

НЕКЛАССИЧЕСКАЯ КИНЕТИЧЕСКАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АДСОРБЦИИ ПАРОВ ВОДЫ ПОЧВАМИ

Ю. И. Федоров, В. Д. Павлидис, М. В. Чкалова

*Оренбургский государственный аграрный университет**460014, г. Оренбург, ул. Челюскинцев, 18**E-mail: pavlidis@mail.ru**Поступила в редакцию 14.10.2022, принята к печати 28.02.2023*

В работе представлена неклассическая кинетическая математическая модель сорбции паров воды почвами, являющаяся обобщением модели, разработанной М. Гризмером (M. Grismer). В рамках модели оценка динамики сорбции паров воды сводится к исследованию решений задачи Коши для нелинейного неоднородного дифференциального уравнения Риккати относительно основной величины, характеризующей процесс сорбции, – объемной влажности почвы. В предлагаемой модели, в отличие от модели М. Гризмера, присутствует стационарный свободный член уравнения Риккати – параметр процесса, характеризующий стационарное внешнее воздействие на почвенную систему и влияющий на моделируемый сорбционный процесс. Наличие данного параметра приводит к превращению процесса сорбции из свободного в вынужденный. Авторами исследовано влияние параметра модели на моделируемую динамику сорбции паров воды и возможность управления моделируемым процессом с помощью изменения параметра, что являлось основной целью работы. В каждом из диапазонов значений параметра модели изучен характер течения моделируемого процесса сорбции паров воды твердой поверхностью, выявлена его зависимость от соотношения равновесной и начальной влажности. Полученные результаты могут способствовать выявлению закономерностей динамики адсорбции паров воды из почвенного воздуха, прогнозированию состояния и оптимизации его состава, сбалансированности воздуха и влаги в почве, а также возможности управления указанными процессами.

Ключевые слова: модель, адсорбция паров воды, почвы.

NON-CLASSICAL KINETIC MATHEMATICAL MODEL OF WATER VAPOR ADSORPTION BY SOILS

Yu. I. Fedorov, V. D. Pavlidis, M. V. Chkalova

*Orenburg State Agrarian University**18, Chelyuskintsev St., Orenburg, 460014, Russian Federation**E-mail: pavlidis@mail.ru*

The paper presents a non-classical kinetic mathematical model of water vapor sorption by soils, which is a generalization of the model developed by M.E. Grismer. Within the framework of the model, the assessment of the dynamics of water vapor sorption is reduced to the study of solutions to the Cauchy problem for the non-linear inhomogeneous Riccati differential equation with respect to the main value characterizing the sorption process, i.e., the volumetric soil moisture. In the proposed model, in contrast to the model of M.E. Grismer, there is a stationary free term of the Riccati equation - a process parameter that characterizes the stationary external impact on the soil system and affects the modeled sorption process. The presence of this parameter leads to the transformation of the sorption process from free to forced. The authors investigated the influence of the model parameter on the modelled dynamics of water vapor sorption and the possibility of controlling this modelled process by changing the parameter, which was the main purpose of the work. In each range of the model parameter values the nature of the flow of the process of water vapor sorption by a solid surface was studied, as well as its dependence on the ratio of equilibrium and initial humidity was revealed. The obtained results can contribute to the identification of patterns of the dynamics of water vapor adsorption from soil air, forecasting the state and optimization of soil air composition, the balance of air and moisture in the soil, as well as the possibility of controlling these processes.

Keywords: model, adsorption of water vapor, soil.

ВВЕДЕНИЕ

В агропочвоведении и агроэкологии задача количественного описания газовой фазы почв и ее динамики является весьма актуальной. Это связано с необходимостью эффективного решения ряда научно-производственных проблем: проведение агрофизической и экологической оценки плодородия почвы и процессов в мелиорируемых почвах, совершенствование математических методов оценки

параметров почвы для дистанционного контроля и управления ими, исследования экологической газовой функции почвы (Смагин, 2000; Смагин, 2003; Смагин, 2005; Уваров, 2018; Ковалев, Ковалева, 2020; Смагин, Карелин, 2021).

Состояние почвенного воздуха, важной составляющей которого являются пары воды, определяет физическое плодородие почв и продуктивность растительных культур. Содержание воздуха и влаги в почве должно быть оптимальным,

так как их недостаток угнетает рост агрокультур и микроорганизмов, а также может оказывать влияние на процессы фотосинтеза и разложения органических веществ (Смагин, 2000; Смагин, 2003; Смагин, 2005; Добровольский, Никитин, 1990; Заварзин, 1998; Кудяров и др., 1995).

