой модели от x_2 и выразим их в виде эмпирических моделей, которые и подставим в формулу модели зависимости $\bar{y}$ от x_1 .

Для примера рассмотрим данные о влиянии минерализации грунтовых вод x_1 , г.л.⁻¹ и содержания илстой фракции в гранулометрическом составе x_2 на величину "параметра солевого равновесия" $\bar{y}$: отношения инфильтрационного питания грунтовых вод к их расходу в зону аэрации, при котором формируется стационарный

x_2	Параметры солевого равновесия			
	$x_1=1$	$x_1=3$	$x_1=5$	$x_1=10$
0,2	1,02	1,17	1,31	1,67
0,4	1,16	1,36	1,52	1,98
0,6	1,33	1,50	1,72	2,21

x_2	0,2	0,4	0,6
b_1	0,97	1,09	1,19
b_2	0,057	0,065	0,077
b_3	1,17	1,22	1,19

солевой баланс зоны аэрации. Зависимости $\bar{y}$ от x_1 при всех трех значениях x_2 описываются моделью $Y = (b_2 + b_1 x_1)^{b_3}$. При этом b_1 , b_2 , и b_3 изменяются с ростом x_2 .

По этим данным получаем формулы: $b_1 = 0,04 + 0,05x_2$
 $b_2 = 0,86 + 0,55x_2$,
 $b_3 = 1,2 = \text{const.}$

Подставив эти формулы в формулу для Y , имеем:

$Y = [0,86 + 0,55x_2 + 0,046x_1 + 0,05x_1x_2]^{1,2}$. После того, как структура формулы угадана, стоит напоследок уточнить числовые коэффициенты методами п. I.4.

Следует отметить, что мощные методы для упрощения построения эмпирических моделей предоставляет теория подобия и размерностей /II/. Эти методы основаны не на уменьшении числа параметров, а на уменьшении числа входных переменных модели.

Часть II. ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПЕРЕНОСА И АККУМУЛЯЦИИ ВЛАГИ, ИОНОВ И ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ В МЕЛИОРИ- РУЕМЫХ ПОЧВАХ

Наибольшее распространение в мелиоративном почвоведении получили полуэмпирические модели, реализующие идею балансовых расчетов. При составлении материальных балансов исходят из того, что изменение массы изучаемого вещества в балансовом объеме возникает за счет потоков через его границы и трансформации внутри этого объема. Поэтому, зная потоки и скорости трансформации, можно прогнозировать изменения массы. Наоборот, зная изменение массы, можно рассчитать один из потоков или скорость трансформации. В мелиоративных исследованиях рассматривают самые разные по размерам балансовые объемы: от целых оазисов до отдельных слоев в профиле почвы. К 50-м годам относится начало распространения в мелиоративном почвоведении дифференциальных уравнений сохранения массы (Н.Н.Веригин, У.Гарднер, В.В.Рачинский, С.Ф.Аверьянов), допускающих использование сколь угодно малых балансовых объемов. Исходно эти уравнения были разработаны для газов и жидкостей (в связи с этим допущение о их применимости называют гипотезой сплошности), однако впоследствии они были успешно применены для макроскопического описания массопереноса в различных многофазных природных и искусственных средах, в том числе и в почвах.

2.1. Дифференциальные уравнения сохранения массы

Введем для дальнейшего следующие обозначения: m — масса химического компонента (элемента, иона, молекулы) в единице объема почвы, J — поток массы компонента через единичное сечение почвы в единицу времени, I — скорость исчезновения компонента в единице объема почвы за единицу времени. Используют три варианта единиц измерения массы: кг, моль и экв, а также производные от них. Если, например, m измеряется в кг, то J — в $\text{кг} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{сек}^{-1}$, а I — в $\text{кг} \cdot \text{м}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$.

Исчезновение компонента может происходить либо за счет химических или биологических процессов в почве, либо при потреблении корнями растений. Если $I < 0$, то происходит внутрипочвенное производство компонента (например, при нитрификации идет производство нитратов).

В данной книге рассмотрены только одномерные движения. Это

означает, что все величины, которые будут использованы, зависят только от одной пространственной координаты – глубины, перенос рассматривается только по профилю. Считаем, что поток в направлении этой координаты положителен.

Вывод основного уравнения моделей настолько аналогичен выводу уравнения влагопереноса в п.1.3, что мы сможем воспользоваться рис.2 из этого раздела. Итак, в призматическом столбе с площадью поперечного сечения A , содержащем почвенный профиль, выделен слой почвы толщиной $2\Delta z$, расположенный между глубинами $z - \Delta z$ и $z + \Delta z$. Это – балансный объем. Он характеризуется массой компонента $M(z,t) \approx 2\Delta z \cdot A \cdot m(z,t)$. За время Δt произойдет изменение массы

$$\Delta M = M(z, t + \Delta t) - M(z, t) \approx 2\Delta z \cdot A \cdot [m(z, t + \Delta t) - m(z, t)].$$

Это изменение возникает за счет притока через верхнюю грань балансового объема $Q(z - \Delta z) \approx A \cdot \Delta t \cdot J(z - \Delta z, t)$ и оттока через нижнюю грань $Q(z + \Delta z, t) \approx A \cdot \Delta t \cdot J(z + \Delta z, t)$. Притоков и оттоков через боковую поверхность балансового объема нет в соответствии с принятым предположением об одномерности. Одновременно с притоком и оттоком идет трансформация (производство) компонента. Масса трансформированного (произведенного) компонента равна $B(z) \approx \Delta t \cdot 2\Delta z \cdot A \cdot I(z, t)$.

Уравнение сохранения массы компонента в балансном объеме имеет вид:

$$\Delta M = Q(z - \Delta z) - Q(z + \Delta z) - B(z).$$

Если подставить сюда выражения для $\Delta M, Q, B$ и перейти к пределу при $\Delta z \rightarrow 0$ и $\Delta t \rightarrow 0$, получим искомое дифференциальное уравнение сохранения массы

$$\frac{\partial m}{\partial t} = - \frac{\partial J}{\partial z} - I. \quad (28)$$

Величины m, J, I относятся ко всей почве. Удобнее, однако, выделять более или менее однородные части почвы и рассматривать содержания и потоки компонентов в каждой из них по отдельности. Обычно рассматривают по отдельности перенос и аккумуляцию в жидкой, твердой и газовой частях – "фазах" – почвы.

Дифференциальные уравнения сохранения массы внешне будут выглядеть аналогично (28). Например, для жидкой фазы

$$\frac{\partial m_{ж}}{\partial t} = - \frac{\partial J_{ж}}{\partial z} - I_{ж}. \quad (29)$$

Следует только иметь в виду, что здесь $m_{ж}$ – масса компонента в

жидкой фазе в единице объема почвы, $J_{ж}$ – поток в жидкой же фазе, а $I_{ж}$ – скорость исчезновения (производства) компонента в жидкой фазе, в частности, за счет перехода в другие фазы или прихода из них (например, при растворении-осаждении минералов). При исследовании переноса в жидкой фазе в качестве компонентов обычно рассматривают ионы, а для прочных органических соединений – их молекулы.

Формула (29) может служить основой и для получения уравнения влагопереноса. Действительно, так как масса почвенного раствора в единице объема равна φw , то, заменив в (29) $J_{ж}$ на q и $I_{ж}$ на R , немедленно получим (6).

Заметим, что $\varphi w = \theta$ – объемной влажности почвы, $\text{м}^3 \cdot \text{м}^{-3}$. Если φ и φw изменяются слабо, то при вычислении q по формуле (6а) находим

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial z} \left[\kappa \frac{\partial}{\partial z} (\psi + z) \right] - R. \quad (30)$$

Если же на перенос влаги влияет еще и градиент осмотического потенциала Ψ_s , то вводя аналогично всасывающему давлению Ψ осмотическое $\Psi_s = \Psi_s / (\varphi w g)$, получим дополнительное слагаемое в выражении для потока:

$$q = \varphi w \kappa \frac{\partial}{\partial z} (\psi + z) - \varphi w \kappa_s \frac{\partial \Psi}{\partial z},$$

где κ_s – коэффициент осмотического влагопереноса. Соответственно, видоизменится (30). Стоит, однако, иметь в виду, что по имеющимся (правда, немногочисленным) данным величина κ_s очень мала ($\sim 10^{-11} + 10^{-12} \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$) и в обычных условиях вклад собственно осмотического влагопереноса в общий макроскопический влагоперенос в профиле невелик. Однако на микроуровне (в тонких порах, прикорневой зоне) осмос может давать заметный вклад в перераспределение химических соединений и влаги.

2.2. Модели массопереноса в почвенных растворах

Для практического использования уравнения (29) нужно выразить входящие в него величины $m_{ж}$, $J_{ж}$ и $I_{ж}$ через величины, поддающиеся измерению. Основными характеристиками состава жидкой фазы почвы являются концентрации компонентов почвенного раствора (ионов, молекул, химических комплексов). При применении существующих методов извлечения почвенного раствора (вытеснение несмешивающейся

жидкостью, выдавливание при помощи пресса, центрифугирование, отсасывание и др.) разные части почвенного раствора смешиваются, и мы получаем сведения о средней по поровому объему концентрации компонентов. Только ею мы можем оперировать при моделировании.

Если бы концентрации компонента в разных частях почвенного раствора и их скорости передвижения были бы близки друг к другу (как в широкой трубе), то масса и поток компонента были бы равны

$$m_{ж} = c\theta, \quad J_{ж} = cq, \quad (31)$$

где θ — влажность в долях объема, $\text{м}^3 \cdot \text{м}^{-3}$; $q = J_w$ — поток раствора через единичное сечение в единицу времени; c — средняя концентрация, совпадающая с локальными значениями.

Почвенный раствор неоднороден, разные части его имеют разные концентрации и движутся с разной скоростью. Причиной, в частности, является то, что развитые границы раздела фаз в почвах оказывают сильное влияние на перенос воды близ них и на распределения компонентов раствора. Поэтому в силу необходимости использования в расчетах именно средних по объему концентраций в формулы (31) приходится вносить поправки на неоднородность.

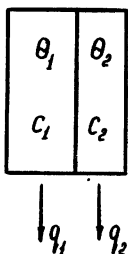


Рис. 9. Модельная система из двух трубок тока

Покажем природу этих поправок на модельной системе из двух разных трубок тока (рис. 9), в одной из которых поток равен q_1 , соответствующее ей объемное влагосодержание θ_1 , $\text{м}^3 \cdot \text{м}^{-3}$ суммарного объема, концентрация c_1 , а в другой аналогичные величины равны q_2 , θ_2 и c_2 , общее влагосодержание $\theta = \theta_1 + \theta_2$. Положим, что в каждой из трубок раствор и течение однородны и, следовательно, выполнены равенства (31). Средняя по объему концентрация раствора составит $c = [(m_{ж})_1 + (m_{ж})_2] / (\theta_1 + \theta_2) = (c_1\theta_1 + c_2\theta_2) / \theta$. Поток, вычисленный через среднюю концентрацию по (31), будет $J'_{ж} =$

$(q_1 + q_2)c$, а истинный поток $J_{ж} = q_1 c_1 + q_2 c_2$. Легко показать, что разность потоков равна

$$J_{ж} - J'_{ж} = (c_1 - c_2)(V_1 - V_2)\theta_1\theta_2/\theta, \quad (32)$$

где $V_1 = q_1/\theta_1$, $V_2 = q_2/\theta_2$ — скорости течения в трубках. Из (32) видно, что когда концентрации и скорости в трубках 1 и 2 различаются, расчет потока по средней концентрации неизбежно дает погрешность.

Характер этой погрешности можно представить, если предположить, что в трубке 2 влага почти неподвижна, а концентрация отличается от концентрации в трубке I, но связана с ней простым соотношением: $c_2 = \Gamma c_1$, где Γ можно считать постоянной. Тогда средняя концентрация $c = c_1 (\theta_1 + \Gamma \theta_2) / \theta = c_1 (1 + \gamma)$, где $\gamma = (\Gamma - 1) \theta_2 / \theta$. Потоки равны $J'_{ж} = c_1 (1 + \gamma) q$ и $J_{ж} = c_1 q$, т.е.

$$J'_{ж} / J_{ж} = 1 + \gamma. \quad (33)$$

Если концентрация в застойной зоне c_2 больше (меньше), чем концентрация в проточной c_1 , то $J_{ж}$ больше (меньше) истинного потока.

Подправить $J'_{ж}$ так, что его значение совпадало с $J_{ж}$, можно двумя способами: а) при расчете $J'_{ж}$ изменить величину q , деля ее на $(1 + \gamma)$ и б) при расчете $J'_{ж}$ изменить величину c_1 , умножая ее на $(1 + \gamma)$. Первый вариант поправки означает, что средняя скорость переноса компонента будет отличаться от средней скорости движения раствора. Двигаясь с этой эффективной скоростью переноса компонента может и опережать раствор (при $\gamma < 0$), и отставать от него (при $\gamma > 0$). Второй вариант поправки означает, что масса изучаемого компонента распределена не в объеме θ , а в объеме $\theta (1 + \gamma)$. То есть вводится "эффективная влажность почвы", которая больше (меньше) истинной при $\gamma > 0$ ($\gamma < 0$).

