

«Математическое моделирование в почвоведении»

(ПОЧВОВЕДЫ)

Часть II

Решение задач (интерактивно, 2 задачи).

soil.physics.dept@gmail.com

1-я задача

2-я задача

от 1

Девиз:

*«The purpose of computing is insight,
not numbers»*

R. Hamming

«В расчетах главное не цифры,
а понимание»

«*The purpose of computing is insight, not numbers*»

R.Hamming

«В расчетах главное не цифры, а понимание»

- Мы будем с вами многое вспоминать из наших курсов
- Мы будем заниматься физически обоснованными численными (имитационными) математическими моделями, а не аналитическими, статистическими, геометрическими и пр.
- Интерактивные две задачи. Первая – с программой STATISTICA по аппроксимации (получите \approx 11-18 ноября), вторая – с программой HYDRUS (\approx 22-26 ноября) по расчетам водного режима. Третья – физико-химических равновесий в почвах LIBRA.
- Контакты с Екатерина Валерьевной Фаустовой (*список с адресами э-почты*).
- soil.physics.dept@gmail.com

Тема 1: «Экспериментальное обеспечение моделей»

- ❖ Основные физические законы в моделях переноса.
- ❖ Физическое обоснование и расчетная схема моделей влагопереноса
- ❖ Физическое обоснование и расчетная схема моделей теплопереноса
- ❖ Начальные и граничные условия моделей влагопереноса
- ❖ Подотрансферные функции

Мы изучаем модели:

- Физически обоснованные (два закона – неразрывности и потока)

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial q}{\partial z} \quad q = K \frac{d\Psi}{dz}$$

- Пространственно-распределенные $\frac{dx}{dz}$
- Динамические $\frac{dx}{dt}$
- Имитационные (численные, «сеточные») методы решения, а не статистические или аналитические. Специальные численные методы решений)

Расчетная схема

- Реализация в расчетной схеме основного алгоритма по расчету движения влаги с использованием уравнения Дарси и закона сохранения (уравнения неразрывности)

Основные уравнения

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial q_w}{\partial z} \quad - \text{Уравнение неразрывности для влажности}$$

$$q_w = K_{вл} (P_{к-с}) \cdot \left(\frac{dP_{к-с}}{dz} - 1 \right) \quad - \text{уравнение Дарси для не насыщенной влагой почвы}$$

Подставляем в уравнение неразрывности уравнение Дарси

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial \left[K_{вл} (P_{к-с}) \cdot \left(\frac{dP_{к-с}}{dz} - 1 \right) \right]}{\partial z}$$

$$C(\theta, P_{к-с}) = \frac{d\theta}{dP_{к-с}}$$

$$C(\theta, P_{к-с}) \frac{\partial P_{к-с}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{вл} (P_{к-с}) \left(\frac{\partial P_{к-с}}{\partial z} - 1 \right) \right] \pm I_w$$

Сеточная схема расчета

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

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

Таким образом,
экспериментальным обеспечением
моделей влагопереноса

- ОГХ (послойно для всего профиля)
- Функция влагопроводности (послойно)
- Условия на верхней границе
- Условия на нижней границе
- Начальные условия

Физические основы модели теплопереноса

Начальные условия

Это пространственное (по профилю почвы) распределение переменной состояния (температуры, влажности, концентрации вещества пр.) в начальный (нулевой) момент времени, с которого начинаются расчеты.

Модель движения воды в почве

- Условия на верхней границе:
 - Испарение, транспирация
 - Осадки, поливы
- Условия на нижней границе
 - Постоянная влажность (давление влаги)
 - Постоянный градиент
 - Задан поток воды

Граничные условия

- Это задание потоков, градиентов или конкретных значений переменной состояния на верхней и нижней границах почвы в каждый момент времени за расчетный период

Продолжение темы 1

- Нижние граничные условия

Нижнее граничное условие

Теоретические основы: 3 типа нижнего граничного условия

● 1 тип: «постоянное». $\theta(z_{end}, t) = \theta_0$

● 2 тип: «закрытое» $\frac{\partial \theta(z_{end}, t)}{\partial z} = 0$

● 3 тип: «потокосное» $\theta(z_{end}, t) = \theta_0 + K \square \frac{\partial \theta(z_{end}, t)}{\partial z}$

Это было о потоках влаги, о динамике влажности почвы

- Теперь о потоках тепла, о тепловом режиме почвы

Пункт 2 темы: Перенос тепла в почве

$$q_T = -\lambda \frac{dT}{dz}$$

q_T – поток тепла в почве [кал/см² сут],

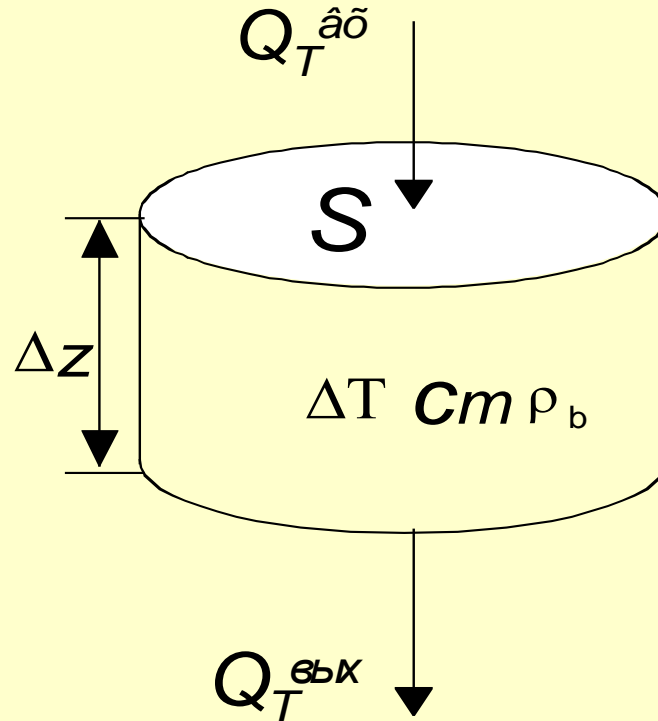
λ – коэффициент теплопроводности [кал/см С⁰ сут],

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

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

Это 3-н Фурье

Уравнение теплопереноса



$$\Delta q_T \cdot S \cdot \Delta t = \Delta T \cdot C_m \cdot \rho_b \cdot S \cdot \Delta z$$

$$\frac{\Delta q_T}{\Delta z} = \frac{\Delta T}{\Delta t} \cdot C_m \cdot \rho_b \quad \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_T \frac{\partial T}{\partial z} \right) = C_m \cdot \rho_b \cdot \frac{\partial T}{\partial t}$$

Основное уравнение теплопереноса

$$\frac{\partial T}{\partial t} = K \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

$$K = \frac{\lambda}{C_m \cdot \rho_b}$$

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

Расчет переноса тепла внутри ПОЧВЫ

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

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad - \text{основное уравнение теплопереноса}$$

где κ – коэффициент температуропроводности.

Физические свойства почвы

Уравнение теплопереноса в конечных разностях

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

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

$$T_i^{j+1} = T_i^j - \kappa \cdot \Delta t \cdot \left[\frac{T_{i-1}^j - 2T_i^j + T_{i+1}^j}{\Delta z^2} \right]$$

Расчетная (сеточная) схема

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

Время	j	$j+1$
Слои		
$i-1$	T_{i-1}^j	
	$K_{i-1/2}$	
i	T_i^j	T_i^{j+1}
	$K_{i+1/2}$	
$i+1$	T_{i+1}^j	

$$T_i^{j+1} = T_i^j - \kappa \cdot \Delta t \cdot \left[\frac{T_{i-1}^j - 2T_i^j + T_{i+1}^j}{\Delta z^2} \right]$$

Условия для применения расчетной схемы

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

Расчет переноса тепла внутри ПОЧВЫ

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

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad - \text{основное уравнение теплопереноса}$$

где κ – коэффициент температуропроводности.

Физические свойства почвы

Уравнение теплопереноса в конечных разностях

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

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

$$T_i^{j+1} = T_i^j - \kappa \cdot \Delta t \cdot \left[\frac{T_{i-1}^j - 2T_i^j + T_{i+1}^j}{\Delta z^2} \right]$$

Расчетная (сеточная) схема

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

Время	j	$j+1$
Слои		
$i-1$	T_{i-1}^j	
	$K_{i-1/2}$	
i	T_i^j	T_i^{j+1}
	$K_{i+1/2}$	
$i+1$	T_{i+1}^j	

$$T_i^{j+1} = T_i^j - \kappa \cdot \Delta t \cdot \left[\frac{T_{i-1}^j - 2T_i^j + T_{i+1}^j}{\Delta z^2} \right]$$

Условия для применения расчетной схемы

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

Условия для применения расчетной схемы

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

СТОП

4. Педотрансферные функции

(по книгам: «Полевые и лабораторные методы исследования физических свойств и режимов почв». МГУ. 2001)

И

«Теории и методы физики почв» М.: «Гриф и К». 2007)

Педотрансферные функции

Определение

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

«Предотрансферные функции превращают данные, которые у нас есть, в данные, которые нам нужны!»

Определяют педотрансферные функции

- Методами
 - Пошаговой регрессии
 - «Безмасштабных (нейронных) сетей»
- С помощью специально созданных баз данных (UNSODA, EVROSOIL и др.).