В работах А. В. Смагина (2000, 2003, 2005) уделяется особое внимание исследованию процессов межфазовых взаимодействий, а также процессов поглощения и испарения газов и паров с поверхности почвы. Значимость указанных исследований определяется глобальными экологическими проблемами современности: парниковым эффектом, загрязнением окружающей среды, изменением климата планеты, а также осознанием важной экологической роли газовой функции почвы – регулирования газового режима атмосферы. Данной проблематике посвящен ряд работ отечественных ученых (Смагин, 2000, 2003, 2005; Уваров, 2018; Ковалев, Ковалева, 2020; Смагин, Карелин, 2021; Свирежев, 1987). Однако проблемы межфазных взаимодействий в физике газовой фазы почв настолько многогранны, что исследования в данной области почвоведения и агроэкологии далеки от своего завершения.

Исследованием проблем адсорбции паров воды почвами занимались многие ученые, в том числе S. Brunauer, P.H. Emmet, E. Teller (Brunauer, Emmet, Teller, 1938), M. Grismer (1987, 2015), H.D. Orchiston (1953), Г. В. Харитонов (2003, 2010) и др. В работе Г. В. Харитоновой (2000) изучались математические модели процессов в мелиорируемых почвах, а в работах В. А. Капинос и А. П. Тонких (1986) – почвенно-гидрофизические аспекты математического моделирования агроэкосистем.

Данное исследование посвящено одной из актуальных проблем агроэкологии и почвоведения – моделированию взаимодействия паров воды с твердой фазой почв. В работе предложена неклассическая кинетическая математическая модель сорбции паров воды почвами, являющаяся развитием модели, которую разработал M. Grismer (2015). В построенной авторами модели, в отличие от модели M. Грисмера, присутствует параметр, характеризующий стационарное внешнее воздействие на почвенную систему, влияющий на моделируемый сорбционный процесс и приводящий к превращению его из свободного в вынужденный (возмущенный).

Целью работы являлось определение свойств параметра модели, характеризующего влияние стационарного внешнего воздействия на моделируемый процесс адсорбции паров воды, и возможности управления данным процессом.

Методы, используемые в данной работе, применялись авторами ранее при моделировании реально протекающих физико-химических процессов (Pavlidis, Fedorov, Chkalova, Suleymenova, 2020).

ОБЪЕКТЫ И МЕТОДЫ

Газовая фаза почв состоит из газов и паров. Газы в обычных природных условиях находятся только в однофазном состоянии. Почва является физической поликомпонентной системой, и «некоторые из ее

компонентов способны в природном диапазоне варьирования термодинамических условий образовывать все три фазы – жидкую, газообразную и твердую, причем количественное описание такой системы требует знания большого числа переменных и параметров состояния» (Смагин, 2005). При взаимодействии газов и паров с твердой фазой почвы происходит их поглощение (адсорбция), а также конденсация в капиллярных порах. Адсорбируемые газы и пары не конденсируются на поверхности почвы при малых концентрациях, недостаточных для возникновения конденсации. Конденсируются только пары вещества, адсорбирующиеся при температурах ниже критической, состояние равновесия которых с жидкой фазой наступает в естественных термодинамических условиях (Смагин, 2000; Смагин, 2005; Фролов, 1989).

В соответствии с двумя указанными явлениями, сопровождающими взаимодействие газов и паров с твердой фазой почвы, среди актуальных исследований физики сорбции газов выделяются два направления: изучение поглощения газов сухими почвами и адсорбция паров воды на твердой поверхности, т.к. вода – один из самых активных естественных адсорбатов. В каждом из данных направлений изучаются два состояния системы: газы, пары – твердая фаза почвы. С одной стороны, исследуются равновесные состояния системы (равновесные модели), в которых со временем между прямыми процессами адсорбции газов и паров твердой фазой почвы и обратными процессами десорбции и испарения устанавливается термодинамическое равновесие. С другой стороны, изучается кинетика сорбции газов и паров (кинетические модели), когда параметры сорбции меняются быстрее, чем достигается термодинамическое равновесие в системе (Смагин, 2000; Смагин, 2005; Фролов, 1989).