На примере модельной системы рис. 9 можно проследить еще одно важное явление, связанное с неоднородностью почвенного раствора. Допустим, что изначально движущийся раствор не содержал изучаемого компонента и в начальный момент наблюдений этот компонент с концентрацией c начал поступать с верхнего торца обеих трубок. Построим график зависимости концентрации раствора на выходе (так называемую выходную кривую) от времени. Пусть длина трубок равна L .

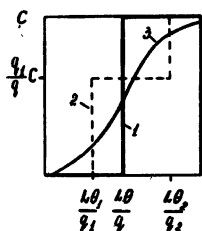


Рис. 10. Зависимость концентрации компонента в фильтрате от времени: 1 — идеальная однородная по скоростям и концентрациям трубка тока; 2 — система из двух идеальных трубок тока; 3 — почва, c — концентрация подаваемого раствора

Если бы система была идеальной и описывалась бы уравнениями (31), то через время $t = \frac{L}{V} = \frac{L\theta}{q}$ на выходе концентрация возросла бы скач-

ком от 0 до C и затем это значение сохранялось (рис.10). В модельной системе из двух трубок тока в первых порциях фильтрата концентрация компонента тоже будет равна нулю. Через время $t_1 = \frac{L}{V_1} = \frac{L\theta_1}{q_1}$ из первой трубки тока начнет вытекать раствор с нулевой концентрацией. Концентрация смеси станет $\frac{q_1}{q} C$. Это значение будет поддерживаться до момента $t_2 = \frac{L}{V_2} = \frac{L\theta_2}{q_2}$, когда из обеих трубок пойдет раствор с концентрацией C и выходная концентрация скачком изменится до C . График выходной кривой показан на рис.10. В действительности трубок тока с разными скоростями в почве множество и поэтому выходная кривая, получаемая на почвенных колонках или монолитах, обычно имеет S-образную форму, показанную на рис.10. Между трубками тока в почве идет массообмен за счет диффузии, длины трубок тока разные, поэтому явление в почве в принципе сложнее, чем в нашей модельной системе. Такой перенос вещества, осложненный различием скоростей отдельных частей раствора, называют конвективно-дисперсионным. Открыл его в почвах и впервые исследовал в 1912 г. казанский почвовед А.Н.Остриков.

Действие конвективно-дисперсионного переноса, выражающееся в размыве первоначального резкого скачка концентраций, имеет формальное сходство с действием диффузии. Поэтому такой перенос раньше называли "фильтрационной", или "конвективной" диффузией. Для его описания в моделях к потоку (31) добавляют поправку в виде диффузионного члена

$$J_{жс} = qc - D_* \frac{\partial c}{\partial z},$$

где параметр D_* - коэффициент конвективной диффузии.

С учетом поправок на неоднородность модель массопереноса в жидкой фазе приобретает вид:

$$\frac{\partial(\theta(1+\gamma)c)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_* \frac{\partial c}{\partial z} - qc \right) - I_{жс}. \quad (34)$$

По имеющимся экспериментальным данным параметр D_* обычно может быть представлен в виде:

$$D_* = \theta [D_m + \lambda V^n]. \quad (35)$$

Здесь первое слагаемое описывает вклад в конвективно-дисперсионный, перенос, вносимый молекулярной диффузией в направлении оси z , а второе слагаемое - вклад неоднородности скоростей потока. Коэффициенты (35) суть параметры конвективно-дисперсионного массо-

переноса: D_m - коэффициент продольной молекулярной диффузии компонента в почве; λ - параметр, называемый "параметром гидродинамической дисперсии", или "шагом смещения", $V=q/\theta$; n - постоянный коэффициент.

Существует и другой подход, согласно которому выделяют две жидкие фазы: разделяют поровое пространство на проточную и застойную зоны и считают, что в пределах зон различий в концентрациях нет. Если обозначить через $\bar{c}$ и $\bar{\theta}$ величины концентрации и влажности в застойной зоне, а через $\hat{c}$ и $\hat{\theta}$ - те же величины в проточной, то уравнения модели массопереноса примут вид:

$$\begin{aligned} \partial \left(\frac{\hat{\theta} \hat{c}}{\partial t} \right) &= \frac{\partial}{\partial z} \left(D_m \frac{\partial \hat{c}}{\partial z} - q \hat{c} \right) - \hat{I} - e, \\ \partial \left(\frac{\bar{\theta} \bar{c}}{\partial t} \right) &= -\bar{I} + e. \end{aligned} \quad (36)$$

Здесь e - скорость перехода компонента из проточной зоны в застойную. Чаще всего полагают, что она пропорциональна разности концентраций:

$$e = (\hat{c} - \bar{c})/\tau, \quad (37)$$

τ - характерное время массообмена зон.

При использовании (36)-(37) обычно считают, что $\theta = \text{Const}$, а θ - переменная величина, $\hat{\theta} = \theta - \bar{\theta}$. Тогда параметрами массопереноса оказываются $\bar{\theta}$, τ , D_m , λ , n . Иногда упоминают о желательности введения нескольких однородных жидких фаз, но практического использования такие модели пока не находили.

Модели (34) и (36), (37) обычно должны использоваться совместно с моделью влагопереноса (5), т.к. в состав коэффициентов уравнений входят величины влажности θ и потока влаги q . Есть, однако, случаи, когда θ и q можно приближенно в течение некоторых промежутков времени считать постоянными (эксперименты на почвенных колонках, рисосеяние, промывки исходно почти влагонасыщенных почв, длительное затопление, испарение из близкозалегающих грунтовых вод, перенос интенсивно взаимодействующих с твердой фазой компонентов, например, тяжелых металлов). Тогда детальные расчеты влагопереноса не нужны.

2.3. Модели трансформации состава почвенного раствора

Мы рассмотрим величины I_{xc} , входящие в (29) и характеризующие скорость исчезновения компонентов почвенного раствора. Можно выделить три группы явлений, приводящих к трансформации химического

состава раствора: а) процессы, происходящие в жидкой фазе; б) массообмен раствора с другими фазами почв; в) трансформация раствора в связи с потреблением из него влаги и растворенных веществ растениями.

Таблица 12

Эмпирические модели интенсивности $I_{ж}$ трансформации (потребления) компонентов в зависимости от их концентрации в почвенном растворе

Номер формулы	$I_{ж}/\theta$	Название моделируемого процесса	Изменение концентрации в растворе в отсутствие переноса при начальном значении
(38)	k_0	Реакция нулевого порядка	$C = C_0 - k_0 t$
(39)	$k_1 C$	Реакция первого порядка	$C = C_0 \exp(-k_1 t)$
(40)	$k_2 C^2$	Реакция второго порядка	$C = \frac{C_0}{1 + k_2 C_0 t}$
(41)	$k_n C^n$	Реакция n -го порядка	$C = \frac{C_0}{\left(1 + \frac{k_n C_0^{n-1} t}{n-1}\right)^{1/(n-1)}}$
(42)	$k_3 C(C_m - C)$	Автокаталитическая реакция второго порядка	$C = \frac{C_m}{1 + \left(\frac{C_m}{C_0} - 1\right) \exp(C_m k_3 t)}$

В качестве процессов трансформации в жидкой фазе обычно рассматривают комплекс химических и биохимических реакций, вызывающих нитрификацию, денитрификацию, сульфатредукцию, деградацию биопидов и т.п. Важность этих процессов в мелиоративной теории и практике становится все более очевидной. Так, длительные периоды переувлажнения приводят к интенсивной денитрификации и могут сводить на нет эффект от применения азотных удобрений. Развитие сульфатредукции ведет к ухудшению структуры почвы. Скорость деградации биопидов влияет на сроки сельскохозяйственных работ и поступление биопидов в продукцию, и так далее.

Если на разложение изучаемого компонента не оказывает влияние концентрация продуктов разложения, то моделью для описания кинетики трансформации может служить уравнение кинетики реакции n -ного порядка: $I_{ж} = \theta k_n C^n$. Выражения для $I_{ж}$ при наиболее часто встречающихся значениях n приведены в табл.12. Там же приведены зависи-

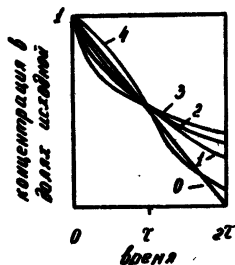


Рис. II. Изменение концентрации компонента в растворе при разных моделях кинетики трансформации в случае одинакового времени полураспада τ ; 0, 1, 2, 3 — модели кинетики 0-го, 1-го, 2-го и 3-го порядков; 4 — автокаталитическая реакция 2-го порядка

мости концентраций от времени, получающиеся в отсутствии массопереноса, т.е. когда уравнение модели (34) превращается в уравнение

$$\theta \frac{dc}{dt} = -I_{\text{ж}} \quad (43)$$

На рис. II сравнивается форма зависимостей $c=c(t)$, получающихся при разных моделях кинетики в качестве решений уравнения (43) с $c_0 = I$. Константы k_0, k_1, k_2, k_3 подобраны так, чтобы время полураспада совпадало. Можно видеть, что увеличение порядка кинетики ускоряет разложение на начальных стадиях и замедляет их на поздних.

Если разложение изучаемого компонента подвержено влиянию концентрации продуктов разложения, то часто к удовлетворительным результатам приводит предположение о том, что $I_{\text{ж}}$ пропорционально произведению концентрации компонента и продукта. Тогда выражение для c приобретает вид формулы (42) в табл. I2. Здесь c_m — максимально возможная концентрация продукта, $c_m > c_0$. Ход функции $c(t)$ — решения (43) при $c_m = 1,1 c_0$ показан на рис. II. Можно отметить, что кинетическая кривая имеет S-образную форму: медленная начальная фаза протекания, затем быстрое убывание и затем вновь медленное снижение.

Параметрами моделей табл. I2 являются константы кинетики трансформации k_0, k_1, k_2, k_3, k_4 , а также значение c_m для (42). Модели (38), (39) успешно применяли для описания трансформации соединений азота, модели (40), (42) — для ксенобиотиков, (42) — для сульфатредукции, а также разложения пестицидов.

В качестве процессов массообмена почвенного раствора с другими фазами почвы рассматривают положительную и отрицательную адсорбцию, ионный обмен, растворение-осаждение минералов. Эти процессы имеют важнейшее значение при мелиорациях и часто задача заключается в рациональном управлении именно этими процессами (мелиорация содовозасоленных почв, солонцов, гипсоносных почв, мелиорация оросительной воды и др.). Часто применяемые выражения сведены в табл. I3.

Таблица 13

Эмпирические модели интенсивности поступления $I_{\text{ис}}$ компонентов почвенного раствора в твердую фазу почвы в зависимости от их концентрации в растворе c

Положительная адсорбция и ионный обмен		Отрицательная адсорбция	Растворение-осаждение минералов с кинетикой I-го порядка
Равновесная модель	C кинетикой I-го порядка		
$-\int \frac{d\Delta_{\text{eq}}(c)}{dt} \frac{dc}{dt}$	$\int \frac{\Delta - \Delta_{\text{eq}}(c)}{\tau_e}$	$-\frac{\partial(\theta \cdot c)}{\partial t}$	$K_d(c - c_{\text{eq}})$

Процессы адсорбции и ионного обмена на поверхности раздела "раствор - твердая фаза" протекают быстро, но отвод продуктов реакции и приток свежего реагента в сложном поровом пространстве почвы требует времени. Поэтому априори нельзя ограничиться равновесным приближением и может понадобиться усложнение за счет введения описания кинетики и, соответственно, параметра τ_e - характерного времени адсорбции или ионного обмена.

Адсорбция обычно рассматривается для микрокомпонентов раствора - загрязнителей. Для выражения равновесного содержания адсорбента в твердой фазе $\Delta_{\text{eq}}(c)$ в зависимости от концентрации в растворе применяют уравнение Лэнгмюра $\Delta_{\text{eq}}(c) = \frac{\Delta_{\text{max}}(C/C_0)}{1 + C/C_0}$ (чаще для тяжелых металлов и уравнение Фрейндлиха $\Delta_{\text{eq}}(c) = \Delta_{\text{max}}(C/C_m)^n$ чаще для пестицидов). В этих уравнениях Δ_{max} - максимально возможное сорбируемое количество, ед. массы на кг почвы; C_0 - константа сродства; C_m - максимально возможная концентрация; n - параметр. Уравнение Лэнгмюра соответствует одинаковости сорбционных центров, а уравнение Фрейндлиха - экспоненциальному распределению сорбционных мест по энергиям адсорбции.