1-й способ (точечный)

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

$$\theta_i = a_i + b_i \omega_{\text{песок}} + c_i \omega_{\text{пыль}} + d_i \omega_{\text{ил}} + e_i \omega_C + f_i \rho_b$$

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

2-й способ (параметрический)

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

- уравнение ван Генухтена для описания ОГХ

Получают регрессионные выражения для параметров уравнения ван Генухтена (n , α и θ_{\max} , θ_{\min}) от фундаментальных свойств почвы

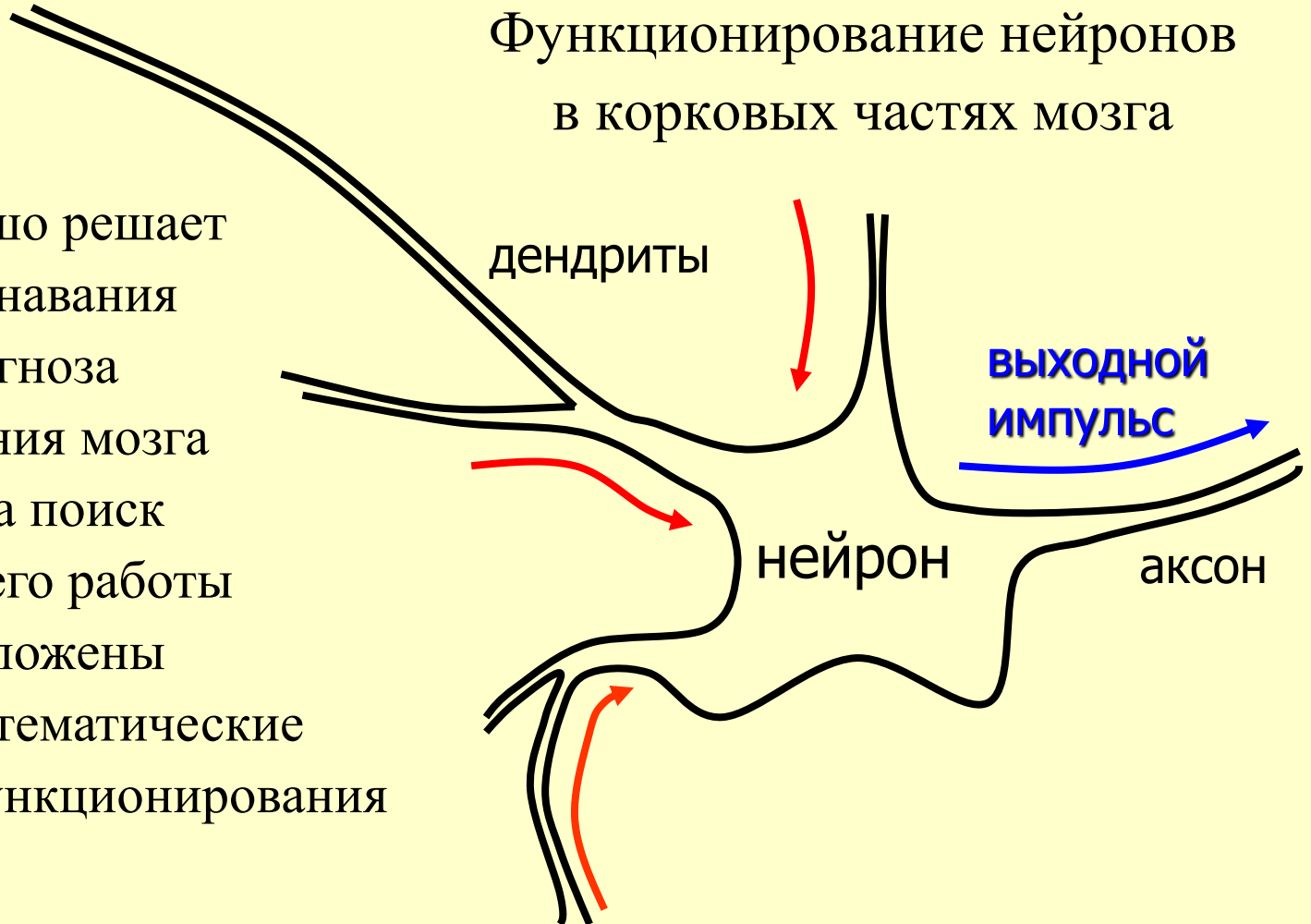
Предотрасферные функции

Нейронные сети

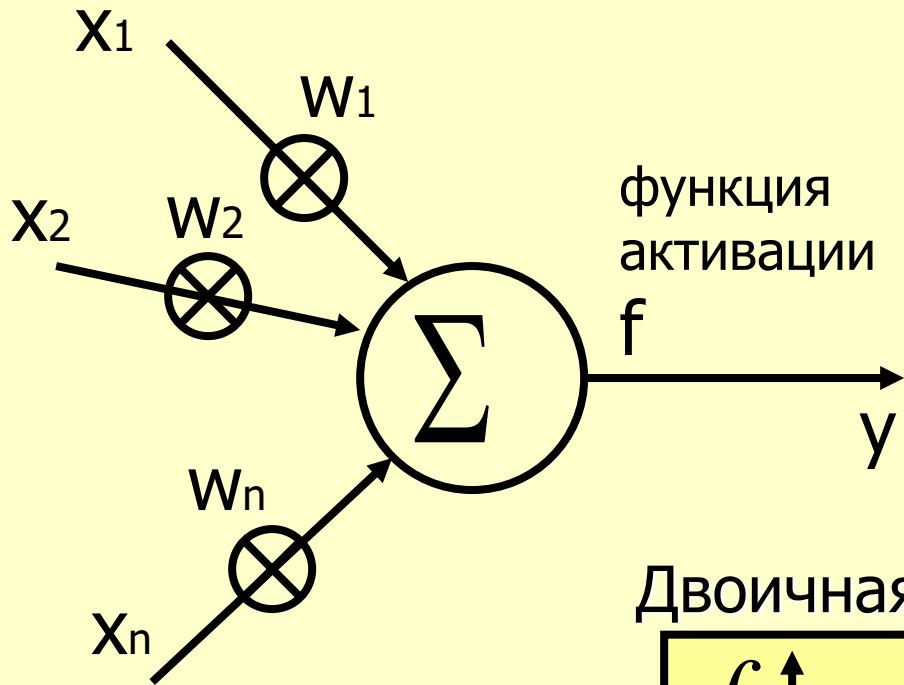
Нейросетевые алгоритмы

Функционирование нейронов
в корковых частях мозга

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



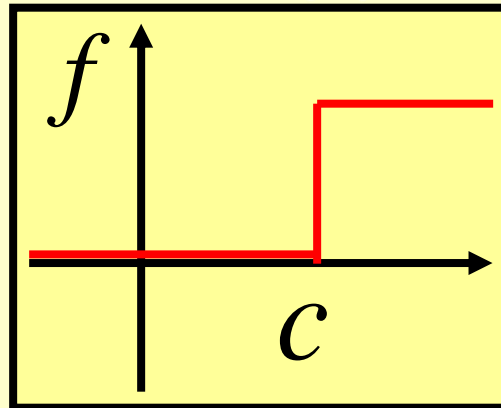
Математическая модель нейрона



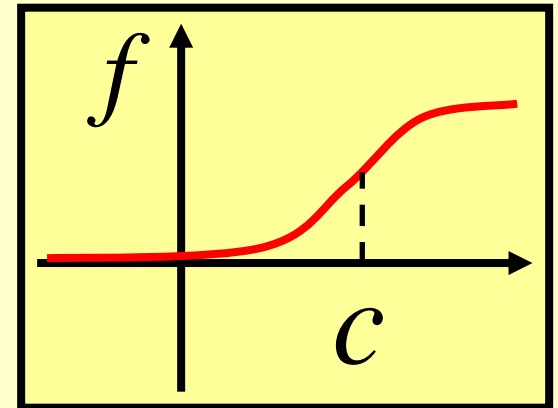
$$y = f\left(\sum_{i=1}^n x_i w_i\right)$$

Виды функций активации нейронов:

Двоичная (булева)



Сигмоидальная



«Предотрансферные функции превращают данные, которые у нас есть, в данные, которые нам нужны!»

Тема 2. Аппроксимация эмпирических зависимостей

(По книге Я.А.Пачепского «Математические модели процессов в мелиорируемых почвах»
Изд.МГУ, 1992.)

- Математические уравнения для описания эмпирических данных
- Определение параметров аппроксимации
- Статистики для анализа параметров
- Функции, наиболее употребительные в почвоведении

Виды функций

- I. Убывающие
- II. Возрастающие
- III. С одним максимумом
- IV. С одним минимумом
- V. С несколькими экстремумами
- VI. С изломом

Убывающие функции

I.1. Линейная $b_1 - b_2 \cdot x$

I.2. Степенная $\left(\frac{x}{b_2}\right)^{-b_1}$

I.3. Экспоненциальная $b_1 \cdot \exp(-b_2 \cdot x)$

I.4. Логистическая $\frac{b_1}{1 + (b_2 / x)}$
 $\frac{b_1}{(1 + (b_2 / x))^{b_3}}$

С одним максимумом

Ш.1. Параболические $b1 - \left(\frac{x}{b2}\right)^{b3}$

Ш.2. Гауссиада $b1 \cdot \exp_x \left[-\left(\frac{(x - b2)^2}{b3}\right) \right]$

V. С несколькими экстремумами

- Полиномы
- Сплайн-функция (в качестве примера)

Это полином 3-й степени, хорошо описывающий прохождение кривой через многочисленные максимумы и минимумы

Используется: при картографировании (горизонталы на картографических картах) и пр.

Не имеет конкретного функционального выражения

Определение

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

Следующий вопрос темы 2
«Аппроксимация эмпирических
зависимостей»

2. Функции, наиболее
употребительные в
почвоведении

В химии почв: уравнения сорбции

- Степенная функция

$$Q = mC^n$$

Уравнение Фрейндлиха

- Логистическая

$$A = A_{\infty} \frac{K_l C}{1 + K_l C}$$

Уравнение Ленгмюра

- Гауссиада (агрохимия, биология почв, статистика и др.)