В области исследований адсорбции газов и паров известно множество математических моделей, представленных как теоретическими, так и эмпирическими экспериментальными уравнениями. Можно назвать уравнения Гиббса, линейный закон Генри, теорию мономолекулярной адсорбции Ленгмюра, теорию полимолекулярной адсорбции БЭТ (обобщение классической теории Ленгмюра, БЭТ – аббревиатура из начальных букв имен авторов Брунауэра, Эммета, Теллера), модели Фаррера, Гаркинса-Юра, Дубинина, Финка и Джексона и др. (Смагин, 2005; Фролов, 1989; Grismer, 1987; Grismer, 2015; Харитонов и др., 2010).

Выбор той или иной модели сорбции газов и паров определяется видом адсорбата, свойствами почв (сорбента) и рядом других факторов.

Важнейшим параметром при выборе модели сорбции паров является относительное давление p/p_0 , где p (Па) – давление адсорбата в газовой фазе; p_0 (Па) – давление насыщенных паров жидкости. Насыщенным является пар, находящийся в равновесии с жидкостью. Параметры насыщенного пара (давление, концентрация, энергия) принято считать стандартными и использовать как нормирующие величины при оценке динамики процесса адсорбции. Параметр p_0 зависит от вида жидкости, температуры и

определяется экспериментально (Зуев, 1986; Глобус, 1987; Харитонов и др., 2010; Моисеев, 2019).

Под действием поверхностных сил на почве (при $0 < p < p_0$) начинается конденсация пара, поэтому в моделях сорбции паров почвами относительное давление удовлетворяет неравенству $0 < p/p_0 < 1$. Модели сорбции газов и паров классифицируются в зависимости от промежутка изменения p/p_0 : многие из указанных ранее моделей сорбции газов и паров пригодны для описания сорбции лишь в отдельных частях интервала $0 < p/p_0 < 1$ и не пригодны для всего промежутка в целом (Глобус, 1987; Смагин, 2005; Фролов, 1989; Brunauer, Emmet, Teller, 1938; Харитонов и др., 2010).

Приведенное краткое описание физического механизма адсорбции газов и паров, истории вопроса и достижений в данной области показывает, что один из основных методов исследования явления адсорбции – метод математического моделирования. Он также применен в данной работе: динамика адсорбции паров воды почвами изучается в рамках предложенной авторами неклассической математической кинетической модели, представленной неоднородным нелинейным дифференциальным уравнением. Рассматриваемая модель является развитием и обобщением модели сорбции паров, предложенной профессором Калифорнийского университета в Дэвисе (департамент земельных, воздушных и водных ресурсов) Марком Гризмером (2015). В модели Гризмера уравнение сорбции однородное. Говоря о свойстве однородности дифференциального уравнения в модели Гризмера, авторы имеют в виду именно многофазную почвенную систему, находящуюся в обычных (естественных) термодинамических условиях и не подвергающуюся воздействию искусственно созданных или естественных необычных (экстремальных) условий.

В авторской модели, в отличие от модели Гризмера, уравнение сорбции паров воды почвами неоднородное, что более характерно для реальных почвенных систем, испытывающих внешние воздействия.

Для обозначения величин и параметров модели авторы использовали не оригинальные обозначения Гризмера, а адаптированные к российским научным исследованиям (Смагин, 2005).

Пусть $w(t)$ – изменяющаяся во времени величина объемной влажности почвы (количество адсорбированных паров воды, нормированное массой твердой фазы почвы, степень заполнения пор жидкой фазой почвы), w_p – равновесная влажность, k – параметр скорости адсорбции, w_0 – постоянная начальная влажность, t – время. Неклассическая кинетическая математическая модель адсорбции паров воды в почвах, с помощью которой произведена оценка $w(t)$, формулируется следующим образом: найти непрерывное решение $w(t)$ задачи Коши для дифференциального уравнения с заданным начальным условием:

$$w'(t) = k(w_p - w) + f, \quad w(t_0) = w_0. \quad (1)$$

В отличие от модели М. Гризмера (2015), в уравнении (1) присутствует постоянный ненулевой

свободный член f , позволяющий более точно охарактеризовать кинетику адсорбционных процессов в моделируемой почвенной системе, находящейся под стационарным внешним воздействием.