Феномен отрицательной адсорбции при переносе заряженных частиц обычно связывают с электростатическим отталкиванием анионов от поверхности почвенных частиц, которые в целом заряжены отрицательно. Распределение ионов разного заряда близ такой поверхности показано на рис.12. Гладкие кривые распределений ионов мысленно заменяют ступенчатыми линиями, полагая, что а) ближе, чем d_{ex} , у поверхности вообще нет анионов, а катионы, находящиеся там, относятся к ионообменной фазе, б) дальше от поверхности, чем d_{ex} ,

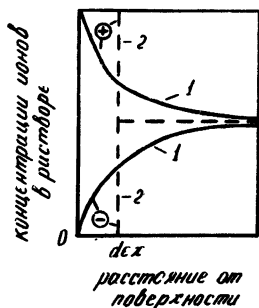


Рис.12. К определению величины нерастворимого объема влаги:

1 — реальные распределения заряженных частиц близ поверхности твердой фазы почвы; 2 — идеальное распределение, соответствующее наличию нерастворимой влаги на расстояниях, меньших d_{ex}

ти, не содержащий ионов раствора θ_* м³·м⁻³. При таком подходе модель для нахождения I_x будет — $\partial(\theta_* c)/\partial t$. Возможно, что тот же эффект дает и адсорбция молекул воды непосредственно из раствора.

Равновесные соотношения между содержаниями компонентов в жидкой и ионообменной фазах, определяющие величины z_e в табл.13, а также равновесные соотношения между концентрациями в почвенном растворе, задающие равновесные концентрации при растворении-осаждении минералов, т.е. величины c_e в табл.13, рассмотрены в п.2.4. Когда такие процессы существенны, для каждого из участвующих в них ионов должно быть записано уравнение вида (34) и в модель должны входить все эти уравнения.

Трансформация состава почвенных растворов в связи с потреблением его компонентов растениями прежде всего связана с потреблением воды, которое выражается величиной R , входящей в уравнения влагопереноса (5). Наиболее распространено задание R в виде

$$R = TP(t) \cdot \frac{\omega(z,t) \tau[\Psi(z,t), \Psi_s(z,t)]}{\int_0^{L_R} \omega(z,t) \tau[\Psi(z,t), \Psi_s(z,t)] dz} \quad (44)$$

Здесь TP — транспирация растительного покрова, м³·м⁻³·с⁻¹; ω — функция распределения активности корней по профилю; τ — поправка на влагообеспеченность; L_R — глубина корнеобитаемой зоны. В качестве ω разные авторы берут зависимости суммарной длины корней, площади поверхности корней или массы корней τ единице объема почвы от глубины z и времени t . Поправка на влагообеспеченность отражает экспериментальные данные о снижении водопотребления при чрезмерно высоких или чрезмерно низких величинах влажности. На-

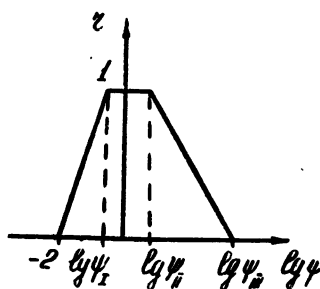


Рис.13. Зависимость коэффициента корневого водопотребления η от всасывающего давления Ψ , м, для незасоленных почв, $\lg \Psi_I = -0,3$; для люцерны $\lg \Psi_{II} = 2,34 \cdot (1 - 1,14 \cdot 10^4 E)$, а $\lg \Psi_{II} = 3,58 \cdot (1 - 0,75 \cdot 10^4 E)$, суммарное испарение E в $\text{кг} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1} / 19$

пример, для незасоленных почв принимают, что 1) $\eta = 0$ при полной влагоемкости и

возрастает по мере убывания влажности от полной влагоемкости (при возрастании Ψ от нуля); 2) начиная с некоторого значения $\Psi = \Psi_I$ значения η перестают ощутимо изменяться, растения чувствуют себя в комфортных условиях; 3) после перехода верхней границы "диапазона комфортности" Ψ_{II} с дальнейшим ростом Ψ величина η начинает снижаться и доходит до 0 при $\Psi = \Psi_{II}$, отвечающем влажности завядания. Соответствующий ход функции $\eta(\Psi)$ показан на рис.13. Значения Ψ_I и Ψ_{II} зависят от величины интенсивности суммарного испарения E .

Для засоленных почв используют зависимость η не от Ψ , а от "полного" давления $P = \Psi + \Psi_s$. Угнетающее действие повышенного осмотического давления на урожайность сельскохозяйственных культур начинает проявляться с критического значения $\Psi_{s,I}$, а при достижении величин $\Psi_{s,II}$ урожайность падает до нуля. Ориентировочные значения $\Psi_{s,I}$ и $\Psi_{s,II}$ для некоторых культур таковы:

Культура	$\Psi_{s,I}, \text{м}$	$\Psi_{s,II}, \text{м}$	Культура	$\Psi_{s,I}, \text{м}$	$\Psi_{s,II}, \text{м}$	Культура	$\Psi_{s,I}, \text{м}$	$\Psi_{s,II}, \text{м}$
Хлопчатник	30	100	Суданская тр.	20	95	Люцерна	10	55
Свекла	25	70	Пшеница	20	80	Огурец	10	40
Соя	20	35	Томаты	10	50	Кукуруза	5	35
Райграс	20	70	Рис	10	45	Лук	5	20

Значения Ψ_s можно оценить по данным о составе почвенных растворов при помощи формулы $\Psi_s = 0,3 \sum_k$, если Ψ_s в м, а сумма концентраций катионов $\sum_k$ - в $\text{мэкв} \cdot \text{л}^{-1} / 12$.

Потребление компонентов почвенных растворов растениями зависит от физиологических особенностей. При расчетных водно-солевых режимах почв его нередко не принимают во внимание ввиду того, что вы-

нос солей растениями по сравнению с запасами в почве ионов макрокомпонентов очень мал.

Если одновременно протекают несколько слабозаимодействующих процессов производства и трансформации компонента, то общая величина $I_{ж}$ получается путем суммирования $I_{ж}$ этих процессов. Например, для нитрат-иона NO_3^- при действии отрицательной адсорбции и денитрификации с кинетикой первого порядка имеем $I_{ж} = -\partial(\theta \cdot c)/\partial t + k_1 c$. Для иона кальция при действии ионного обмена, растворения гипса и кальцита получаем $I_{ж} = \rho \frac{\partial \Delta c_{eq}(C_a)}{\partial t} + k_2 \cdot CaSO_4 (C_a - C_{eq, CaSO_4}) + k_3 \cdot CaCO_3 (C_a - C_{eq, CaCO_3})$. Здесь ионный обмен принят равновесным, $k_2, CaCO_3$ и $k_3, CaSO_4$ — константы кинетики растворения.

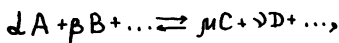
2.4. Термодинамические модели равновесных распределений ионов между фазами почвы

Наряду с массопереносом и биотрансформацией в почвенных растворах важный вклад в передвижение и аккумуляцию вещества в почвах вносит гетерогенный массообмен между тремя физическими фазами составляющими почвы — почвенным раствором, твердым скелетом и почвенным воздухом. Процессы массообмена фазовых составляющих почв действуют непрерывно в направлении приведения почвенных химических систем в равновесное состояние. Равновесные состояния характеризуются определенными соотношениями между содержаниями химических компонентов в каждой из фазовых составляющих. Такие соотношения достигаются в специальных лабораторных экспериментах, где исключены массоперенос и биотрансформация в растворе. Но они могут с известной точностью соблюдаться и в живой почве, если только гетерогенный массообмен идет намного быстрее, чем массоперенос и биотрансформация.

Знание равновесных соотношений между составами фазовых составляющих почвы позволяет охарактеризовать степень отклонения текущего состояния от равновесного. А экспериментальная информация показывает, что именно это отклонение определяет скорость массообмена раствора и других фазовых составляющих. Примеры моделей, отражающих это обстоятельство, дают вторая и четвертая формулы табл. I3. Если же равновесие гетерогенного массообмена наступает быстро, то скорость обмена раствора с другими фазовыми составляющими может быть вычислена непосредственно из равновесных соотношений. Пример этого дает первая формула в табл. I3. В связи со ска-

занным выражение равновесных соотношений между содержаниями отдельных компонентов в виде математических моделей представляет собой важный раздел моделирования в почвоведении. Ниже мы рассмотрим такие модели для отдельных ионов.

Хотя периодически появляются чисто эмпирические модели равновесий гетерогенного массообмена в почвах, основное внимание в последние годы уделяют применению термодинамических уравнений. Формула исходной модели таких уравнений остается всегда неизменной: если протекает химическая реакция



и достигнуто равновесие, то справедливо равенство

$$K = \frac{a_C^\mu a_D^\nu \dots}{a_A^\alpha a_B^\beta \dots} \quad (45)$$

Здесь $A, B, \dots, C, D, \dots$ — молекулы или ионы, участвующие в реакции; $a_A, a_B, \dots, a_C, a_D, \dots$ — активности молекул или ионов; $\alpha, \beta, \dots, \mu, \nu, \dots$ — стехиометрические коэффициенты, обеспечивающие равенство количеств атомов всех химических элементов в обеих частях уравнения реакции; K — константа равновесия реакции. Несколько примеров реакций и уравнений равновесия даны в табл. I4.

Значение термодинамической константы равновесия в соответствии с теорией зависит от температуры и давления, но остается одним и тем же независимо от того, какие еще реакции протекают в исследуемой системе. Значит, если 1) один раз достаточно точно определить значение K и 2) иметь эмпирические модели для расчета активностей компонентов, то термодинамическое уравнение равновесия реакции можно использовать всегда, когда эта реакция протекает. В этом случае (45) представляет собой модель, не требующую определения параметров. Этим и объясняется внимание к моделям на основе термодинамических уравнений.

Применение таких моделей в почвах осложняется, однако, неоднородностью почв. Термодинамические уравнения предложены для однородных фаз. Фазой в термодинамике называют однородную часть системы, отделенную от остальных частей непрерывной границей. Твердая, жидкая и газообразная фазы, рассматриваемые в физике почв, не являются термодинамическими фазами. Термодинамические фазы в

Примеры термодинамических уравнений равновесия
химических реакций в почвах

№	Реакция	Уравнение реакции	Термодинамическое уравнение равновесия	Значение константы равновесия
1.	Растворение гипса	$[\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]_T \rightleftharpoons \text{Ca}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} + 2\text{H}_2\text{O}$	$K_r = \frac{a_{\text{Ca}} a_{\text{SO}_4} \cdot a_{\text{H}_2\text{O}}^2}{a_{[\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]_T}}$	$2,5 \cdot 10^{-5}$
2.	Растворение кальцита	$[\text{CaCO}_3]_T \rightleftharpoons \text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-}$	$K_k = \frac{a_{\text{Ca}} a_{\text{CO}_3}}{a_{[\text{CaCO}_3]_T}}$	$4,5 \cdot 10^{-9}$
3.	Растворение гидроксида железа	$[\text{Fe}(\text{OH})_3]_T \rightleftharpoons \text{Fe}^{3+} + 3\text{OH}^-$	$K_F = \frac{a_{\text{Fe}} a_{\text{OH}}^3}{a_{[\text{Fe}(\text{OH})_3]_T}}$	$1,3 \cdot 10^{-38}$
4.	Диссоциация угольной кислоты	$\text{H}_2\text{CO}_3 \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{HCO}_3^-$	$K_1 = \frac{a_{\text{H}} a_{\text{HCO}_3}}{a_{\text{H}_2\text{CO}_3}}$	$4,5 \cdot 10^{-7}$
5.	Диссоциация бикарбонат-иона	$\text{HCO}_3^- \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-}$	$K_2 = \frac{a_{\text{H}} a_{\text{CO}_3}}{a_{\text{HCO}_3}}$	$4,7 \cdot 10^{-11}$
6.	Диссоциация воды	$\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{OH}^-$	$K_w = \frac{a_{\text{H}} a_{\text{OH}}}{a_{\text{H}_2\text{O}}}$	$1,0 \cdot 10^{-14}$
7.	Катионный обмен по Вэнслоу	$z_B \text{A} \Pi_{z_A} + z_A \text{B}^{z_B+} \rightleftharpoons z_A \text{B} \Pi_{z_B} + z_B \text{A}^{z_A+}$	$K_{A-B} = \frac{(\bar{a}_B)^{z_A} (a_A)^{z_B}}{(\bar{a}_A)^{z_B} (a_B)^{z_A}}$	Зависит от свойств почвы
8.	Катионный обмен по Гапону	$\text{A}_{1/z_A} \Pi + (1/z_B) \text{B}^{z_B+} \rightleftharpoons \text{B}_{1/z_B} \Pi + (1/z_A) \text{A}^{z_A+}$	$K'_{A-B} = \frac{\bar{a}_B a_A^{1/z_A}}{\bar{a}_A a_B^{1/z_B}}$	То же

Примечание. В уравнениях, относящихся к катионообменным равновесиям, Π — обменный центр с единичным отрицательным зарядом, A и B — пара обменных катионов с зарядами z_A и z_B , $\bar{a}$ — активность соединения "катион A — ионообменный центр"; при подходе Вэнслоу $\bar{a} = a_{\text{A}\Pi_{z_A}}$, при подходе Гапона $\bar{a} = a_{\text{A}_{1/z_A}\Pi}$.

почвах есть, но их огромное количество. Поэтому при применении термодинамических уравнений в почвоведении используют следующий прием. Все части твердой составляющей почвы, испытывающие один и тот же тип взаимодействия с почвенным раствором, объединяют в одну эффективную фазу. Например, все поверхности минерального и органического происхождения, участвующие в ионном обмене, относят к одной ионообменной фазе. Все частицы гипса относят к одной и той же твердой солевой фазе гипса и т.д. При этом существующие методы химического анализа почв позволяют получить средние содержания химических компонентов в таких эффективных фазах.