Физический смысл параметров

- В уравнении гауссиады

$$b1 \cdot \exp\left[-\left(\frac{(x - b2)^2}{b3}\right)\right]$$

b1 – обилие вида

b2 – биологический оптимум

b3 – толерантность (мера экологической амплитуды)

3. Определение параметров аппроксимации

- Характеристики ошибок (погрешностей)

Δ_i – погрешность описания функцией
экспериментальных данных:

$$\Delta = y_{\text{э}} - Y_p$$

$$S = \left(\frac{1}{N} \sum n \cdot \Delta^2 \right)^{1/2} \text{ среднее квадратическое отклонение}$$

Задача – найти минимум S , подобрав соответствующие значения b_1 и b_2

- Метод сканирования

Определение

- Аппроксимация – это операция подбора параметров выбранной функции экспериментальных данных, основанная на нахождении минимума среднеквадратической ошибки

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

Расчет среднеквадратической погрешности

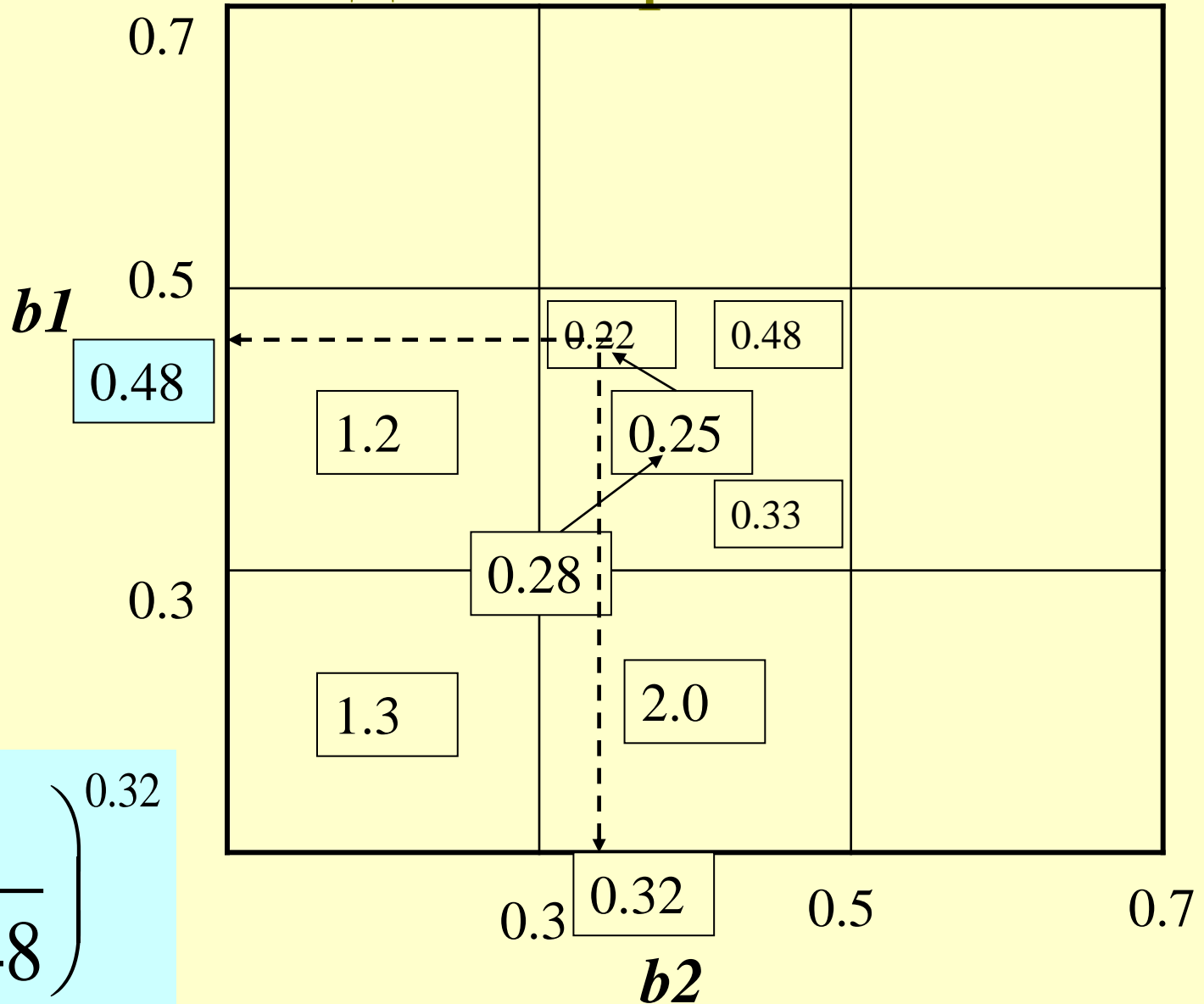
X	Y
2	1.5
5	2.4
10	3.0
20	4.0

$$y = \left(\frac{x}{b1} \right)^{b2}$$

$$S_r = \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1} n_j \cdot \Delta_j^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$S_r = \frac{1}{\sqrt{4}} \left\{ \left[1.5 - \left(\frac{2}{b1} \right)^{b2} \right]^2 + \left[2.4 - \left(\frac{5}{b1} \right)^{b2} \right]^2 + \left[3.0 - \left(\frac{10}{b1} \right)^{b2} \right]^2 + \left[4.0 - \left(\frac{20}{b1} \right)^{b2} \right]^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$$

Метод сканирования



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

- $b_2 = b_1 * \exp(-(((v_1 - b_2)**2)/b_3))$
- Начальные приближения
- Надо b_2 сделать равным 6 – посмотреть из графика!

СТАТИСТИКИ ДЛЯ АНАЛИЗА ПАРАМЕТРОВ

$$t = \frac{\bar{b}}{S_b} \quad \text{- критерий Стьюдента (распределение нулевой гипотезы)}$$

$H : \bar{b} = 0$ - формулировка нулевой гипотезы

И если $t_{расч} > t_{\alpha, n}$ то нулевая гипотеза не принимается

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

Анализ ошибок (погрешностей)

Ошибки (1) случайные и (2)

систематические

- Строят график $Y_{\text{эксп}}$ от $Y_{\text{расч}}$. Биссектриса – это хорошо
- Коэффициент корреляции.

НО! СИСТЕМАТИЧЕСКИЕ ОШИБКИ

- Гистограмма Δ
- Графический анализ зависимости Δ от $Y_{\text{эксп}}$.
- Аналитический анализ Зависимость Δ от $Y_{\text{эксп}}$.

Регрессия Δ на $Y_{\text{эксп}}$:

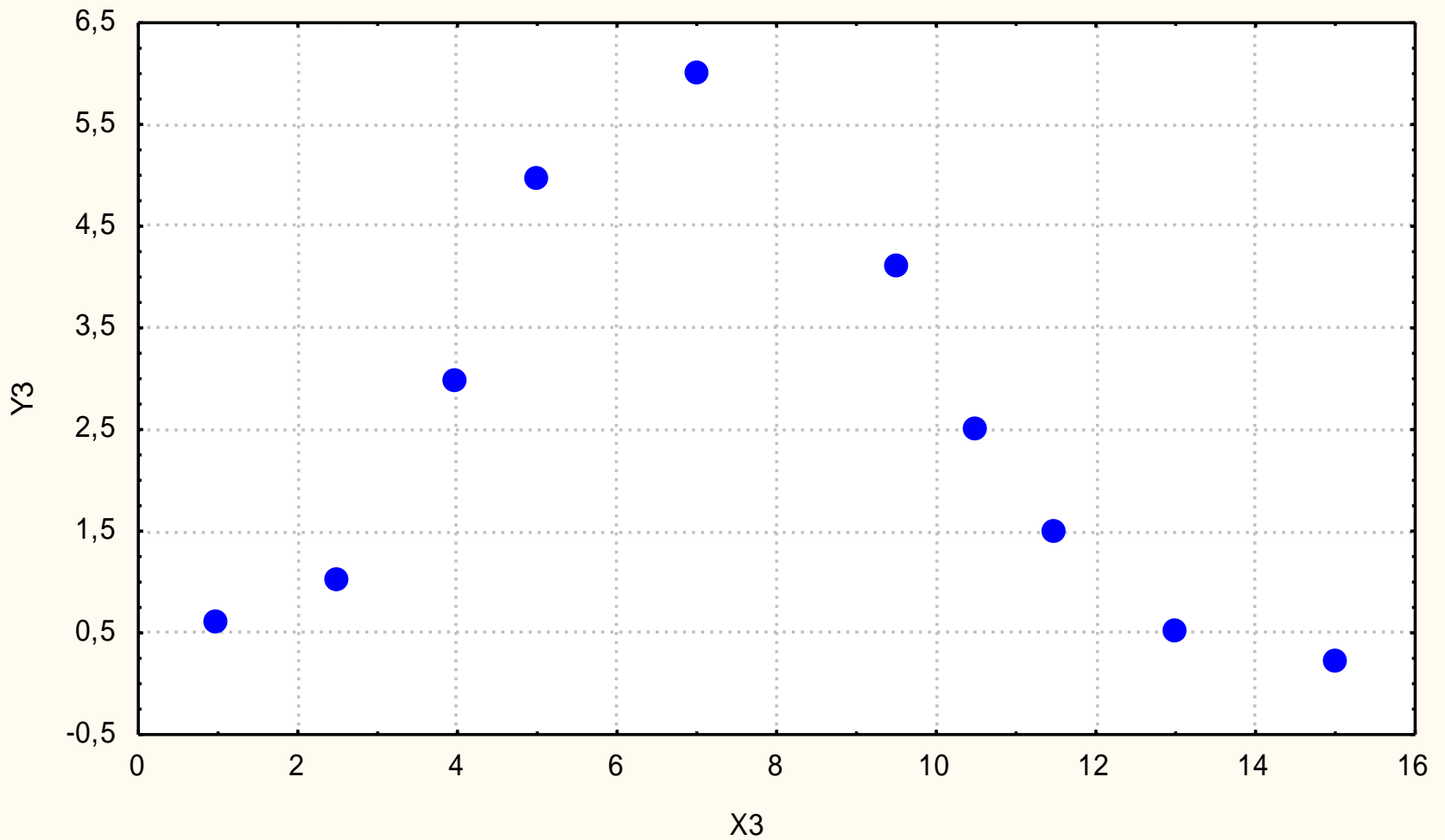
$\Delta = a + b Y_{\text{эксп}}$. Оценка параметров a и b . Если недостоверны, то хорошо, нет систематической ошибки!

Практическое задание 1.