Основная цель работы – оценить влияние стационарного внешнего воздействия, характеризуемого параметром f , на динамику влаги в почве, описываемую переменной $w(t)$, в процессе сорбции паров воды в почвенной системе и возможность управления данным процессом посредством изменения параметра. Поэтому f рассматривается как параметр моделируемого сорбционного процесса. Авторы построили модель сорбции водяных паров, в которой правая часть f уравнения (1) является параметром сорбционного процесса, отражающим влияние термодинамических факторов (влажности, температуры) на процесс. При значениях f , определяемых значениями дискриминанта D характеристического многочлена ($D > 0$, $D < 0$, $D = 0$), одно и то же уравнение (1) будет моделировать сорбционные процессы разной направленности.

Авторами приведено аналитическое решение задачи Коши (1). Уравнение (1) является уравнением Риккати с постоянными коэффициентами и свободным членом:

$$w'(t) - kw_p w + kw^2 = f. \quad (2)$$

Как известно, уравнение Риккати (1) не сводится, вообще говоря, к квадратурам, однако условие постоянства коэффициентов и параметра f позволяет проинтегрировать его в конечном виде.

Заменой неизвестной функции $w(t)$ в уравнении (2) по формуле (3) на $z(t)$

$$w(t) = \frac{1}{k} \frac{z'}{z} \quad (3)$$

Взучаемая кинетическая модель адсорбции паров почвами редуцируется к задаче Коши для линейного однородного дифференциального уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами:

$$z'' - kw_p z' - kfz = 0, \quad z(0) = 1, \quad z'(0) = kw_0. \quad (4)$$

Общее решение уравнения (4) является линейной комбинацией решений фундаментальной системы, выбор которой определяется знаком дискриминанта D характеристического многочлена и его корнями λ_1 и λ_2 ,

$$D = k^2 w_p^2 \left(1 + 4f/kw_p^2 \right), \quad (5)$$

$$\lambda_1 = \frac{kw_p}{2} \left(1 - \sqrt{1 + (4/kw_p^2)f} \right),$$

$$\lambda_2 = \frac{kw_p}{2} \left(1 + \sqrt{1 + (4/kw_p^2)f} \right). \quad (6)$$

Знак дискриминанта D определяется значениями параметра f .

Находя решение задачи (4) (в соответствии с общей теорией таких уравнений) и подставляя его в формулу (3) вместо $z(t)$, определим объемную влажность почвы $w(t)$ – решение исходной задачи Коши (1), являющейся математической моделью

изучаемого сорбционного процесса. В зависимости от промежутка, которому принадлежат значения параметра f модели (знака дискриминанта D), найденное решение будет представлено тремя разными формулами.

$$1) (D > 0, \lambda_1 < 0, \lambda_2 > 0, |\lambda_1| < |\lambda_2|),$$

$$w(t) = \frac{\lambda_2}{k} - \frac{1}{k} \frac{(\lambda_2 - \lambda_1)(\lambda_2/k - w_0) \exp(-(\lambda_2 - \lambda_1)t)}{((w_0 - \lambda_1/k) + (\lambda_2/k - w_0) \exp(-(\lambda_2 - \lambda_1)t))}, \quad (7)$$

D, λ_1 и λ_2 заданы формулами (5) и (6) соответственно.

Следует отметить, что к пункту 1) относится также случай $f \geq 0$. В частности, при $f=0$ ($D = k^2 w_p^2 > 0, \lambda_1 = 0, \lambda_2 = k w_p$) из соотношения (7) как следствие получим формулу объемной влажности почвы $w(t)$, выведенную М. Гризмером:

$$w(t) = w_p - \frac{w_p(w_p/w_0 - 1) \exp(-k w_p t)}{1 + (w_p/w_0 - 1) \exp(-k w_p t)} \equiv \frac{w_p}{1 + (w_p/w_0 - 1) \exp(-k w_p t)}. \quad (8)$$

$$2) f = -(k w_p^2)/4, (D = 0, \lambda_1 = \lambda_2 = (k w_p)/2),$$

$$w(t) = \frac{w_p}{2} + \frac{w_0 - w_p/2}{1 + k(w_0 - w_p/2)t}. \quad (9)$$

$$3) f < -(k w_p^2)/4,$$

($D < 0$, корни λ_1 и λ_2 комплексно сопряженные

$$\lambda_1 = \frac{k w_p}{2} - i\beta, \lambda_2 = \frac{k w_p}{2} + i\beta,$$

$$\beta = \frac{k w_p}{2} \sqrt{(4/k w_p^2)(-f) - 1}, i - \text{мнимая единица},$$