Такое осреднение приводит к тому, что термодинамические уравнения гетерогенного массообмена принципиально не могут выполняться в почвах точно. Осреднение обязательно приводит к возникновению погрешностей. Исследования последних лет показали, что эти погрешности невелики – обычно не более 10%. С этой точностью термодинамические уравнения гетерогенных равновесий могут использоваться и для почвенных химических систем. Здесь мы имеем еще один пример того, как необходимость работы с осредненными величинами осложняет применение фундаментальных соотношений в почвах (ср. п. 2.2).

Активности химических компонентов определены как величины, при подстановке которых в термодинамические уравнения последние выполняются точно. Это определение не указывает на возможный алгоритм или способ расчета. Существуют самые разнообразные подходы к расчету активностей.

Начнем с активностей в растворах. Для некоторых молекул активность в растворе можно измерить. Активность ионов в принципе измерить нельзя. Так называемое измерение активностей с помощью ионоселективных электродов есть не что иное как сравнение активности измеряемого иона с активностью иона хлора. А относительно способа расчета активности иона хлора в аналитической химии существует специальное конвенциональное соглашение.

Отношение активности к концентрации называют коэффициентом активности: $\gamma_{Ca^{2+}} = a_{Ca^{2+}} / c_{Ca^{2+}}$, $\gamma_{CaSO_4} = a_{CaSO_4} / c_{CaSO_4}$ и т.п. Здесь c – концентрация в растворе, кмоль·м⁻³ или моль·л⁻¹, γ измеряется в м³·кмоль⁻¹, активности так же, как и константы термодинамических равновесий безразмерны. Распространенные величины концентраций ионов C в мэкв·л⁻¹ связаны со значениями c формулой $C = z \cdot c \cdot 10^3$, где z – заряд иона. Обычно для ионов в почвенных растворах активность меньше концентрации и чем сильнее взаимодействие частиц в

растворе, тем меньше активность по сравнению с концентрацией.

Мерой взаимодействия ионов в растворах является ионная сила I , которая находится по формуле: $I = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M z_i^2 C_i = \frac{1}{2000} \sum_{i=1}^M |z_i| C_i$, где M - общее число ионов в растворе, C_i и z_i - концентрация и заряд иона "i". Например, для водной вытяжки, имеющей состав $C_{Ca} = 0,1$; $C_{Mg} = 0,3$; $C_{Na} = 0,3$; $C_{HCO_3} = 0,2$; $C_{SO_4} = 0,4$; $C_{Cl} = 0,1$ мэкв.л⁻¹, ионная сила будет равна

$$\frac{I}{2} \cdot \frac{1}{1000} (2 \cdot 0,1 + 2 \cdot 0,3 + 0,3 + 0,2 + 2 \cdot 0,4 + 0,1) = \\ = 0,00125 \text{ кмоль} \cdot \text{м}^{-3}$$

Методов расчета активностей молекул и ионов в растворах существует много, они различаются по диапазону ионной силы и по составам растворов, для которых их можно применять. Наиболее распространена модифицированная формула Дебая-Гюккеля:

$$\gamma_i = \gamma_i^{z_i^2}; \lg \gamma_i = -A \sqrt{I} / (1 + B \sqrt{I}) + bI. \quad (46)$$

Здесь A , B и b - функции температуры, при 25°C их значения $A = 0,509$; $B = 1,075$; $b = 0,054$. О том, как влияют на различия активностей и концентраций заряд иона и ионная сила, дают представление следующие результаты расчетов по (46):

Заряд иона $ z_i $	Коэффициент активности γ		
	$I = 0,001$	$I = 0,01$	$I = 0,1$
1	0,96	0,90	0,77
2	0,87	0,66	0,35
3	0,73	0,39	0,09

Чем сильнее взаимодействие ионов в почвенных растворах, тем больше погрешность формулы (46). Если в растворе в заметных количествах присутствует органическое вещество в ионной форме, то формула (46) может давать ошибочные результаты. Но и в растворах, где доминируют неорганические ионы, но концентрации их высоки, нужно учитывать специфические ионные взаимодействия [12]; формулой (46) можно уверенно пользоваться лишь при значениях $I < 0,1$ моль.л⁻¹, т.е. для сульфатных и хлоридно-сульфатных растворов с минерализацией до 4 г.л⁻¹ и для хлоридных и сульфатно-хлоридных растворов с минерализацией до 5 г.л⁻¹. Коэффициент активности ней-

тральных молекул, в том числе молекул воды, в таких растворах близок к единице.

Для молекул, находящихся в составе твердых солевых фаз, обычно принимают активность равной единице. То есть, например, формула из табл. I4 для константы растворимости гипса должна быть трансформирована к виду: $K_r = a_{Ca^{2+}} a_{SO_4^{2-}} a_{H_2O}^2$, т.к. $a_{CaSO_4 \cdot 2H_2O} = 1$. Аналогично для кальцита $K_k = a_{Ca} a_{CO_2}$, для гидроксида железа $K_r = a_{Fe} a_{OH}^3$ и т.д.

Наибольшие трудности вызывает расчет активностей ионов в ионообменной фазе почвы по данным о составех фаз почвы. Все предложенные в физической химии методы основываются на гипотезах о строении однородного ионообменника. Но ионообменная фаза почв неоднородна и эти методы не работают. Поэтому при моделировании катионообменных равновесий в почвах применяют не собственно термодинамические уравнения, а полученные на их основе полуэмпирические модели селективности обмена. Считают, что активности соединений "катионообменное место" пропорциональны их долям в суммарном заряде обменных катионов: $\bar{a} = \sum f_A Y_A$, где f — коэффициент активности, а $Y_A = z_A / S$, z_A — суммарный заряд катионов A в ионообменной фазе, экв. кг⁻¹, S — суммарный заряд всех обменных катионов, экв. кг⁻¹. Тогда из термодинамического уравнения, соответствующего подходу Вейсбола (табл. I4), получают

$$K_{A-B} = K_{A-B} \int_B^z \int_A^z = a_A^{z_A} Y_A^{z_A} a_B^{-z_B} Y_B^{-z_B}, \quad (47)$$

а из уравнения, отвечающего подходу Галона (табл. I4), находят

$$K'_{A-B} = K_{A-B} f_B / f_A = a_A^{1/2} Y_A a_B^{-1/2} Y_B^{-1}. \quad (48)$$

Например, при описании обмена Ca^{2+} на Na^+ из (47) получим

$$K_{Ca-Na} = a_{Ca} Y_{Ca} a_{Na}^{-2} Y_{Na}^{-2}, \text{ а из (48) определим, что}$$

$$K'_{Ca-Na} = \sqrt{a_{Ca}} Y_{Ca} a_{Na}^{-1} Y_{Na}^{-1}$$

Слева в (47) и (48) стоят величины k и k' коэффициентов селективности обмена. Они, вообще говоря, не должны быть постоянными, т.к. непостоянны коэффициенты активности f_A и f_B . Эмпирические зависимости k и k' от состава фаз почвы должны находиться из эксперимента, причем определение этих зависимостей — наиболее трудоемкая на сегодня операция по определению параметров моделей, применяемых в мелиоративном почвоведении. Однако для некоторых почв (обычно бедных органическим веществом) величины k' остаются

постоянными в широком диапазоне изменения составов фаз. Так, для почв аридной зоны обычно довольно точно выполняется уравнение $Y_{Na}/(Y_{Ca} + Y_{Mg}) = k'_{Ca-Na} \frac{a_{Na}}{\sqrt{a_{Ca} + a_{Mg}}}$, описывающее обмен Ca^{2+} и Mg^{2+} на Na^+ . На этом в частности основывается метод оценки качества оросительной воды по величине SAR. Поскольку SAR равно $C_{Na}/\sqrt{(C_{Ca} + C_{Mg})/2} \approx 35 a_{Na}/\sqrt{a_{Ca} + a_{Mg}}$, поскольку зная k' и SAR, можно оценить отношение содержания обменного Na^+ к сумме обменных Ca^{2+} и Mg^{2+} при замене порового раствора на оросительную воду и на этом основании предсказать долговременные тенденции изменения состава обменных катионов и возможность осолонцевания. Аналогичный подход позволил с успехом использовать отношение $a_{Na}/\sqrt{a_{Ca}}$ в оросительной воде для оценки качества оросительной воды для юга Украины. Следует только иметь в виду, что значения коэффициентов селективности k' даже в аридной зоне изменяются от региона к региону, а для почв, богатых органическим веществом, сильно зависят от содержания Na^+ в ППК /12/.

Обратимся теперь к составлению моделей равновесного распределения ионов между фазами почв. Рассмотрим пример описания массообмена раствора с ионообменной фазой и твердыми солевыми фазами. В этом случае для построения модели нужно:

- 1) перечислить все рассматриваемые ионы и молекулы;
- 2) перечислить рассматриваемые эффективные фазы и ввести обозначения для содержаний рассматриваемых ионов и молекул в этих фазах;
- 3) перечислить консервативные компоненты — те ионы и молекулы, масса которых сохраняется в процессе рассматриваемых реакций, т.е. не уходит из системы в газовую фазу и не подвергается влиянию жизнедеятельности микроорганизмов;
- 4) записать для консервативных компонентов уравнения сохранения их массы во всей системе;
- 5) записать все реакции, которые принимаются во внимание;
- 6) записать для них термодинамические уравнения равновесия, заменив активности на произведения коэффициентов активности для концентрации; записать значения констант, соответствующие выбранным единицам измерения;
- 7) записать формулы для расчета активностей и коэффициентов селективности по данным о составе фаз почв;
- 8) записать формулу для ионной силы;
- 9) записать условия электронейтральности.

Выполним эту процедуру для простой модельной ситуации, когда в почву, исходно содержащую в ионообменной фазе Ca^{2+} и Na^+ , внесли гипс и добавили дистиллированную воду. Не учитываем для простоты содержания бикарбонат-ионов, ионов водорода и гидроксидов.

1. Рассматриваем Ca^{2+} , Na^+ , SO_4^{2-} .

2. Эффективные фазы: раствор, ионообменная фаза и твердая солевая фаза гипса. В растворе имеем концентрации c_{Ca} , c_{Na} , c_{SO_4} , кмоль·м⁻³, в ионообменной фазе содержания обменных катионов Δ_{Ca} , Δ_{Na} , экв·кг⁻¹, в твердой солевой фазе содержание гипса q , кг·кг⁻¹.

3. Масса Ca^{2+} , Na^+ , SO_4^{2-} сохраняются.

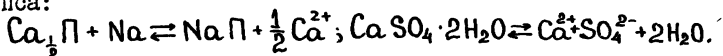
4. Уравнения сохранения массы

$$T_{\text{Ca}} = c_{\text{Ca}} w / \rho_w + \Delta_{\text{Ca}} / 2 + \zeta q; \quad T_{\text{Na}} = c_{\text{Na}} w / \rho_w + \Delta_{\text{Na}};$$

$$T_{\text{SO}_4} = c_{\text{SO}_4} w / \rho_w + \zeta q.$$

Здесь T — полное содержание иона во всех рассматриваемых фазах, моль·кг⁻¹, w — влажность, кг·кг⁻¹, ρ_w — плотность почвенного раствора, г·см⁻³, ζ — коэффициент перехода от кг гипса к моль Ca и SO_4 . Поскольку один моль $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ весит $0,040 + 0,096 + 2 \cdot 0,018 = 0,172$ кг, то в 1 кг гипса содержится $\zeta = 1/0,172 = 5,81$ моль Ca^{2+} и SO_4^{2-} .

5. Рассматриваются реакции ионного обмена и растворения-осаждения гипса:



6. Уравнения равновесия:

$$K_r \leq \sqrt{c_{\text{Ca}}} \sqrt{c_{\text{SO}_4}} c_{\text{Ca}} c_{\text{SO}_4}; \quad \Delta_{\text{Na}} / \Delta_{\text{Ca}} = K'_{\text{Ca-Na}} \sqrt{c_{\text{Na}}} c_{\text{Na}} / \sqrt{c_{\text{Ca}}} c_{\text{Ca}}.$$

Неравенство означает, что гипс после растворения может и не остаться, тогда $q = 0$.

7. Коэффициенты активности для каждого из ионов берем согласно (46):

$$\sqrt{c_{\text{Ca}}} = \sqrt{1}; \quad \sqrt{c_{\text{SO}_4}} = \sqrt{1}; \quad \sqrt{c_{\text{Na}}} = \sqrt{1}.$$

8. Ионная сила вычисляется по формуле (45).

9. Условия электронейтральности:

$$c_{\text{Ca}} / 2 + c_{\text{Na}} = c_{\text{SO}_4} / 2$$

— в растворе,

$$\Delta_{\text{Ca}} + \Delta_{\text{Na}} = S$$

— в ионообменной фазе.

Первое равенство означает, что "сумма катионов равна сумме анионов", а второе, что "сумма обменных катионов" постоянна и равна емкости катионного обмена.