**АППРОКСИМАЦИЯ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ
ДААННЫХ**

Зависимость Y от X

Scatterplot (MM1.STA 38v*10c)



«Выдача» после аппроксимации

Model: $v2=b1*\exp(-((v1-b2)2)/b3)$**

Dep. var: Y3 Loss: (OBS-PRED)2**

Final loss: ,424475197 R=,99427

Variance explained: 98,8

	b1	b2	b3
Estimate	6,21813	7,05382	13,53232
Std.Err.	,21240	,07867	,89626
t(7)	29,27611	89,66772	15,09865
p-level	,004230	,00005	,0876210

Гистограмма погрешностей

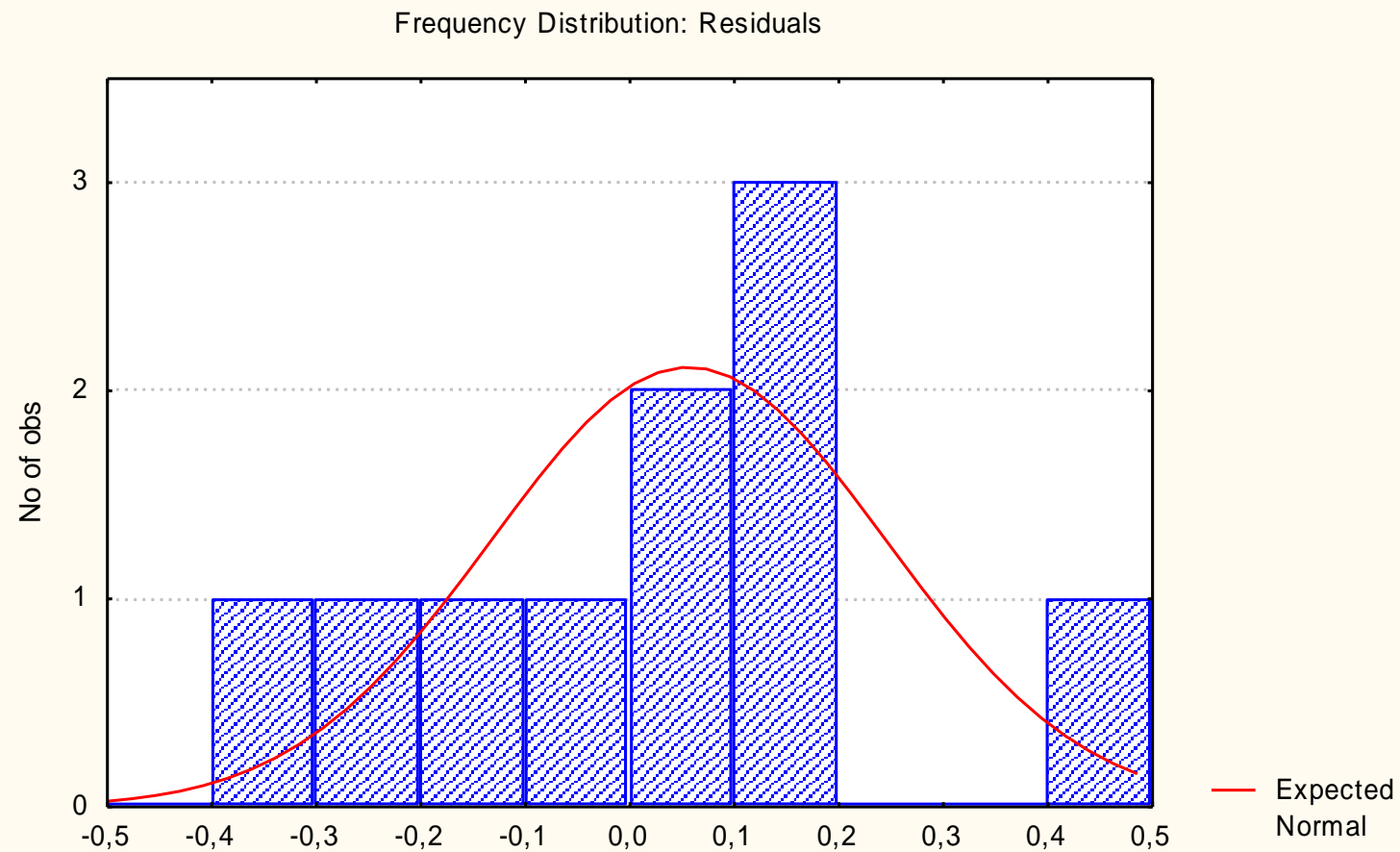


График реальных значений от расчетных

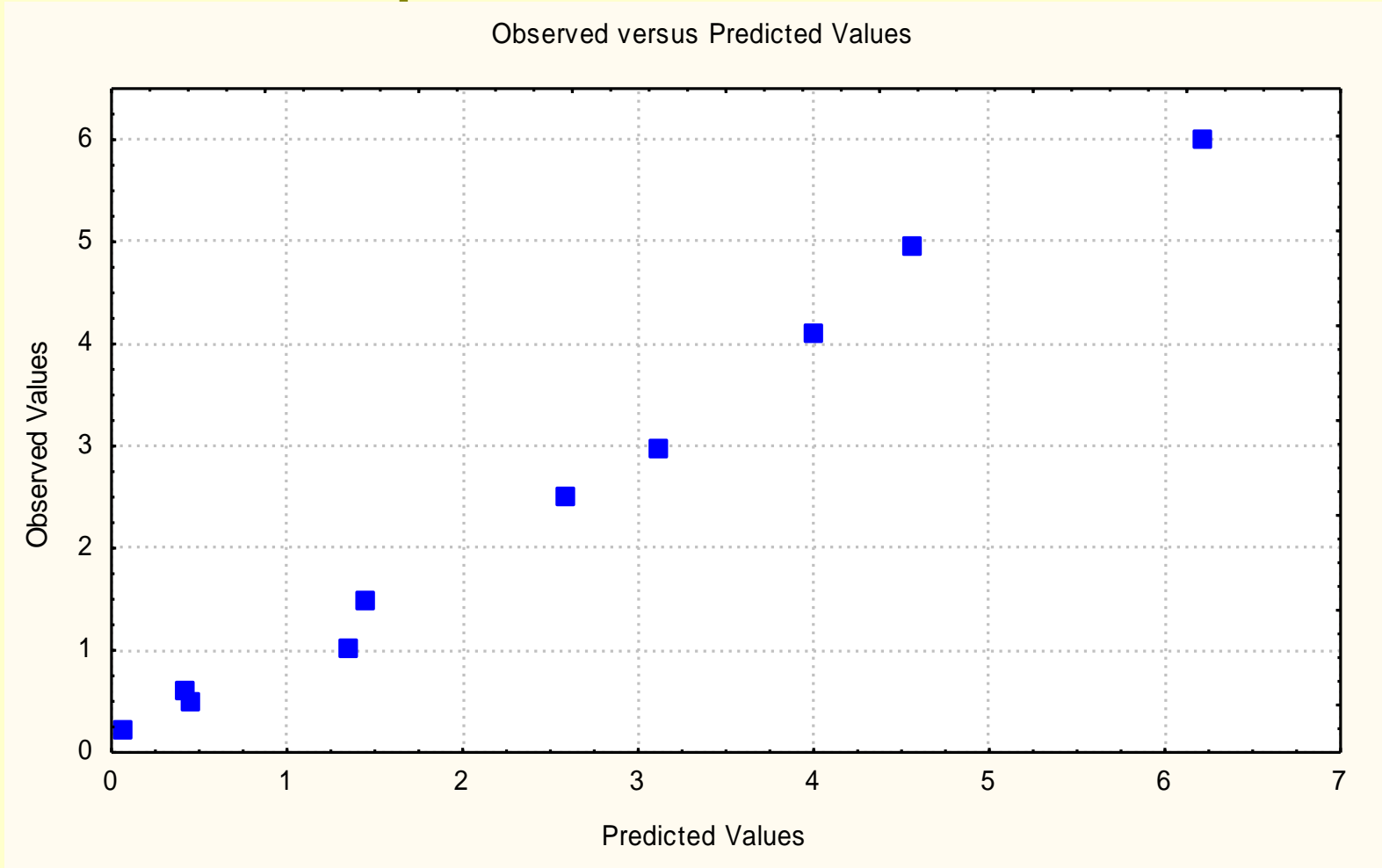
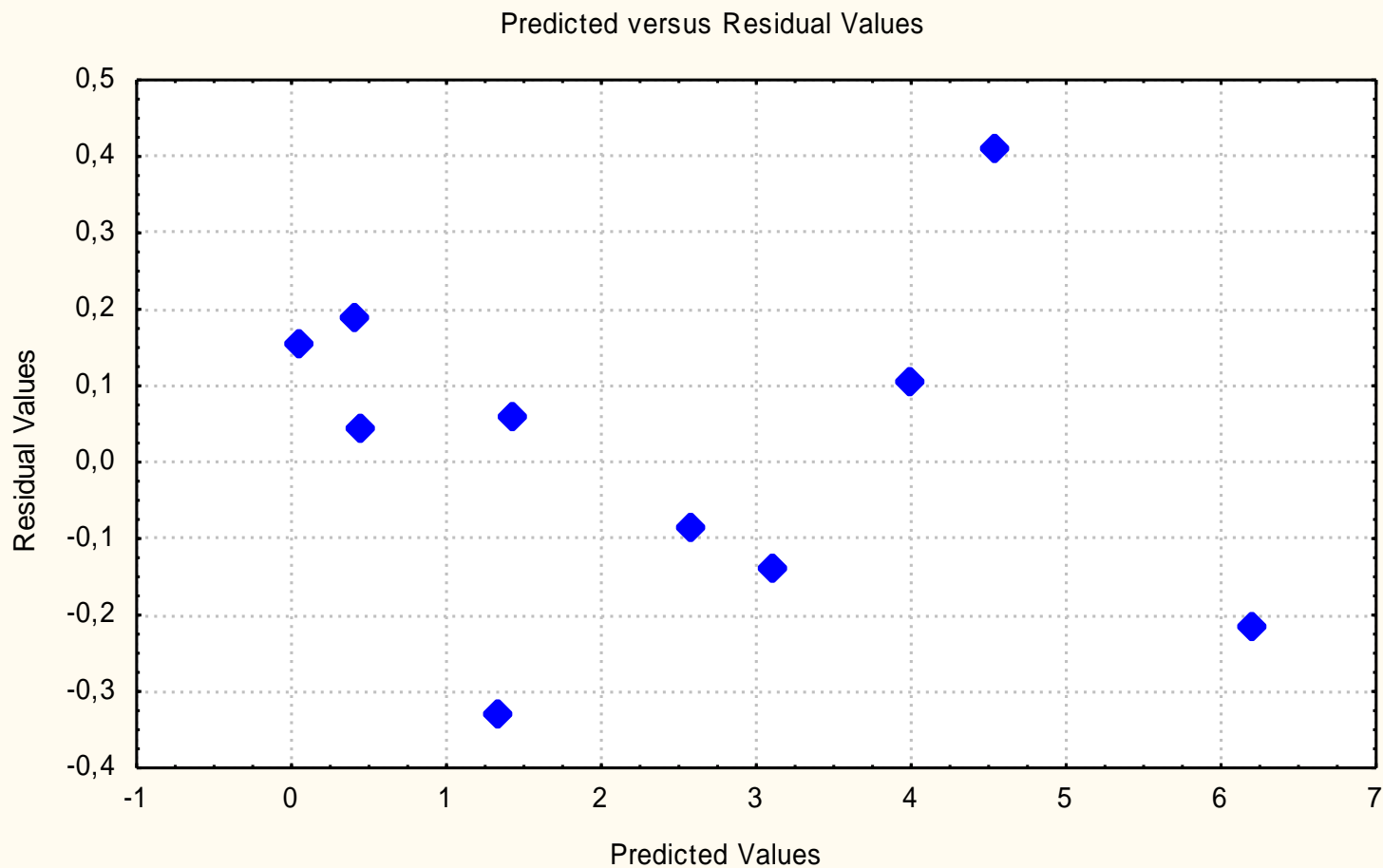