$$w(t) = \frac{w_p}{2} + \frac{\beta \cos(\beta t + \varphi)}{k \sin(\beta t + \varphi)} = \frac{w_p}{2} + \frac{\beta}{k} \operatorname{ctg}(\beta t + \varphi), \quad (10)$$

$$A = \sqrt{1 + (k(w_0 - w_p/2)/\beta)^2}, \sin \varphi = 1/A,$$

$$\cos \varphi = k(w_0 - w_p/2)/(\beta A). \quad (11)$$

Верификация модели была проведена на базе кафедры земледелия, почвоведения и агрохимии Оренбургского государственного аграрного университета в лаборатории агрофизики почв. Лабораторные исследования проводились с использованием сушильного шкафа ШС-80-01МК-СПУ, автоматической адсорбционной установки Nova 1200e и весов ВЛТЭ-3100. Изучалась зависимость процесса адсорбции паров воды от времени с использованием данных, полученных в результате кинетических экспериментов на относительно сухом мелкозернистом почвенном материале (бентонит).

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В работе представлена авторская неклассическая кинетическая математическая модель сорбции паров воды почвами, являющаяся обобщением модели М. Гризмера (2015). Модель реализуется задачей Коши (1) для дифференциального уравнения Риккати относительно объемной влажности почвы $w(t)$. В отличие от модели М. Гризмера, в изучаемой модели присутствует стационарный свободный член уравнения (1) f – параметр, характеризующий влияние стационарного внешнего воздействия на моделируемый процесс адсорбции паров воды.

Обсудим влияние параметра f кинетической модели на результат моделирования. Авторами рассмотрены все действительные значения f . В зависимости от числового промежутка, которому принадлежат значения f модели, моделируемая объемная влажность почвы $w(t)$ может быть представлена тремя разными формулами.

1) При $-(k w_p^2)/4 < f < +\infty$ представленная формулой (7) функция $w(t)$ является дробно-линейной функцией от $\exp(-(\lambda_2 - \lambda_1)t)$.

С течением времени процесс адсорбции паров воды почвой стремится к состоянию, при котором объемная влажность почвы $w(t)$ принимает предельное значение:

$$w_{np}^{(1)} = \lim_{t \rightarrow +\infty} w(t) = \frac{\lambda_2}{k} = \frac{w_p}{2} \left(1 + \sqrt{1 + (4/k w_p^2) f} \right). \quad (12)$$

Справедливы оценки предельного значения $w_{np}^{(1)}$ процесса в (12):

– если $f > 0$, то $w_{np}^{(1)} > w_p$, рассматриваемый процесс является сорбционным, $w(t)$ увеличивается с течением времени, происходит увлажнение почвы;

– если $f = 0$ (классический случай, описываемый моделью М. Гризмера), то $w_{np}^{(1)} = w_p$, в процессе адсорбции паров воды с ростом t $w(t)$ повышается от w_0 до предельного значения w_p ;

– если $-(k w_p^2)/4 < f < 0$, то $\frac{w_p}{2} < w_{np}^{(1)} < w_p$, причем при $\lambda_2/k > w_0$ происходит поглощение паров почвой; при $\lambda_2/k = w_0$ влажность $w(t)$ постоянна $w(t) = w_p/2$, процесс стационарный; при $\lambda_2/k < w_0$ наблюдается процесс испарения почвенной влаги, $w(t)$ уменьшается от w_0 до предельного значения $w_{np}^{(1)}$.

Так, при $f = 0$ из выведенного авторами соотношения (7) как частный случай получена формула объемной влажности почвы в модели адсорбции Гризмера.

2) При $f = -(k w_p^2)/4$ представленная формулой (9) функция $w(t)$ является дробно-линейной функцией от t .

С течением времени почвенная система приходит к состоянию, в котором $w(t)$ принимает предельное значение, равное половине равновесной влажности w_p : $w_p^{(2)} = \lim_{t \rightarrow +\infty} w(t) = w_p/2$. Характер процесса существенно зависит от соотношения $w_p/2$ и w_0 : при $w_0 < w_p/2$ идет процесс сорбции паров воды, $w(t)$ возрастает от w_0 до предельного значения $w_p/2$; при $w_0 = w_p/2$ процесс становится стационарным, $w(t) = w_p/2$ – постоянная; при $w_0 > w_p/2$ происходит процесс испарения, $w(t)$ уменьшается от w_0 до предельного значения $w_p/2$.