Заданы: полные массы ионов в системе, емкость катионного обме-

на, влажность. Требуется узнать, как ионы распределяются между фазами: Уравнений всего 13. Незвестных — тоже ($C_{Ca}, C_{Na}, C_{Se}, C_{SO_4}, f_{Ca}, f_{Na}, f_{Se}, f_{SO_4}, I, q, \Delta Ca, \Delta Na$). Подобные и более сложные системы уравнений могут быть решены с помощью специальных программ для ЭВМ. Учебный вариант одной из таких программ носит название LIBRA.

Иногда достаточно провести простые расчеты, чтобы оценить характер равновесного распределения ионов между фазами. Для этого нужно положить активности равными концентрациям и путем исключения неизвестных свести систему уравнений к уравнению с одним неизвестным. Например, в рассматриваемом случае из уравнений сохранения массы Ca и SO_4 , а также уравнения для константы растворения гипса имеем

$$F = T_{Ca} - T_{SO_4} - (C_{Ca} - \frac{K_r}{C_{Ca}})w/\varphi_w - S(1 - Y_{Na})/2 = 0,$$

а из уравнения изотермы обмена и уравнения сохранения массы

$$C_{Ca} = \left[\frac{k' \varphi_w}{w} \frac{(T_{Na} - S Y_{Na})(1 - Y_{Na})}{Y_{Na}} \right]^2.$$

Давая Y_{Na} разные значения, можно вычислять C_{Ca} , и затем рассчитывать величину F . Значение Y_{Na} , при котором левая часть будет близка к нулю, задает искомое состояние равновесия.

Рассмотрим пример, в котором емкость обмена $S = 0,2$ экв. кг⁻¹, исходно было 10% обменного Na, внесли 0,01 кг гипса на кг почвы и прилили 0,25 кг. кг⁻¹ дистиллированной воды. Коэффициент селективности обмена $k' = 0,4$, а константа $K_r = 2 \cdot 10^{-4}$ (из-за неучета коэффициентов активности величина больше, чем в табл. 14). В этом случае $T_{Ca} = 0,2 \cdot 0,9/2 + 5,8 \cdot 0,01 = 0,138$; $T_{SO_4} = 5,8 \cdot 0,01 = 0,058$; $T_{Na} = 0,2 \cdot 0,1 = 0,02$.

Чтобы найти $Y = Y_{Na}$, применим алгоритм половинного деления:

- найдем $Y^{(1)}$, чтобы $F(Y^{(1)}) < 0$;
- найдем $Y^{(2)}$, чтобы $F(Y^{(2)}) > 0$;
- вычислим $Y^{(3)} = \frac{1}{2}(Y^{(1)} + Y^{(2)})$ и $F_3 = F(Y^{(3)})$;
- если $|F(Y^{(3)})| < 10^{-5}$, закончим вычисления, иначе перейдем к п. (д);
- если $F(Y^{(3)}) > 0$, положим $Y^{(2)} = Y^{(3)}$ и перейдем к п. (в), иначе положим $Y^{(1)} = Y^{(3)}$ и перейдем к п. (в).

Ход расчетов таков:

Y	$Y^{(1)} = 0,09$	$Y^{(2)} = 0,05$	$Y^{(3)} = 0,07$	$Y^{(3)} = 0,08$	0,075	0,0725	0,07375
F	0,0465	-0,0276	-0,0040	0,0059	0,0002	-0,0020	-0,0009

0,07438	...	0,07477
-0,0004	...	-9.10 ⁻⁶

Можно видеть, что Ca гипса вытеснил Na из ШПК - было 10%, осталось около 7,5%. Дальнейшего снижения содержания обменного Na можно добиться только путем промывки, удаляя продукты реакции обмена.

На нашем простом примере можно показать, что эффективность гипсования сильно зависит от значений коэффициента селективности обмена Ca-Na . Например, при $k' = 0,8$ мы уже имеем равновесное значение $Y_{\text{Na}} = 0,08459$, т.е. в ШПК останется 8,5% Na . В связи с этим прогнозы эффективности гипсования целесообразно вести по индивидуальным для почв значениям $k_{\text{Ca-Na}}$ и $k_{\text{Mg-Na}}$.

2.5. Граничные условия. Описание действия орошения и дренажа

Диапазон глубин, в котором моделируют массоперенос и массообмен, и который может охватывать часть почвенного профиля или весь профиль с подпочвой, в мелиорации часто называют расчетным слоем. Наряду со внутрипочвенными и внутригрунтовыми процессами управляющее действие на перенос и аккумуляцию вещества в расчетном слое оказывают потоки влаги и растворенных веществ, проходящие через границы этого слоя. Поэтому модели, описывающие массоперенос и массообмен в почвах и грунтах и имеющие вид (28), для каждой из фаз должны дополняться моделями для нахождения потоков на границах. В качестве верхней границы расчетного слоя обычно принимают поверхность почвы, где $z = 0$; положение нижней границы бывает разным. Мы рассмотрим наиболее распространенные модели потоков на границах для жидкой фазы, сведенные в табл.15.

Модель испарения с поверхности (49) включает в себя величину потенциального испарения E , $\text{кг} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$, поправку на густоту растительного покрова β и поправку на влажность верхнего слоя почвы B .

Потенциальное испарение E зависит от таких элементов метеусловий, как поток радиационной энергии, дефицит влажности воздуха, температура, скорость ветра. Если известны все эти характеристики (их получают метеонаблюдениями), то величина E может быть рассчитана с большой детальностью во времени, например, по формуле /22/ $E = (\alpha R + \phi L E_a) / (\alpha + \phi)$. Здесь R - поток радиационной энергии,

Таблица 15

Эмпирические модели потоков на границах расчетного слоя

Верхняя граница		Нижняя граница	
Причина поступ- ления (расхода) !	Формула модели	! Номер ! ! формулы ! ! Причина поступ- ления (расхода) !	! Формула модели ! ! формулы !
Влагоперенос			
Испарение с по- верхности почвы	$q = -E_p B$	Перегон через раздельный слой (49)	$q = S_w \frac{z_p - z_{re} - \sigma(z_p - z_e)}{d_p} k_p$ (55)
Осадки	$q = Q_o - \int_0^{\infty} CAI / \Delta t_o$	Сток с заданным градиентом (50)	$q = S_w k (1 + G)$ (56)
Поливы	$q = Q_i - \int_0^{\infty} CAI / \Delta t_i$	Действие дренажа (51)	$q = \Delta S_w \sigma'(z_{dr} - z_{re})$ (57)
Перенос растворенных веществ			
Испарение с по- верхности почвы	$J = 0$	Перегон через раздельный слой (52)	$J = \begin{cases} q_c / S_w, & z_{re} \leq z_e \\ q_{c2} / S_w, & z_{re} > z_e \end{cases}$ (58)
Осадки	$J = q_{c_o} / S_w$	Сток с заданным градиентом (53)	$J = q_c / S_w$ (59)
Поливы	$J = q_{c_i} / S_w$	Действие дренажа (54)	$J = q_c / S_w$ (60)

$\text{дж} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$; E_a - изотермическое испарение $E_a \approx 7,8 \cdot 10^{-9} (1 + I, I u_2) \cdot (e_s - e_2)$, $\text{кг} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$; u_2 - скорость ветра на высоте 2 м, $\text{м} \cdot \text{с}^{-1}$; e_s и e_2 - давление насыщенного водяного пара и фактическое давление водяных паров на высоте 2 м; P_a , ϕ - психрометрическая константа, $\phi = 66 P_a K^{-1}$; L - скрытая теплота испарения воды, $L = 2,25 \cdot 10^6 \text{дж} \cdot \text{кг}^{-1}$; $\alpha \approx 8,1 (T_2 - 273) P_a \cdot K^{-1}$ - производная e_s по температуре, T_2 - температура на высоте 2 м. Наблюдения метеостанций и метеопостов позволяют получить только данные о температуре T и влажности воздуха. По ним можно вычислить среднемесячные величины интенсивности потенциального испарения согласно формуле Иванова: $E = 6,94 \cdot 10^{-9} (T - 248)^2 (100 - \alpha)$, α - дефицит влажности воздуха, %.

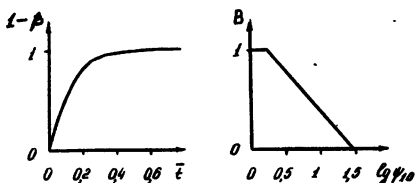


Рис.14. Поправки для расчета испарения с поверхности почвы

Поправка на плотность β зависит от фазы развития растений или от времени с момента укуса (для многолетних трав). Пример для люцерны показан на рис.14. Приведенное время $\bar{t}$ равно отношению времени с начала отрастания после укуса к продолжительности интервала между укусами. О характере поправки на влажность почвы можно судить по данным табл.8 из п.1.5. Ориентировочная зависимость β от ψ_0 , где ψ_0 - среднее всасывающее давление в верхнем десятисантиметровом слое, м, показана на рис.14.

Величина интенсивности транспирации TP , входящая в (44), равна $E(1 - \beta V)$.

Модели (50) и (51) поступления в почву осадков и оросительной воды предусматривают учет перехвата части влаги растительным покровом. В формулах моделей Δt_0 и Δt_i - интервалы времени, в течение которых происходило поступление воды с интенсивностями Q_0 , $\text{кг} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ (осадки) и Q_i , $\text{кг} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ (полив), соответственно. Величины $\int$ отражают влияние суммарного водопоступления $P_0 = \int_0^{\Delta t_0} Q_0 dt$, или $P_i = \int_0^{\Delta t_i} Q_i dt$ на количество воды, задержанной растительным покровом. Пример функции $f_0(P_0)$ по данным /23/ дан на рис.15а, характер зависимости f_i от P_i таков же, но значения f_i зависят от техники, применяемой для полива. Величина CAI - "индекс площади посева" - равна общей площади листьев и

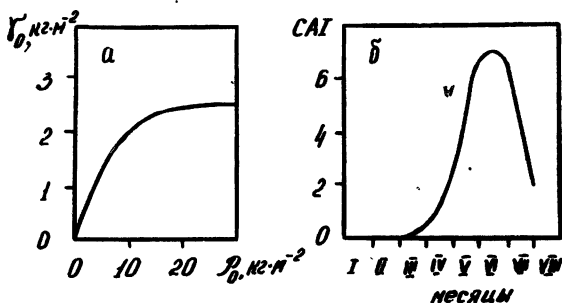


Рис. 15. Составляющие поправки на перехват осадков растительным покровом (пояснения в тексте)

стеблей на единице площади поверхности почвы. Эта величина изменяется со временем, пример для озимой пшеницы по материалам /18/ дан на рис. 15б.

Модели (52), (53) и (54), отражающие приход растворенных веществ на поверхность почвы изнутри (при испарении) и извне (при осадках и поливах) очевидны; напомним, что $\rho_w \approx 10^3 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3}$ — плотность приходящих растворов.

Перейдем к моделям для нижней границы. В целом ясно, что условие здесь не может быть задано столь же точно, как и на верхней. Поэтому желательно поместить нижнюю границу возможно глубже — в зоне аэрации подпочвы или грунтовых водах, чтобы погрешность в условии не оказывала большого влияния на расчетный ход массопереноса в почвах.

При наличии неглубоко залегающего раздельного слоя тяжелого гранулометрического состава, подстилающего более легкие породы зоны аэрации, граница может быть помещена на подошве этого слоя. Формула (55) выражает действие закона Дарси при перетоке через такой слой, имеющий коэффициент фильтрации K_p , $\text{м} \cdot \text{с}^{-1}$, и мощность d_p , м . Величина z_p — глубина подошвы слоя, $z_{гв}$ — глубина уровня грунтовых вод. Функция $\Theta(x) = x$ при $x > 0$ и $\Theta(x) = 0$ при $x \leq 0$. Ее присутствие в (55) означает, что если существует подпор и глубина z_2 свободного уровня для водоносного горизонта подземных вод под раздельным слоем меньше z_p , то $\Theta(z_p - z_2) = z_p - z_2$, в противном случае $\Theta = 0$. Значения K_p , обычно порядка 10^{-10} – $10^{-11} \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$, при меньших K_p можно считать, что раздельный слой представляет собой водоупор и $q_p = 0$.

Если раздельный слой находится глубоко (> 5 – 7 м) или литологическое строение подпочвы неясно, то используют условие (56). Гра-

низу располагают на глубинах от 2 до 5 м и принимают, что $G = \partial \Psi / \partial z = 0$, т.е. что влажность слабо меняется с глубиной и во времени. Или помещают границу неглубоко — на 2–3 м и используя данные наблюдений за режимом влажности и потенциала влаги на этой глубине. Часто оказывается, что на таких глубинах в пределах сезона градиент $\partial \Psi / \partial z$ колеблется около постоянных значений. Эти значения и задают в качестве G в (56).

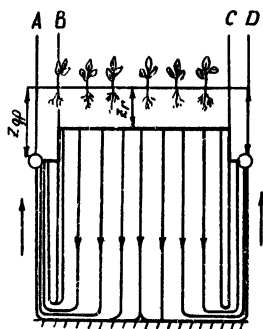


Рис.16. Схематизация течения грунтовой воды при приближенном расчете действия дренажа с помощью модели одномерного влагопереноса (пояснения в тексте)

в (55) означает, как и в (56), что если $z_{гв} > z_{др}$, то $q_v = 0$. Значения Λ зависят от междреннего расстояния, глубины раздельного слоя, фильтрационных свойств грунтов, конструктивных особенностей дренажа. Обычно $\Lambda \sim 10^{-8} - 10^{-9} \text{ с}^{-1}$.