График зависимости погрешностей от расчетной величины



Анализ на систематические погрешности

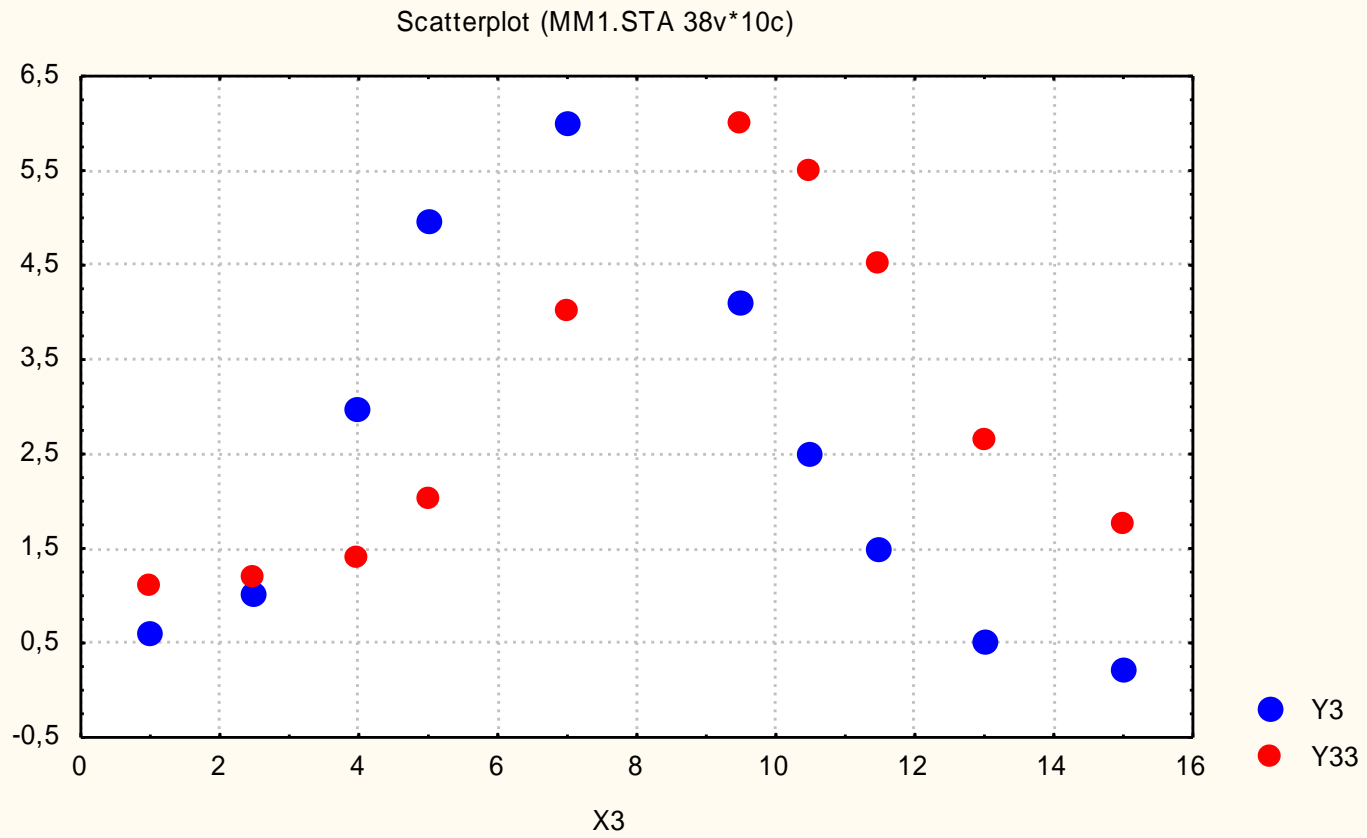
- Регрессия погрешностей на реальную величину

$$\Delta = a + bY_{\text{реальное}},$$

где a и b – коэффициенты линейной регрессии. Если a достоверно отличается от нуля, то присутствует систематическая ошибка; если $b \neq 0$

то есть зависимость погрешности от измеряемой величины.

Сравнение параметров



Статистическое доказательство значимости различий параметров

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

если $t_{расч} > t_{табл}$ для N, α , то параметры
двух аппроксимаций значимо
различаются.

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

Физический смысл сравнения параметров (пример с термофильными микроорганизмами)

- В уравнении гауссиады

$$b1 \cdot \exp\left[-\left(\frac{(x - b2)^2}{b3}\right)\right]$$

b1 – обилие вида

b2 – биологический оптимум

b3 – толерантность (мера экологической амплитуды)

Правила подбора функций

1. Определить тип кривой из VI типов
2. Есть ли априорная информация (проходит через 0, асимптота и пр.)
3. Выбрать функцию с наименьшим количеством параметров
4. Использовать априорную информацию для уменьшения числа параметров
5. На ЭВМ (программа STATISTICA) определить числовые значения параметров
6. Оценить их значимость. С помощью статистических критериев выбрать лучшую функцию (достоверность параметров, анализ погрешностей)
7. Если качество плохое, то увеличить число параметров и перейти к п.5.

Практическое занятие №1

Аппроксимация
экспериментальных данных

Задание после аппроксимации

- Открыть PARAMETERS&STAND. ERR.: списать значения параметров, их ошибок, t-критерия и уровня вероятности. Далее провести анализ погрешностей:
- DISTRIB.OF RESIDUALS. Посмотреть и проанализировать гистограмму распределения погрешностей. Выводы о погрешностях. Здесь посмотреть нормальность распределения погрешностей в услуге «Normal Probability Plot of Residuals».
- PREDICTEDvsOBSERVED. Проанализировать совпадение экспериментальных и расчетных.
- PREDICTEDvsRESIDUALS. Проанализировать изменение погрешностей с ростом функции. Вывод о наличии систематических ошибок.
- Если аппроксимация прошла неудачно, вернуться к п.3, и повторить те же операции с другим видом функции.
- Аппроксимировать значения 2-й функции: зависимости переменной Y_{11} от X_1 . Получить параметры аппроксимации для 2-й экспериментальной зависимости.
- Сравнить достоверность отличий полученных параметров по t-критерию (табличные $t_7=2.36$; $t_8=2.31$).

Заключительные вопросы (!)

Ответить на вопросы:

- (1) что указывает на хорошую аппроксимацию,
- (2) достоверны ли параметры у 2-х аппроксимаций экспериментальных зависимостей,
- (3) о чем говорят различия параметров, если эти функции отражают физический (биологический, и пр.) процесс,
- (4) о чем говорят распределения остатков.

4. Функции, наиболее употребительные в почвоведении

В химии почв: уравнения сорбции

- Степенная функция

$$Q = mC^n$$

Уравнение Фрейндлиха

- Логистическая

$$A = A_{\infty} \frac{K_l C}{1 + K_l C}$$

Уравнение Ленгмюра

- Гауссиада (агрохимия, биология почв, статистика и др.)

Физический смысл параметров

- В уравнении гауссиады

$$b1 \cdot \exp \left[- \left(\frac{(x - b2)^2}{b3} \right) \right]$$

b1 – обилие вида

b2 – биологический оптимум

b3 – толерантность (мера экологической амплитуды)

А если мы не знаем вида? Или функция очень сложная? С несколькими экстремумами?

- Например, кривая сорбции паров воды.
- Это S-образная функция. У нас не было функций такого вида. Что делать в этом случае?
- Надо использовать принцип пошаговой регрессии, начиная с полинома.

Пример Г.В.Харитоновой

- Надо использовать полином и на основании F-критерия исключать поочередно степени полинома

1-я задача – подбор функции для экспериментальных данных и аппроксимации

- Каждому будут даны 2 пары колонок цифр $(y - x)'$ и $(y - x)''$
- Рекомендуется начать с графика.
- Проанализировав график. Выбрать функцию из 6-ти приведенных выше.
- Далее, осуществить нелинейную аппроксимацию и найти параметры аппроксимации.

Обязательно сохранить табличку с погрешностями расчета

STATISTICA - Workbook1* - [Model is: $v_2 = b_1 \cdot \exp(-((v_1 - b_2)^2 / b_3))$] (Examp1_xop-08)

File Edit View Insert Format Statistics Data Mining Graphs Tools Data Workbook Window Help

Arial 10 B I U [Text Formatting Icons] [Language Icons] [Calculation Icons] Vars Cases [Grid Icons]

Data: Examp1_xop-08 (10v by 10c)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
	Var1	Var2	Var3	Var4	Var5	Var6	Var7	Var8	Var9	Var10
1	1.000	0.600								
2	2.500									
3	4.000									
4	5.000									
5	7.000									
6	9.500									
7	10.500									
8	11.500									
9	13.000									
10	15.000									

Workbook1* - Model is: $v_2 = b_1 \cdot \exp(-((v_1 - b_2)^2 / b_3))$ (Examp1_xop-08)

Dep. Var. : Var2

	Observed	Predicted	Residuals
1	0.600000	0.414462	0.185538
2	1.010000	1.343180	-0.333180
3	2.980000	3.121507	-0.141507
4	4.960000	4.552866	0.407134
5	6.000000	6.216799	-0.216799
6	4.100000	3.995959	0.104041
7	2.500000	2.585334	-0.085334
8	1.500000	1.442865	0.057135
9	0.500000	0.455974	0.044026
10	0.210000	0.058511	0.151489

Гистограмма погрешностей

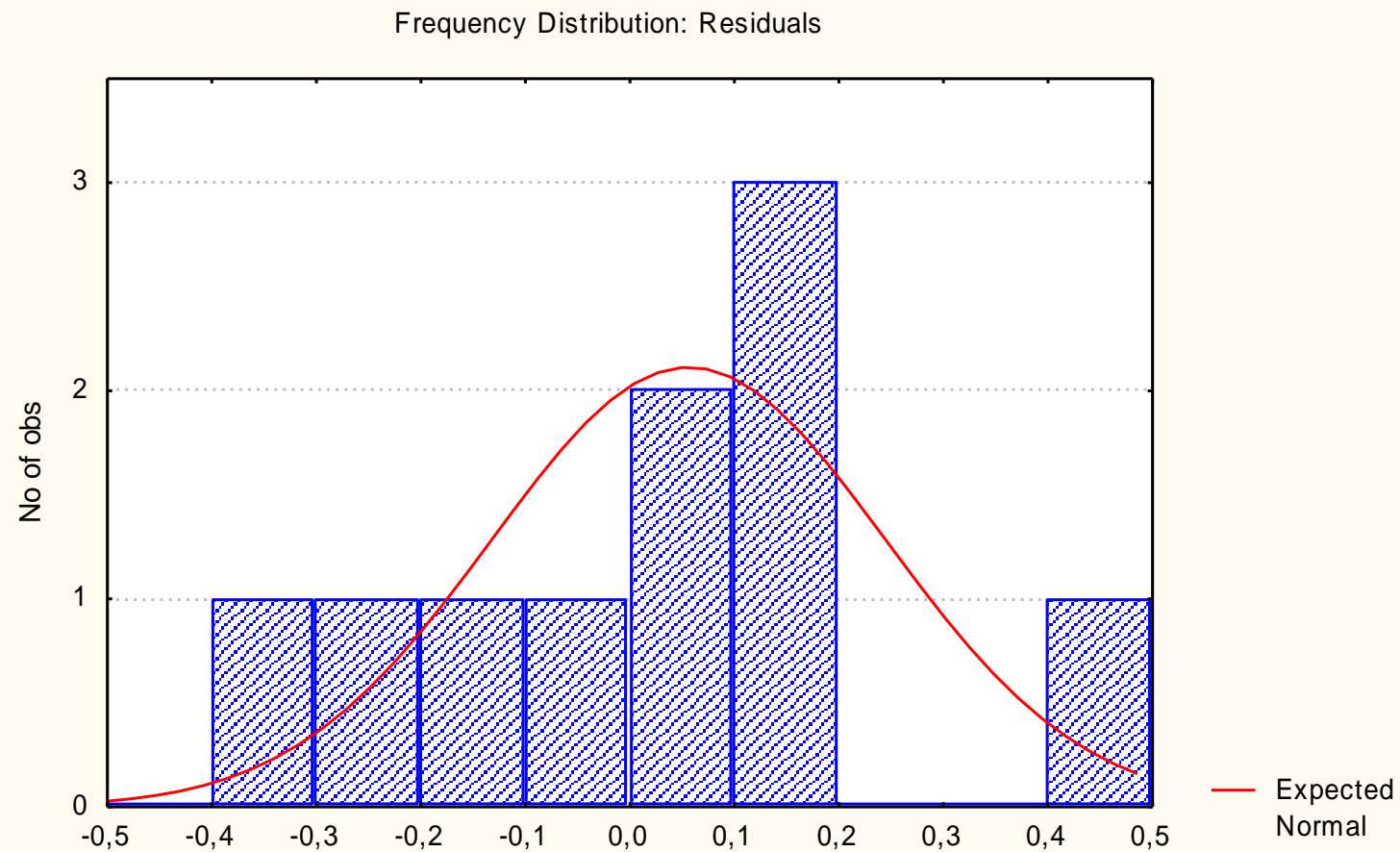


График реальных значений от расчетных

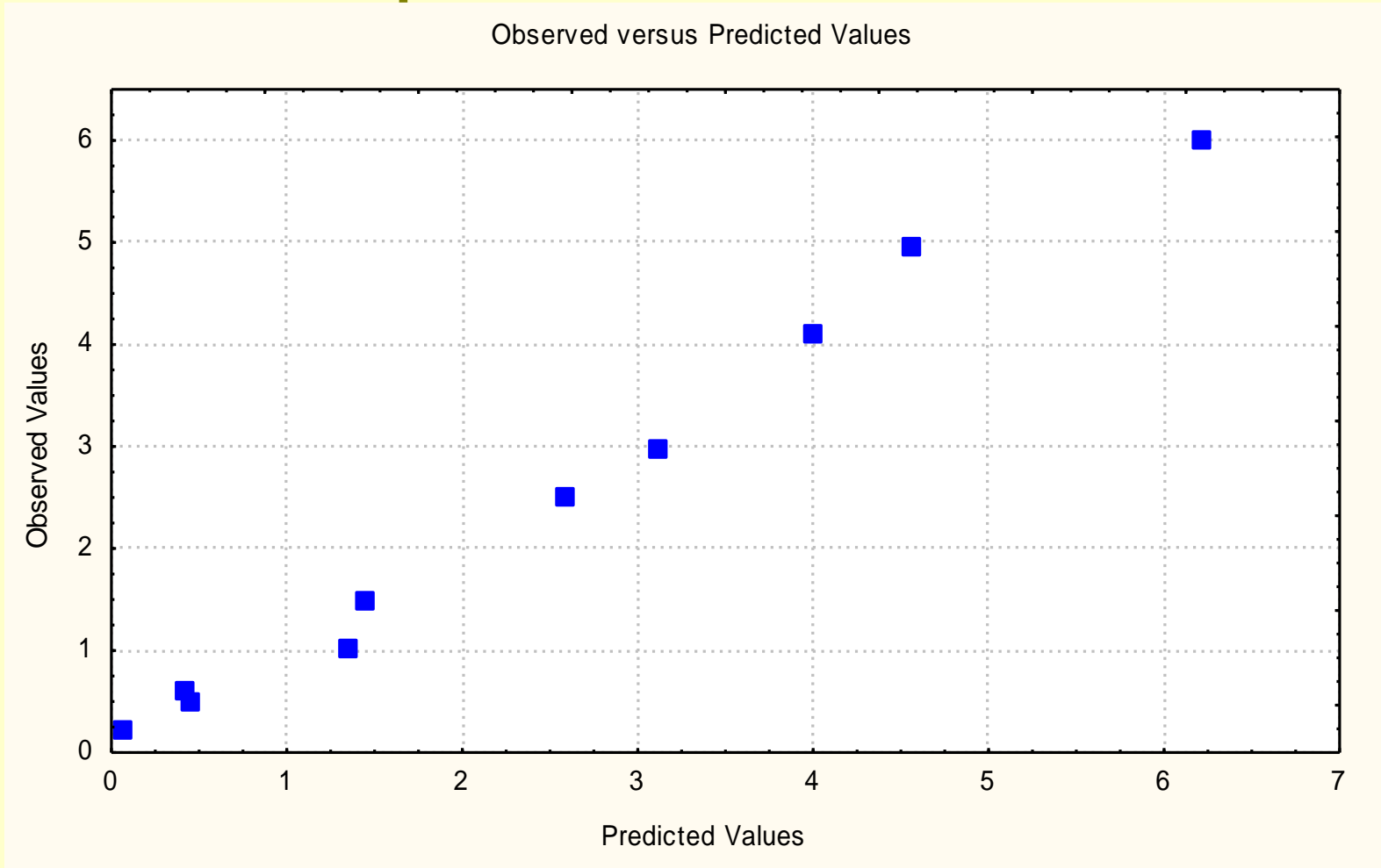
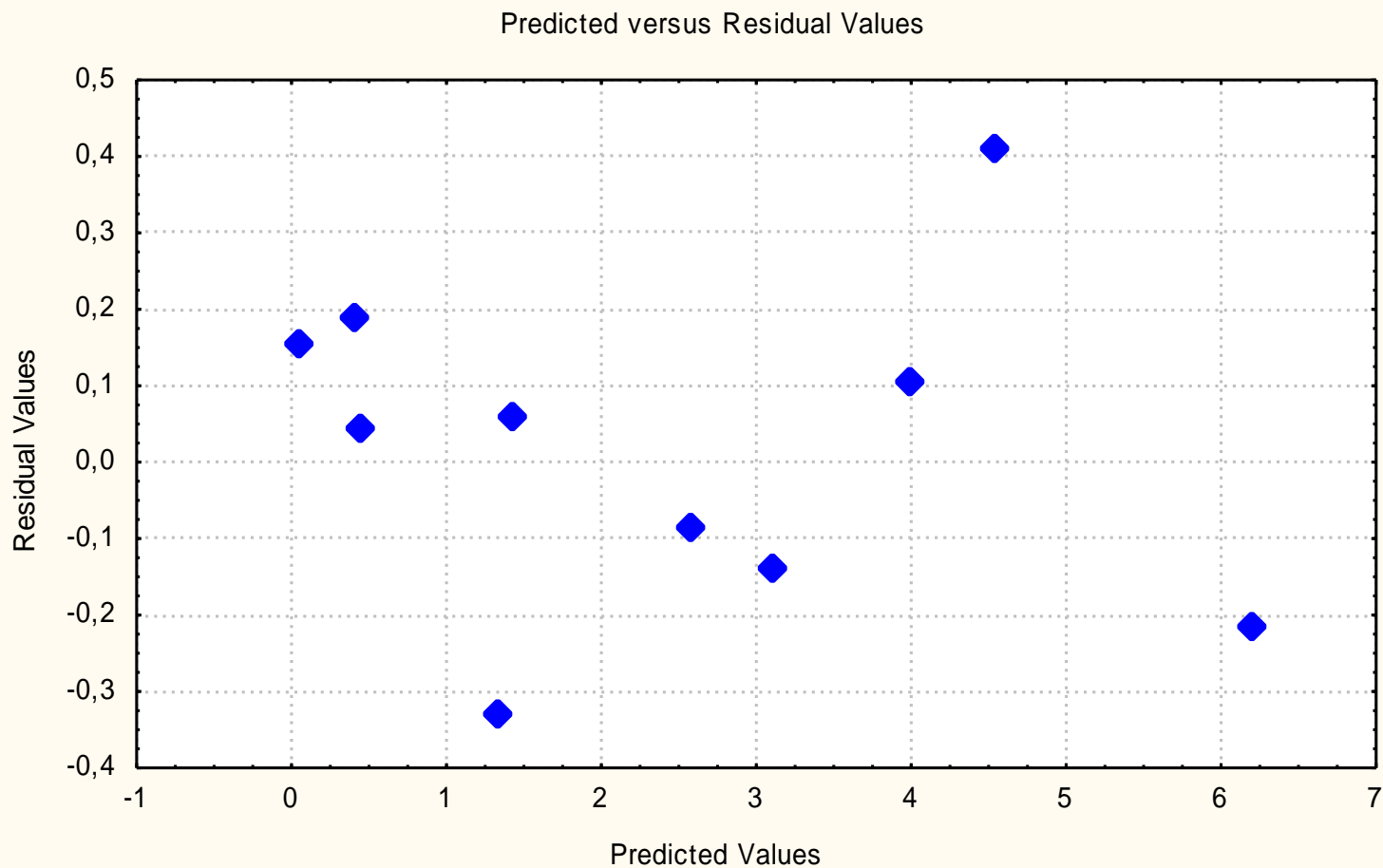