Формулы (58)–(60) выражают предположение, что на нижней границе не нужно принимать во внимание градиенты концентраций, обусловленные дисперсией. В (58) C_2 — концентрация компонента в подземных водах.

Наряду с заданием на границах потоков может применяться задание значений потенциалов влаги и концентраций компонентов. Иногда такие условия отражают реальную геофильтрационную обстановку. Например, когда слой мелкозема подстилается слоем галечника или песка, служащим водовмещающей толщей для напорного водоносного горизонта, на границе раздела слоев z_p может быть задан постоянный напор, т.е. $\Psi = z_2 - z_p$, где z_2 — глубина свободного уровня во-

с помощью одномерных моделей, обсуждаемых в настоящем разделе, нельзя, конечно, достаточно точно описать действие дренажа. Однако приближенные расчеты возможны. Они основаны на схематизации, показанной на рис.16. Междренье (АД) разделяется на зону преимущественно нисходящего течения (ВС) и узкие придренные зоны преимущественно восходящего тока (АВ и СД). Считается, что дренаж реагирует на текущие значения разности глубины грунтовой воды $z_{гв}$ и глубины заложения дренажа $z_{др}$ с сопротивлением Λ . Присутствие функции

доносного горизонта. Однако чаще зависимости Ψ и c от времени на границах задают по данным экспериментов в контролируемых лабораторных или полевых условиях с целью определения параметров переноса.

2.6. Определение параметров массопереноса

Как отмечалось в п.1.4, параметры массопереноса в действительности являются функциями массовых концентраций компонентов, а также температуры. В практической работе вид этих функций – формула эмпирической модели – задается, а постоянные их коэффициенты, т.е. параметры эмпирических моделей, подбираются по опытным данным путем минимизации переменной отклика.

При расчетах влагопереноса, которые должны обязательно проводиться при моделировании переноса любых компонентов в почвах, параметрами переноса согласно (5) являются функции $\rho(w)$, $\kappa(w)$, $\Psi(w)$. Мы ограничимся случаем, когда ρ приблизительно можно считать постоянной величиной в интересующих нас диапазонах влажности, и будем рассматривать уравнение влагопереноса в виде (30). Функции $\Psi(w)$ обычно определяют в лаборатории или рассчитывают (см. ниже) и по данным полевых наблюдений находят только $\kappa(w)$ или $\kappa(\theta)$.

Есть два основных способа задания формулы эмпирической модели зависимости κ от θ или Ψ . Первый из них не предполагает существования связи между зависимостями $\kappa = \kappa(\theta)$ и $\Psi = \Psi(\theta)$: задают эмпирическую формулу убывающей зависимости κ от Ψ или возрастающей зависимости κ от θ . Такие формулы могут быть получены и далее усложнены методами п.1.6. Некоторые из них представлены в табл.15.

Второй способ задания эмпирической формулы влагопроводности основывается на связи между зависимостями κ от θ и Ψ от θ /13/. Идея его заключается в имитации влагопроводности системы пор почвы с помощью влагопроводности системы капилляров. Течение раствора в каждом капилляре подчиняется закону движения вязкой жидкости, и поток влаги пропорционален квадрату радиуса капилляра. Радиусы заполненных капилляров связаны со всасывающим давлением обычным соотношением $R_c \Psi \leq B = \text{Const}$. Площадь сечения пучка капилляров, имеющих радиусы в диапазоне от R_c до $R_c + \Delta R_c$, пропорциональна приращению влажности, возникающему при уменьшении всасывающего давления от B/R_c до $B/(R_c + \Delta R_c)$. Несколько формул, основанных на этом подходе, также приведены в табл.16. Хотя они более трудоемки в вычислительном отношении, чем чисто эмпирические

Некоторые эмпирические модели для расчета влагопроводности почв

Без учета связи влагопроводности и водоудерживания		С учетом связи влагопроводности и водоудерживания	
Авторы	Формула модели	Авторы	Формула модели
Гарднер	$\kappa = \frac{b_1}{1 + (\psi/b_2)^{b_3}}$	(61) Ван Генухтен	$\kappa = b_1 \xi^{1/2} [1 - (1 - \xi^{1/m})^m]^2$
Хиллел	$\kappa = b_1 \exp(-\psi/b_2)$	(62) Муалем	$\kappa = b_1 \xi^{1/2} \left[\int_{\theta_1}^{\theta} \frac{d\theta}{\psi} / \int_{\theta_1}^{\theta_2} \frac{d\theta}{\psi} \right]^2$
Аверьянов, Голованов	$\kappa = b_1 \xi^{b_2}$	(63) Нерпин	$\kappa = b_1 \int_{\theta_2}^{\theta} \frac{d\theta}{\psi^2} / \int_{\theta_2}^{\theta_1} \frac{d\theta}{\psi^2}$
Латиберт, Брукс, Кори	$\kappa = \begin{cases} b_1, & \xi > b_2 \\ b_1 \left(\frac{\xi}{b_2} \right)^{b_3}, & \xi \leq b_2 \end{cases}$	(64) Пачепский, Щербаков	$\kappa = \begin{cases} b_1 \frac{\theta - \theta(b_2)}{b_2^2} + \int_0^{\theta(b_2)} \frac{d\theta}{\psi^2}, & \psi < b_2 \\ b_1 \int_0^{\theta} \frac{d\theta}{\psi^2}, & \psi \geq b_2 \end{cases}$

Примечания. 1. Переменная $\xi = (\theta - \theta_1)/(\theta_2 - \theta_1)$, где θ_1 — порозность, θ_2 — остаточная влажность, принимаемая равной МГ, ММВ или ВЗ.

2. Значения константы m в формуле Ван Генухтена (61) равно величине параметра b_2 в эмпирической формуле для описания кривой водоудерживания $\xi = 1/[1 + (\psi/b_1)^{b_2}]$.

модели (61)-(64), в целом содержат меньше параметров и, следовательно, для них при одном и том же объеме экспериментальных данных можно ожидать более надежных значений параметров.

Отметим, что во всех формулах табл.16 параметр b_1 имеет смысл коэффициента фильтрации. Если в профиле почвы наблюдается слоистость, параметры модели влагопроводности должны быть найдены для каждого слоя в отдельности.

Для определения параметров модели влагопроводности нужны следующие данные:

а) информация об изменениях во времени влажности (или потенциала влаги) на нескольких - минимум двух-трех - глубинах внутри расчетного слоя;

б) сведения об изменениях во времени потоков влаги, влажности или потенциала влаги на границах расчетного слоя;

в) значения влажности или потенциала влаги по всему профилю расчетного слоя на момент начала наблюдений;

г) кривые водоудерживания - зависимости θ от Ψ - для каждого слоя;

д) в случае развития растений в период измерений - модель для расчета корневого водопотребления.

Методы проведения необходимых измерений описаны в работе [2]

В соответствии с содержанием п.1.4 для определения параметров нужно выбрать переменную отклика, которая достигает минимальных значений при искомым значениях параметров. Такой переменной в рассматриваемом случае может быть среднеквадратическая абсолютная погрешность Φ_a расчета влажности (или потенциала влаги), вычисленная для всех моментов измерений по всем глубинам измерений. Опыт показывает, что при измерениях потенциала предпочтительнее рассчитывать Φ_a по величинам $\lg \Psi$, а не Ψ .

Информации пп. (б)-(д) перечня данных достаточно, чтобы при любом (правдоподобном) наборе значений параметров модели влагопроводности рассчитывать влагоперенос по модели (29) на весь период наблюдений. Пример такого расчета приведен в п.1.3. Там в верхней границе задавали условие $q_z = 0$, т.е. $\partial \Psi / \partial z = -1$, а на ней - условие постоянства потенциала $\Psi = 0$. Начальное распределение потенциала по профилю и кривая водоудерживания были заданы растения отсутствовали. Для более сложных - реальных случаев и пользуются программы, реализующие на ЭВМ модель (30). Одна из них - MOIST - выполнена в учебном варианте.

Для программы, реализующей модель влагопереноса, можно зада

режим выдачи результатов, позволяющий получить расчетные значения потенциалов (или величин влажности) на тех же глубинах, где проводились измерения, и в те же моменты времени, когда они проводились. По этим данным можно вычислить значения переменной отклика, соответствующие выбранному для расчета набору значений параметров влагопроводности. Изменяя этот набор в соответствии с одним из алгоритмов поиска минимума Φ_d , например, применяя метод сканирования, описанный в п.1.4, в ходе многократных расчетов влагопереноса можно найти искомые значения параметров. Затем требуется проверка адекватности модели влагопереноса. Если адекватности нет, то нужно либо усложнить модель влагопроводности за счет введения дополнительных параметров, либо сменить формулу модели.

Желательно не всю экспериментальную информацию использовать для идентификации модели. Имеющиеся данные целесообразно разделить примерно в соотношении 1:2 (в крайнем случае 1:1) и меньшую часть использовать для идентификации модели по описанной выше схеме, а большую – для верификации модели, т.е. дополнительной оценке ее адекватности на независимом экспериментальном материале.

Рассмотрим пример организации измерений и расчетов при определении параметров модели влагопроводности в ходе опытных промывок засоленных аллювиальных почв легкосуглинистого гранулометрического состава. Слои 0–30 и 30–100 см морфологически резко различались, что было вызвано мелиоративной планировкой территории. Они различались и по плотности сложения (верхний слой уплотнен), но не по гранулометрическому составу. Поэтому параметры модели предполагали определять отдельно для каждого слоя.

Измерения вели на трех парах опытных площадок. На каждой площадке на двух глубинах – 30–35 см и 65–70 см установили по два тензиометра. На первой паре площадок водоподачу вели нарастающей разовой нормой: дали 0,1; 0,15; 0,20; 0,25; 0,30 м³·м⁻² с интервалом в трие суток. На второй паре площадок было четыре такта водоподачи по 0,25 м³·м⁻² с интервалами между тактами 2, 4 и 8 суток. На третьей паре подали 4 такта по 0,25 м³·м⁻² с интервалом в трие суток. Регистрация динамики впитывания обеспечила задание граничного условия на верхней границе в период водоподачи в виде (51) по табл.15. В промежутке между тактами поверхность почвы закрывали, чтобы максимально снизить испарение, и в расчетах предполагали, что поток влаги на верхней границе в межтактовых промежутках равен нулю, т.е. выполнено условие (52) по табл.15. До начала

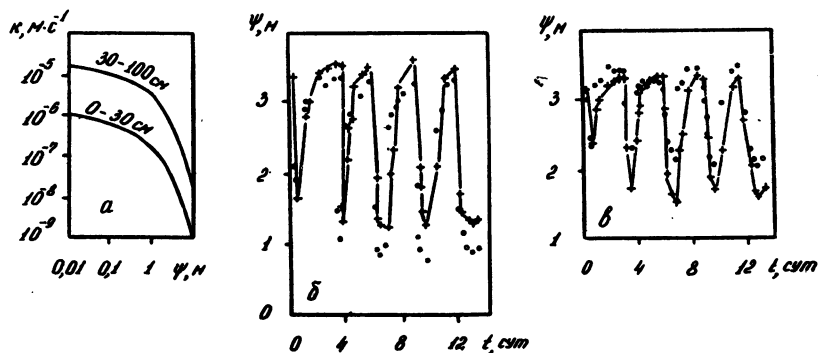


Рис.17. Результаты идентификации модели влагопроводности для двухслойного профиля легкосуглинистой аллювиальной почвы: а) зависимости влагопроводности от всасывающего давления k для двух слоев; б) соответствие расчетной (+) и измеренной (•) динамики потенциала влаги на глубине 30-35 см; в) то же, что б) для глубины 65-70 см

водоподачи и несколько раз в ходе опыта отбирали пробы на влажность по профилю для глубины 1 м в пятикратной повторности. Материалы этого опробования дали начальное распределение, контроль лабораторного определения зависимости θ от ψ и информацию для задания граничного условия на нижней границе в виде зависимости влажности от времени на глубине 1 м. Таким образом, расчетный слой был взят от 0 до 1 м.

В качестве модели влагопроводности взяли (64). При нахождении параметров по данным измерений вначале предположили, что пороговое всасывающее давление b_2 , входящее в (64), одно и то же для обоих слоев, и по опыту работ для легких почв [13] приняли $b_2 = 2$ м. В результате минимизации Φ_h по данным с первой пары площадок по двум параметрам - $b_{I(0-30)}$ и $b_{I(30-100)}$ пришли к зависимостям k от ψ , показанным на рис.17а, и соответствию измеренной и расчетной динамики ψ , показанному на рис.17б. Расчет F -статистики согласно п.1.5 показал, что модель адекватна. Верификация модели, выполненная по данным со второй и третьей пар площадок показала, что и здесь используемая модель влагопереноса адекватна. Усложнение модели за счет дополнительного поиска ве-

личин b_2 или смена модели влагопроводности не понадобились.