График зависимости погрешностей от расчетной величины



Анализ на систематические погрешности

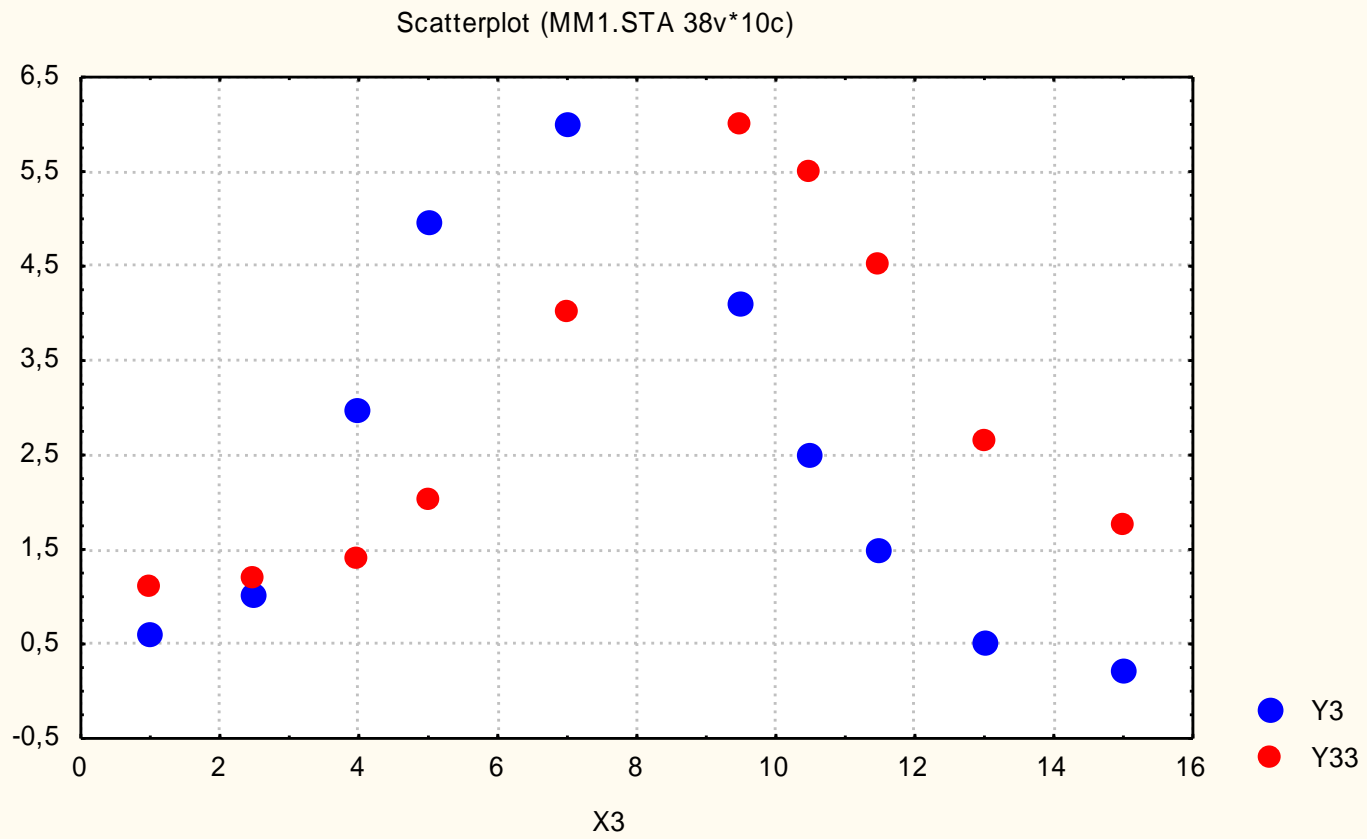
- Регрессия погрешностей на реальную величину

$$\Delta = a + bY_{\text{реальное}},$$

где a и b – коэффициенты линейной регрессии. Если a достоверно отличается от нуля, то присутствует систематическая ошибка; если $b \neq 0$

то есть зависимость погрешности от измеряемой величины.

Сравнение параметров



Статистическое доказательство значимости различий параметров

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

если $t_{расч} > t_{табл}$ для N, α , то параметры
двух аппроксимаций значимо
различаются.

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

Физический смысл сравнения параметров (пример с термофильными микроорганизмами)

- В уравнении гауссиады

$$b1 \cdot \exp \left[- \left(\frac{(x - b2)^2}{b3} \right) \right]$$

b1 – обилие вида

b2 – биологический оптимум

b3 – толерантность (мера экологической амплитуды)

Правила подбора функций

1. Определить тип кривой из VI типов
2. Есть ли априорная информация (проходит через 0, асимптота и пр.)
3. Выбрать функцию с наименьшим количеством параметров
4. Использовать априорную информацию для уменьшения числа параметров
5. На ЭВМ (программа STATISTICA) определить числовые значения параметров
6. Оценить их значимость. С помощью статистических критериев выбрать лучшую функцию (достоверность параметров, анализ погрешностей)
7. Если качество плохое, то увеличить число параметров и перейти к п.5.

Практическое занятие №1

Аппроксимация
экспериментальных данных

Задание после аппроксимации

- Открыть PARAMETERS&STAND. ERR.: списать значения параметров, их ошибок, t-критерия и уровня вероятности. Далее провести анализ погрешностей:
- DISTRIB.OF RESIDUALS. Посмотреть и проанализировать гистограмму распределения погрешностей. Выводы о погрешностях. Здесь посмотреть нормальность распределения погрешностей в услуге «Normal Probability Plot of Residuals».
- PREDICTEDvsOBSERVED. Проанализировать совпадение экспериментальных и расчетных.
- PREDICTEDvsRESIDUALS. Проанализировать изменение погрешностей с ростом функции. Вывод о наличии систематических ошибок.
- Если аппроксимация прошла неудачно, вернуться к п.3, и повторить те же операции с другим видом функции.
- Аппроксимировать значения 2-й функции: зависимости переменной Y_{11} от X_1 . Получить параметры аппроксимации для 2-й экспериментальной зависимости.
- Сравнить достоверность отличий полученных параметров по t-критерию (табличные $t_7=2.36$; $t_8=2.31$).

Заключительные вопросы (!)

Ответить на вопросы:

- (1) что указывает на хорошую аппроксимацию,
- (2) достоверны ли параметры у 2-х аппроксимаций экспериментальных зависимостей,
- (3) о чем говорят различия параметров, если эти функции отражают физический (биологический, и пр.) процесс,
- (4) о чем говорят распределения остатков.

Сравнение двух функций и
выбор лучшей

Непараметрический критерий
Вильямса-Клюота

Сравнение моделей. Критерий Вильямса-Клюта

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

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

$$V_i = a \cdot U_i$$

строят регрессию. Чем больше a , тем значительнее

отличаются модели. Дальше достоверность a по критерию Стьюдента

Если a достоверно, то модели достоверно различаются.

Если t -критерий >0 , то 1-я модель лучше, если $ta < 0$, то 2-я лучше.

Для одних и тех же данных можно предложить несколько функций. Какая лучше?

Реальные данные	
X	Y
2	1.5
5	2.4
10	3.0
20	4.0

$$y' = \left(\frac{x}{b1} \right)^{b2}$$

$$y'' = b1 \cdot \exp(b2 \cdot x)$$

- Критерий Вильямса-Клута (по Рыбалко «МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ КОНТРОЛЯ НАДЁЖНОСТИ ОБЪЕКТОВ ЭНЕРГЕТИКИ », 2010)

Каждая из функций дает ошибки (погрешности) Δ :

1) Рассчитывают параметр V :
$$V_i = \frac{1}{2} (\Delta'_i + \Delta''_i)$$

2) Рассчитывают параметр U :
$$U_i = (\Delta''_i - \Delta'_i)$$

3) Находят регрессию V от U :
$$V = \alpha \cdot U$$

Статистический анализ

- Если α достоверна и положительна, то 1-я модель лучше
- При положительном и статистически значимом критерии α первая модель лучше, при отрицательном и значимом – вторая. Если α незначим, то модели не различаются.

Пример расчета критерия Вильямса-Клюта

(проверяется степенная функция и экспонента из примера 1)

v1	v2	Δ'	Δ''	V $V_i = \frac{1}{2}(\Delta'_i + \Delta''_i)$	U $U_i = (\Delta''_i - \Delta'_i)$	a $V_i = a \cdot U_i$	t-value	p-level для a
2	1.5	-0.08	-0.431	-0.25560	-0.3512	0.6210	4.250	0.02385
5	2.4	0.111	0.210	0.160635	0.09885			
10	3	-0.029	0.299	0.13506	0.3289	<p><u>ВЫВОД:</u> 1. Модели достоверно различаются, т.к. a достоверно; 2. Степенная функция лучше, т.к. t-value положителен.</p>		
20	4	-0.009	-0.106	-0.05797	-0.0965			

Функции, наиболее
употребительные в
почвоведении

В химии почв: уравнения сорбции

- Степенная функция

$$Q = mC^n$$

Уравнение Фрейндлиха

- Логистическая

$$A = A_{\infty} \frac{K_l C}{1 + K_l C}$$

Уравнение Ленгмюра
Аналогичные уравнения Моно,
Михаэлиса-Ментен и др.

- Гауссиада (агрохимия, биология почв, статистика и др.)

Физический смысл параметров

- В уравнении гауссиады

$$b1 \cdot \exp \left[- \left(\frac{(x - b2)^2}{b3} \right) \right]$$

b1 – обилие вида

b2 – биологический оптимум

b3 – толерантность (мера экологической амплитуды)

ФУНКЦИИ В ПОЧВОВЕДЕНИИ

Раздел почвоведения, использование	Функция Название	Вид	Автор
Накопление почвенного органического вещества. Почвоведение	Показательная	$y(t) = y_0 \cdot (1 - e^{-kt})$	Уравнение Костычева-Иенни по накоплению органического вещества почв
Основная гидрофизическая характеристика. Почвенная гидрология	Степенная	$S_e = \frac{\theta_i - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \begin{cases} \alpha \cdot P_{\kappa-c} ^{-n} & \text{для } P_{\kappa-c} \leq -\frac{1}{\alpha} \\ 1 & \text{для } P_{\kappa-c} \geq -\frac{1}{\alpha} \end{cases}$	Brooks and Corey, 1964
Основная гидрофизическая характеристика. Почвенная гидрология	Логистическая	$S_e = \frac{\theta_i - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \begin{cases} \left(\frac{1}{1 + (\alpha P_{\kappa-c})^n} \right)^m & \text{для } P_{\kappa-c} < 0 \\ \theta_s & \text{для } P_{\kappa-c} \geq 0 \end{cases}$	ван Генухтенем (<i>van Genuchten</i> , 1980)
Моментальная адсорбция Химия почв	Степенная	$Q = mC^n$	Уравнение Фрейндлиха
Моментальная адсорбция Химия почв	Логит функция	$A = A_\infty \frac{K_L C}{1 + K_L C}$	Уравнение Ленгмюра.
Поглощение веществ растением. Агрохимия	Логит функция	$J_r = \frac{J_{\max} \cdot K_m c}{1 + K_m c} - c_{\min}$	Уравнение Михаэлиса-Ментен
Кинетика 1-го порядка. Химия, физика почв	Экспоненциальная	$C_i = C_0 \cdot \exp(-k_1 t)$	
Кинетика 2-го порядка.	Логит функция	$C_i = \frac{C_0}{1 + k_2 \cdot C_0 \cdot t}$	
Кинетика нулевого порядка	Линейная	$C_i = C_0 - k_0 t$	
Логарифмическая зависимость урожая от химических веществ (удобрений)	Логарифмическая	$\lg(A - y) = \lg A - b(x - c)$ где A – максимальный урожай, y – урожай при внесении того или иного химического вещества в почву в количестве x , и b –	Уравнение Макса Айдхарда Альфреда Мичерлиха

А если мы не знаем вида? Или функция очень сложная? С несколькими экстремумами?

- Например, кривая сорбции паров воды.
- Это S-образная функция. У нас не было функций такого вида. Что делать в этом случае?
- Надо использовать принцип пошаговой регрессии, начиная с полинома.

А если мы не знаем вида? Или функция очень сложная? С несколькими экстремумами?

- Например, кривая сорбции паров воды.
- Это S-образная функция. У нас не было функций такого вида. Что делать в этом случае?
- Надо использовать принцип пошаговой регрессии, начиная с полинома.

Тема 3 «МОДЕЛИ РАВНОВЕСИЯ И ПЕРЕНОСА ВЕЩЕСТВ В ПОЧВАХ»

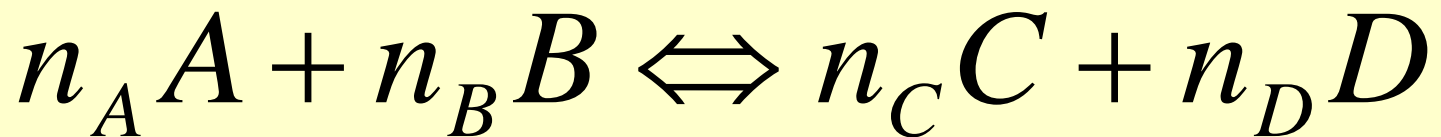
Модели, основанные на
конвективно-диффузионном
уравнении

Подтема. Модели равновесия ИОНОВ В ПОЧВАХ

1. Равновесные модели ионообмена :

- гомо- и гетерогенный обмен;
- сорбция (мгновенная и динамическая);
- другие (разложение, разбавления, осаждения и пр.)

Ионные равновесия в растворах (гомогенный обмен)



$$\mu_i = \mu_0 + RT \ln c_i \quad - \text{ для идеальных растворов}$$

$$\mu_i = \mu_0 + RT \ln a_i \quad - \text{ для реальных}$$

определения активности

$$\ln a_i = \frac{\mu_i - \mu_0}{RT} \quad \text{или} \quad a_i = \gamma_i \cdot c_i$$

Основные уравнения равновесий

$$K_{\text{равн}} = \frac{a_D^{n_D} \cdot a_C^{n_C}}{a_A^{n_A} \cdot a_B^{n_B}}$$

$$-\lg \gamma_i = \frac{z_i^2 \cdot A \sqrt{I}}{1 + r^0 \cdot B \sqrt{I}}$$

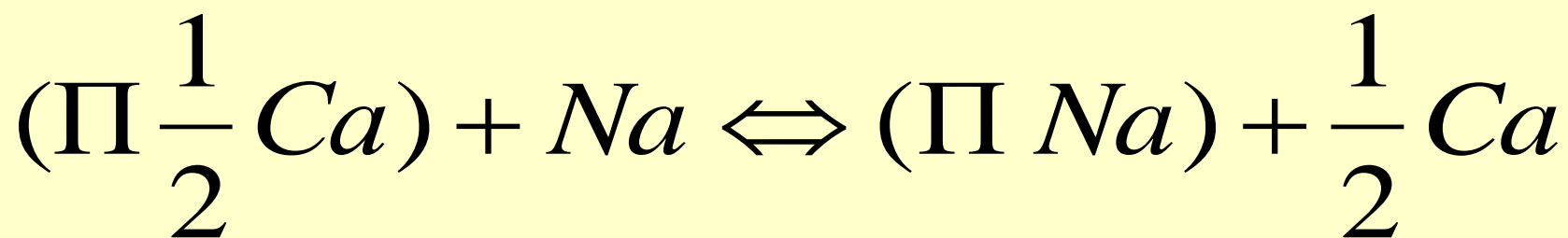
уравнение Дебая-Хюккеля

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

И

Уравнение материального баланса

Ионные равновесия при наличии твердой фазы (гетерогенный обмен)



$$K_{\text{селект}} = \frac{a_{S_{Na}} \cdot \sqrt{Ca}}{a_{S_{Ca}} \cdot a_{Na}}$$

уравнение Гапона

Программа «LIBRA»

Расчеты

PCO2 = .005000

- Исходные концентрации в растворе (моль/л)

IONS:

- Ca 2.00
- Mg 2.00
- Na 2.00
- SO4 2.00
- Cl 2.00

Давление CO2 .5E10-2

.....
IONS: Analytic Activities Sorbed SEDIMENTS
.....

Ca	.0514	.00419	.0000	Gypsum	56.803150
Mg	.0565	.01209	.0000	Calcite	1.653623
Na	2.0000	1.3241	.0000	Magnes.	58.304370
SO4	.1065	.005694			
Cl	2.0000	1.355732			
CO3	.577E-04	.753855E-06			
HCO3	.268E-02	.116985E-02			

Ion str 2.14579

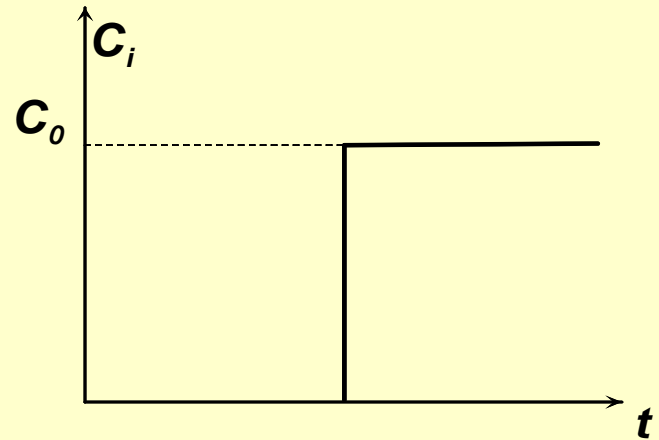
pH 7.139159

alpha .693426

3. Модели переноса веществ в почвах

- Конвективно-диффузионное уравнение;
- Параметры равновесия и переноса солей:
 - Гомогенные химические равновесия;
 - Гетерогенные химические равновесия
- Модели солепереноса.

Конвективный перенос веществ



Уравнение неразрывности для переноса ионов (веществ)

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial q_c}{\partial z}$$

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

Конвективный перенос

$$\frac{\partial c}{\partial t} = v \cdot \frac{\partial c}{\partial z}$$

$$v = \frac{q_w}{\varepsilon} \quad \text{где } q_w \text{ — макроскопическая скорость потока по Дарси}$$

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