Если не считать того, что верхние тензиометры следовало бы разместить в слое 0-30 см и количество тензиометров должно было бы быть значительно большим, описанное исследование /5/ представляет собой удовлетворительный пример работ по идентификации модели влагопроводности. Другие схемы организации работ, использующие регистрацию режима влажности под растениями, можно найти в статьях /9,15/.

Теперь обратимся к определению параметров конвективно-дисперсионного переноса. Для модели (35) это постоянные коэффициенты γ , λ , n , а для (36)-(37) — θ , τ , λ , n . Кроме них в число параметров входит величина коэффициента продольной молекулярной диффузии D_m , которая зависит от влажности. Она обычно вносит небольшой вклад в дисперсию и ее значение достаточно оценивать по формуле $D_m/D_{m_0} = 0,11 (3 - \lg \psi)$, $1 < \psi < 100$ м. При $\psi < 1$ м отношение $D_m/D_{m_0} \approx 0,3 + 0,5$. Величина D_m — коэффициент молекулярной диффузии рассматриваемого компонента в водном растворе, для иона Cl^- , например, $D_{m_0} = 2 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$.

К перечню данных для определения параметров модели влагопроводности следует теперь добавить:

е) информацию об изменениях содержания изучаемого компонента в жидкой и других (если он там присутствует) фазах почвы на нескольких (минимум двух глубинах внутри расчетного слоя;

ж) сведения о концентрации компонента в растворах, поступающих на поверхность почвы;

з) значения концентрации компонента в растворе по всему профилю расчетного слоя на момент начала наблюдений;

и) модели производства-потребления компонента в жидкой фазе (см. п.2.3).

Наиболее трудно обеспечить работы данными по производству-потреблению, поэтому для оценки параметров конвективно-дисперсионного переноса обычно берут "компонент-метку", слабовазаимодействующий с другими фазами почвы. Обычно это хлорид-ион Cl^- , в последнее время стали применять бромид-ион Br^- . Пока нет убедительных доказательств о различиях ионективно-дисперсионного переноса для разных ионов в одной и той же почве.

В качестве переменной отклика берут среднеквадратичную погрешность Φ_Δ . Далее используют данные пп. (а)-(и) для многократного решения уравнений модели (35) или (36)-(37) с помощью программы, реализующей эти модели на ЭВМ. Набор параметров конвективно-

-дисперсионного массопереноса от расчета к расчету изменяют в соответствии с выбранным алгоритмом поиска минимума Φ_A . По достижении минимума оценивают адекватность модели по данным, использованным при поиске параметров. Затем по независимым данным желательнее верифицировать модель.

Пример приведем по данным опытных промывок засоленных аллювиальных почв, обсуждавшимся выше в связи с моделью влагопроводности. Компонентом-меткой послужил Cl^- . Перед промывками и после каждого такта промывки определяли его содержание в десятисантиметровых слоях до 1 м. Установили концентрацию Cl^- в промывной воде, что позволило использовать граничное условие (54) из табл.15. Из процессов взаимодействия Cl^- с твердой фазой принимали во внимание отрицательную адсорбцию, имея в виду, однако, что для модели (35) независимо величину Θ_* определить нельзя, поскольку она входит как слагаемое в коэффициент γ , подлежащий определению.

Как при расчете влагопереноса, так и при расчете переноса теперь на нижней границе применили условие (56) и (59) стока с заданным градиентом, удалив границу на глубину 2 м и положив $G=0$ (см. п.2.4). Это избавило от необходимости задания граничного условия для модели переноса Cl^- на глубине 1 м, где величины содержания Cl^- определялись редко - всего 4 раза за время наблюдений.

Поиск параметров вначале провели для моделей с минимальным числом параметров - 2. Для этого в (35) приняли весьма часто используемое предположение о том, что $n=1$, а в (36)-(37) положили $\lambda=0$, считая, что важный фактор конвективно-дисперсионного переноса и так уже описан самим введением в рассмотрение массообмена зон. Следовательно, на первом этапе для (35) искали λ и γ , а для (36)-(37) - Θ и τ .

Результаты применения алгоритма сканирования с расчетом Φ_A по данным для первой пары площадок показаны на рис.18. Там изображена линия, в пределах которой Φ_A отклоняется от минимального значения меньше, чем на 10%. Форма этой линии указывает на скоррелированность параметров Θ и τ и на нескоррелированность λ и γ . С найденными параметрами модель (35) оказалась адекватной на площадках первой пары, а модель (36)-(37) - неадекватной.

Для второй пары площадок значения λ и γ оказались несколько иными, чем для первой, а Θ и τ практически теми же, что для первой. Когда взяли величины λ и γ средними по четырем площад-

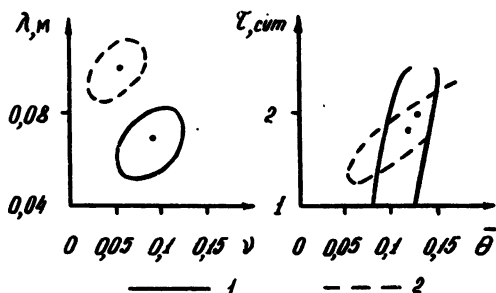


Рис.18. Результаты определения параметров двухпараметрических моделей массопереноса по данным о выносе хлора из промываемых аллювиальных почв: 1 и 2 - пары площадок

кам первой и второй пар, модель (35) осталась адекватной на всех площадках. Дальнейшее усложнение модели не потребовалось. На этом примере видно, что менее точная модель требует, вообще говоря, меньшего объема данных для определения параметров.

Остановимся еще на непрямых методах нахождения параметров полуэмпирических моделей. Речь идет о нахождении зависимостей параметров от распространенных показателей свойств почв: содержания фракций гранулометрического состава, плотности сложения, содержания органического вещества, влажности, температуры, pH. Установление таких связей очень важно потому, что определение параметров, вообще говоря, дорогая операция. Она требует специального оборудования, специалистов, трудозатрат и затрат средств. Фактически именно затруднения в определении параметров сдерживают распространение использования математических моделей. Паллиативным решением проблемы наряду с расширением возможностей прямого определения параметров является нахождение зависимостей параметров моделей от более доступных и распространенных показателей свойств почв. Пусть, например, известно, что некоторый параметр модели зависит в основном от содержания илистой фракции в гранулометрическом составе и содержания органического вещества. Тогда, имея перед собой задачу работы на конкретной территории, достаточно выбрать участки, различающиеся по содержанию илистой фракции и органического вещества, на этих участках определить параметры, установить эмпирические зависимости параметров от содержания ила и органики, а затем интерполировать полученные данные на всю территорию.

На сегодняшний день известно, что параметры моделей, вероятно, генетически обусловлены. В частности в пределах одного и того же генетического горизонта для почв одного подтипа связи параметров

полуэмпирических моделей с гранулометрическим составом, содержанием органического вещества и т.п. оказываются довольно тесными. Следовательно, определение параметров в различающихся по свойствам образцах почв для последующей интерполяции следует, вероятно, применять для почв одного подтипа и в пределах одного и того же генетического горизонта.

Разберем возможные подходы к непрямоу определению параметров на примере кривой водоудерживания - зависимости объемной влажности θ от всасывающего давления Ψ . Первый подход: выражение $\theta(\Psi)$ в виде эмпирической формулы и поиск зависимостей коэффициентов этой формулы от доступных показателей свойств почв. Эмпирических формул кривой водоудерживания предложено множество: $\theta = b_1 / [1 + (\Psi/b_2)^{b_3}]$ (Я.А.Пачепский), $\theta = b_1 \exp[-(\Psi/b_2)^{b_3}]$ (А.М.Зей-лигер), $\Psi = b_1 \operatorname{tg}[(\sqrt[4]{2})(\theta_s - \theta)/(\theta_s - \theta_{mr})]$ (А.М.Якиревич), $\theta = \theta_r + \theta_s / [1 + (\Psi/b_2)^{b_3}]^{1/(1-b_3)}$ (Р.Ван Генухтен) и т.п. /3/. Для формулы Пачепского было, например, установлено, что для черноземов и почв лугового ряда ее параметры зависят в основном от плотности сложения, содержания мелкого песка S (0,25-0,05 мм) и содержания фракции $G < 0,002$ мм. При этом относительная погрешность, возникающая при расчете параметров по ρ , S , G с вероятностью 0,95, не превышает следующих значений:

Параметр	Черноземы				Почвы лугового ряда (все образцы)
	Все образцы	Гор.А	Гор.В	Гор.С	
b_1	0,21	0,10	0,11	0,07	0,14
b_2	0,23	0,18	0,18	0,11	0,25
b_3	0,36	0,29	0,34	0,22	0,34

Из рассмотрения этой таблицы видно, во-первых, что группировка по генетическим горизонтам действительно снижает погрешности. Во-вторых, при такой точности эмпирических моделей значения параметров, рассчитанные по этим моделям, вполне можно использовать для оценочно-ориентировочных расчетов. Одним из препятствий к повышению точности предсказания параметров в данном случае является то, что водоудерживающая способность почв в значительной степени зависит от сложения и структуры - свойств, недостаточно отражаемых результатами определений гранулометрического состава и плотности сложения. Другой причиной может быть то, что гранулометрический состав и плотность сложения по-разному влияют на

водоудерживающую способность при разных степенях увлажнения. В то же время параметры рассматриваемых формул характеризуют ход всей кривой водоудерживания в целом. В качестве формул эмпирических моделей были взяты полиномы. Например, для b_1 по образцам луговых почв $b_1 = 0,629 + 0,145 G^2 - 0,0088 G^3 / 13$.

Второй подход к непрямому определению кривых водоудерживания почв состоит в том, чтобы для нескольких значений всасывающего давления построить зависимость влажности от показателей свойств почв — содержания различных элементарных почвенных частиц, органического вещества и т.п. Такие зависимости также достаточно отчетливы только для генетически близких образцов почв.

Наконец, еще один подход предполагает использование методологии, типичной для моделирования свойств смесей. Идея его (в варианте А.М.Зейлигера) такова. Для каждой фракции гранулометрического состава почв можно получить индивидуальную кривую водоудерживания $\theta/\theta_{si} = \psi_i(\psi)$, где θ_{si} — влажность полного насыщения, i — номер фракции (1 — крупный песок, ..., 7 — илистая фракция). Оказывается, что для разных почв функции $\psi_i(\psi)$ близки между собой. Если предположить, что а) частицы каждой фракции удерживают влагу в соответствии с индивидуальными кривыми водоудерживания ψ_i , б) вклад частиц фракции "i" в общее водоудерживание пропорционален доле μ_i этой фракции в гранулометрическом составе, то кривая водоудерживания почвы может быть представлена в виде: $\theta = \theta_s \sum_{i=1}^7 \mu_i \psi_i(\psi)$. В последнее время этот подход модифицируют. Например, одно из направлений модификации основывается на том, что микроагрегат способен удерживать на поверхности влагу примерно так же, как элементарная почвенная частица того же размера. Значит, микроагрегаты нужно учитывать наряду с элементарными почвенными частицами.

Наиболее сильно параметры переноса, как правило, связаны с гранулометрическим составом и плотностью сложения. Например, по данным /1/ шаг смещения λ зависит от содержания илистой фракции G в соответствии с формулой $\lambda = 1,2 G^2$, м, $0,2 < G < 0,6$, величина τ в модели (36)–(37) возрастает с 2 до 20 суток при переходе от легких суглинков к легким глинам и т.п. Однако различия минералогического состава и химического состава фаз почв также могут вызывать заметные различия значений параметров переноса.

2.7. Поливариантные прогнозы влияния мелиорации на почвенные режимы

Величины, входящие в системы уравнений моделей переноса и аккумуляции вещества в почвах, имеют стохастическую природу, т.е. объективно являются случайными. Расчет с использованием их средних значений не может дать представления об изменчивости выходных переменных. В то же время для практических целей необходимы сведения о возможном разбросе показателей действия мелиораций. Чтобы выбрать один из нескольких технологических вариантов одного и того же вида мелиораций, нужно иметь возможность доказать достоверность различий между результатами применения каждого из вариантов. Поэтому при применении модели для прогнозов всегда предполагается расчет нескольких вариантов, в каждом из которых значения случайных величин должны быть заданы в соответствии с их эмпирическими распределениями.

Например, пусть предполагается вести прогноз режима влажности почвы. Параметры модели влагопереноса: кривая водоудерживания, кривая влагопроводности и функция отбора влаги корнями растений, а также условия на границах и начальные профильные распределения влаги в почве подвержены пространственной изменчивости. Эта изменчивость может иметь естественные причины, но может быть обусловлена и особенностями технологии. Так варьирование водоподачи по площади может быть связано с неравномерностью интенсивности дождевания по длине крыла или формы дождевальной машины, вариабельность корневой деятельности растений может определяться неравномерностью внесения удобрений и т.д.

Если бы режим влажности изучался в ходе полевых наблюдений, то были бы выбраны несколько делянок — повторностей /20/. Точно так же при изучении режима с помощью модели нужно сформировать несколько наборов входных величин модели (см. п.1.4), имитирующих различные делянки. Вычислительный эксперимент будет имитировать реальный опыт.

Для задания случайных входных данных нужно имитировать их эмпирические распределения. В основе такой имитации лежит получение последовательности случайных чисел $\{U\}$, равномерно распределенных на отрезке $[0,1]$. Эту последовательность можно получить с помощью программ-датчиков случайных чисел для ЭВМ, а также при помощи классического метода случайного извлечения из урны одинаковых по форме предметов, занумерованных от 0 до 9. Пример после-

довательности так полученных случайных цифр:

5,3,4,7,9,8,3,1,1,5,9,8,0,3,6,1,2,2,1,7,5,9,5,2,6,4,0,2,3,8,4,0,2... Если хотим, например, получить случайные числа $\{u\}$ с тремя знаками после запятой, то беря по три цифры из случайной последовательности цифр, находим $\{u\}$:

0,534; 0,798; 0,311; 0,598; 0,036; 0,0122; 0,175; 0,952; 0,640 и т.д. Из равномерно распределенных на $[0,1]$ чисел уже можно

получить случайные числа с любым заданным эмпирическим распределением. В частности, если эмпирическое распределение случайной величины ξ недостоверно отличается от нормального $N(\bar{x}, \sigma^2)$ со средним значением $\bar{x}$ и дисперсией σ^2 , то $\xi = \bar{x} + \sigma \epsilon$, где ϵ имеет нормальное распределение $N(0,1)$ с нулевым средним и единичной дисперсией. Значения ϵ можно получить по формуле $\epsilon = (-2 \ln U_1)^{1/2} \cos(2\pi U_2)$, где U_1 и U_2 - случайные числа из $\{u\}$. Так, взяв пару $U_1 = 0,534$ и $U_2 = 0,798$ из только что полученной последовательности, находим $\epsilon = 0,454$.

Гипотезу о нормальности распределения в почвенно-мелиоративных исследованиях удобнее всего проверять с помощью критерия Уилка-Шапиро, который пригоден для выборок малых объемов. В случае логарифмически нормального распределения, характерного, например, для установившейся скорости впитывания, имитируются нормально распределенные значения логарифма, а затем возведение в степень дает искомые величины. Этот прием важен, в частности, при расчетах промывок засоленных почв.

Когда оценивают влияние технологических факторов на результаты мелиорации, для обработки данных вычислительного эксперимента полезно использовать дисперсионный анализ /4/. Рассмотрим его применение на следующем примере. Для орошаемых светлокаштановых почв в качестве переменной отклика модели режима влажности выбрали величину фильтрационных потерь за пределы корнеобитаемой зоны за вегетационный период Q_i , мм. Режим орошения был следующим: при достижении в слое почвы до глубины L критического значения влажности w_k давали полив нормой, достаточной для увлажнения этого слоя до НВ. В вычислительном эксперименте изучали зависимость Q_i от двух факторов: глубины слоя промачивания L и предполивной влажности w_k . Рассмотрели 2 уровня значений L : 0,6 и 0,8 м, а также два уровня w_k : 0,7 НВ и 0,8 НВ. При каждом из четырех возможных сочетаний уровней w_k и L имитировали по три набора гидрофизических параметров - водоудерживания

и скорости впитывания, по которым согласно (68) находили влагопроводность, т.е. эксперимент шел в трех повторностях. Результаты расчетов Q_i оказались следующими:

Глубина слоя промачивания, м	Инфильтрационные потери, мм		Средние по фактору I (λ)
	$W_* = 0,7 \text{ НВ}$	$W_* = 0,8 \text{ НВ}$	
0,6	64; 58; 62,5	35; 39; 43	50,3
0,8	71; 78; 84	46,5; 52; 57,5	64,8
Средние по фактору 2 (W_*)	69,6	45,5	

Результаты дисперсионного анализа таковы:

Дисперсия	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	F - статистика
Общая	2582,2	II	-	-
Повторностей	120,0	2	-	-
Первый фактор	638,0	I	638,0	29,1
Второй фактор	1740,0	I	1740,0	212,0
Взаимодействий	7,5	I	7,5	-
Ошибка	76,7	6	12,8	-

Оценка существенности частных различий между средними: НСР=7,2.

Оценка существенности средних по факторам:

НСР по первому фактору: 5,1;

НСР по второму фактору: 5,1.

Критические значения F -статистики для первого и второго факторов, а также для взаимодействий равно $F_{\lambda, 5} = 5,99$ на уровне значимости $\alpha = 0,05$. Можно видеть, что влияние обоих факторов значимо, а влияние их взаимодействия незначимо. Различия между средними по факторам I и 2 достоверны, различия между всеми средними также достоверны.

Описанные расчеты были сделаны для одного года. В действительности расчеты должны проводиться для 10-15 лет. Проще всего брать реальные метеоданные за последние годы, хотя в принципе возможна имитация метеоусловий. Расчеты суммарных потерь за 10 лет показали, что первый фактор оказывается несущественным, а второй - существенным. В многолетних расчетах следует учитывать информацию о тенденциях многолетних изменений параметров моделей.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

За рамками этой книги остались многие направления математического моделирования в мелиоративном почвоведении, по которым в последние годы был достигнут несомненный прогресс. Следует отметить модели эрозии почв и прогнозы действия противоэрозионных мероприятий, модели переноса тепла, влагопереноса в промерзающих почвах и оценки эффективности тепловых мелиораций, модели двумерного и трехмерного влагопереноса в почвах и грунтах как основу для выбора систем и параметров дренажа, модели влияния агро-мелиораций на почвенные режимы, эффекта химических мелиораций и др. При разработке этих моделей типичными подходами были: использование фундаментальных соотношений для построения полуэмпирических моделей, введение эмпирических поправок на действие биотических факторов, последовательное усложнение моделей. В качестве типичных препятствий на пути разработки и использования моделей следует назвать пространственную неоднородность почв, трудности определения параметров моделей, неопределенность в задании начальных и граничных условий. Эти препятствия преодолевались путем введения специальных поправок на осреднение, нахождение зависимостей параметров от более доступных показателей свойств почв, проведения поливариантных прогнозов с имитацией случайных распределений значений параметров и показателей свойств почв. Все эти подходы, препятствия и методы их преодоления проиллюстрированы в книге, в связи с чем она может рассматриваться как введение в современные проблемы моделирования в мелиорации почв и методы их решения.

Как потребности теории, так и запросы практики позволяют утверждать, что результаты применения и исследования моделей непременно должны допускать статистическую оценку и должны оцениваться в соответствии с природной изменчивостью изучаемых показателей свойств почв и эффекта от использования мелиораций. В связи с этим вычислительный эксперимент на ЭВМ оказывается основным способом работы с моделями и в будущем его значение будет возрастать. Современные тенденции математического моделирования в мелиоративном почвоведении проявляются в разработке системы моделей для всесторонней оценки эффективности мелиораций на основе прогноза комплекса почвенных режимов: водного, солевого, питательного, газового, окислительно-восстановительного и кис-

лотно-щелочного, а также прогноза условий и результатов миграции, аккумуляции и трансформации в почвах загрязняющих веществ, сопутствующих интенсификации земледелия. По мере расширения использования ЭВМ и подготовки специалистов можно ожидать дальнейшего развития и применения математических моделей процессов в мелируемых почвах.

ЛИТЕРАТУРА

1. Айдаров И.П. Регулирование водно-солевого и питательного режимов орошаемых земель // М.: Агропромиздат, 1985. 304 с.
2. Алексашенко А.А. Аналитические исследования процессов диффузии в гетерогенных средах // Вопросы методологии изысканий, проектирования и управления гидромелиоративными системами. М.: ВНИИГМ, 1981. С. 75-83.
3. Глобус А.М. Почвенно-гидрофизическое обеспечение агроэкологических математических моделей // Л.: Гидрометеоиздат, 1987. 427 с.
4. Дмитриев Е.А. Математическая статистика в почвоведении // М.: Изд-во МГУ, 1972. 292 с.
5. Жарков М.А., Щербаков Р.А. Исследование режима влажности засоленных почв Бешкентской долины при промывках // Засоленные почвы и их мелиорация. Сборник научных трудов ТаджНИИ Почвоведения. Т. 29. Душанбе: Дониш, 1988. С. 61-69.
6. Крупеников И.А., Гончарова Т.П., Скрыбина Э.Е., Подымов Б.П., Шилихина И.И., Энтензон М.М. Моделирование природных и антропогенных процессов, происходящих в черноземах // Тез. докл. У Делегатского съезда ВОП, Т. 8. Минск, 1977. С. 99-101.
7. Моделирование продуктивности агроэкосистем // Л.: Гидрометеоиздат, 1982. 264 с.
8. Моделирование процессов засоления и осолонцевания почв // М.: Наука, 1980. 262 с.
9. Николаева С.А., Пачепский Я.А., Щербаков Р.А., Щеглов А.И., Цветнова О.Б., Дерюжинская В.Д. Моделирование режима влажности чернозема обыкновенного мичеллярно-карбонатного // Почвоведение. 1988. № 12. С. 44-54.
10. Оуэн Дж. Статистические таблицы // М.: ВЦ АН СССР, 1972. 586 с.

11. Пачепская Л.Б., Пачепский Я.А., Моргун Е.Г. Использование методов теории размерностей для анализа изменения почвенно-мелиоративных условий при орошении // Почвоведение. 1977. № 12. С. 130-138.
12. Пачепский Я.А. Математические модели физико-химических процессов в почвах // М.: Наука, 1990. 186 с.
13. Пачепский Я.А., Щербаков Р.А., Вараллаи Д., Райкаи Д. О нахождении влагопроводности почв по кривой водоудерживания // Почвоведение. 1984. № 10. С. 60-72.
14. Природа моделей и модели природы // М.: Мысль, 1986. 270 с.
15. Рабочев И.С., Рекс Л.М., Пятай Э.Т., Якиревич А.М. Применение модели тепловлагопереноса в почвогрунтах для расчета суммарного водопотребления сельскохозяйственных культур // Почвоведение. 1982. № 1. С. 50-59.
16. Роде А.А. Система методов исследования в почвоведении. Новосибирск: Наука СО-АН СССР, 1971. 92 с.
17. Фрид А.С. Информационные модели плодородия почв // Вестник с.-х. науки. 1987. № 9. С. 8-12.
18. Химмельблау Д. Анализ процессов статистическими методами // М.: Мир, 1972. 957 с.
19. Хэнкс Р., Ашкрофт Л. Прикладная физика почв: Влажность и температура почвы // Л.: Гидрометеоиздат, 1985. 151 с.
20. Шейн Е.В., Гудима И.И. Методические подходы к эколого-агрофизической оценке орошаемых почв // Почвоведение. 1990. № 5. С. 86-94.
21. Шеннон Р. Имитационное моделирование систем - искусство или наука. М.: Мир, 1978. 418 с.
22. Beese F., van der Ploeg R.R., Richter W. Der Wasserhaushalt einer Lös-Parabraunerde unter Winterweizen und Brache // Zt. Acker- und Pflanzenbau. 1978. Vol. 146. P. 1-19.
23. Richter J. The soil as a reactor // Brockenblick, Catena Verlag. 1987. 192 p.

СОДЕРЖАНИЕ

	стр.
ПРЕДИСЛОВИЕ.....	3
Часть I. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И ЭКСПЕРИМЕНТЫ С НИМИ НА ЭВМ	4
I.1. Общие представления о моделировании и моделях. Моделирование в почвоведении.....	4
I.2. Виды математических моделей в мелиоративном поч- воведении.....	6
I.3. Необходимость и особенности применения ЭВМ.....	12
I.4. Параметры моделей и методы их определения.....	19
I.5. Оценка и сравнение моделей.....	24
I.6. Подбор формул эмпирических моделей.....	36
Часть II. ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПЕРЕНОСА И АККУМУЛЯЦИИ ВЛАГИ, ИОНОВ И ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ В МЕЛИОРИ- РУЕМЫХ ПОЧВАХ	43
2.1. Дифференциальные уравнения сохранения массы.....	43
2.2. Модели массопереноса в почвенных растворах.....	45
2.3. Модели трансформации состава почвенного раст- вора	49
2.4. Термодинамические модели равновесных распределе- ний ионов между фазами почв.....	55
2.5. Граничные условия. Описание действия орошения и дренажа.....	64
2.6. Определение параметров массопереноса.....	69
2.7. Поливариантные прогнозы влияния мелиораций на почвенные режимы.....	79
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	82
ЛИТЕРАТУРА.....	83

Учебное издание

Пачепский Яков Аронович

Математические модели процессов в мелиорируемых
почвах

Зав. редакцией Н.М.Глазкова

Редактор Н.Г.Комлева

Художественный редактор Ю.М.Добрянская

Н/К

Подписано в печать 18.06.91

Формат 60x90^I/16. Бумага офс. № 2.

Офсетная печать.

Усл. печ. л. 5,5. Уч.-изд. л. 4,69.

Тираж 500 экз. Заказ № 1005 . Заказное. Изд. № 2233.

Цена 55 коп.

Ордена "Знак Почета" издательство Московского
университета. 103009, Москва, ул. Герцена, 5/7.

Типография ордена "Знак Почета" изд-ва МГУ.

119899, Москва, Ленинские горы