3) При $f < -(kw_p^2)/4$ объемная влажность почвы $w(t)$ представлена формулами (10), (11). Так как функция $(\beta/k) \operatorname{ctg}(\beta t + \varphi)$ в (10) монотонно убывает на промежутке времени $0 \leq t < (\pi - \varphi)/\beta$, $\lim_{t \rightarrow (\pi - \varphi)/\beta} (\beta/k) \operatorname{ctg}(\beta t + \varphi) = -\infty$, то в данном случае явления адсорбции нет, происходит только испарение. Причем в окрестности момента времени $t_{кр}$, определяемого уравнением $\frac{\beta}{k} \operatorname{ctg}(\beta t_{кр} + \varphi) = -\frac{w_p}{2}$, происходит экстремальное испарение до $w(t) = 0$.

В серии предварительных экспериментов были определены эмпирические значения (оценки) параметров: равновесной влажности $w_p = 0,2184 \pm 0,65\%$, начальной скорости адсорбции

$c_m = 1,02 \pm 1,67\%$, начальной влажности $w_0 = 0,00047$.

Аппроксимация опытных данных аналитическими зависимостями позволила определить значения параметров $k = 0,0467$, $f = 0,0012$ из формулы (7) и построить модель временной зависимости процесса адсорбции паров воды бентонитом, представленную следующей формулой:

$$w(t) = 0,303 - \frac{0,117 \exp(-0,018t)}{0,085 + 0,303 \exp(-0,018t)}. \quad (7a)$$

В серии лабораторных экспериментов был получен массив дискретизированных данных функции, описывающей процесс адсорбции паров воды бентонитом. В ходе анализа экспериментальных данных возникла необходимость их фильтрации для получения сглаженных зависимостей. Было решено выделить среднемасштабную составляющую потока данных, уменьшив как более быстрые, так и более медленные его компоненты, посредством полосовой фильтрации на основе последовательного скользящего усреднения (инструмент Moving Average).

Таким образом, были получены данные экспериментальной зависимости $w^*(t_i)$, определяющей тренд изучаемого процесса. Далее была сформирована табл., позволяющая провести анализ отклонения средних эмпирических от модельных значений исследуемой функции. Графическая визуализация представлена на рис.

Таблица. Результаты моделирования кинетики адсорбции паров воды бентонитом.

Время t (мин)	0	3	5	7	10	12	15
$w^*(t_i)$ (г г ⁻¹)	0,00047	0,003	0,007	0,008	0,012	0,013	0,014
$w(t)$ (г г ⁻¹)	0,00047	0,0041	0,0067	0,0092	0,0130	0,0160	0,020
$(w^*(t_i) - w(t))$	0	0,0011	0,0003	0,0012	0,001	0,003	0,006
$(w^*(t_i) - w(t))^2$	0	$121 \cdot 10^{-8}$	$81 \cdot 10^{-8}$	$144 \cdot 10^{-8}$	10^{-6}	$9 \cdot 10^{-6}$	$36 \cdot 10^{-6}$

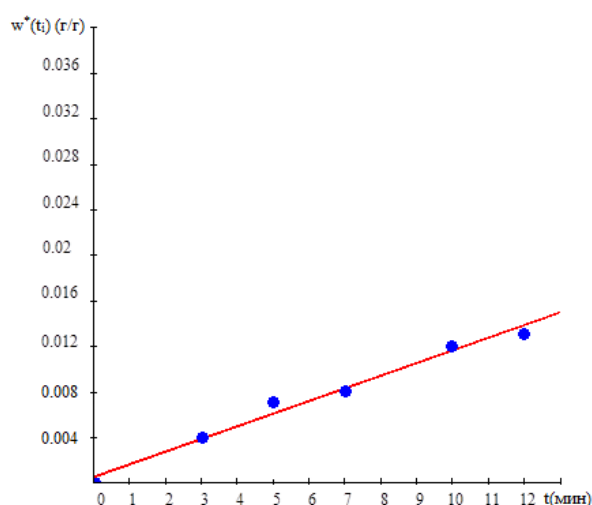


Рис. Кинетика адсорбции паров воды образцом бентонита: — фрагмент графика модельной (теоретической функции $w(t)$); фрагмент поля опытных точек эмпирической функции $w^*(t_i)$

В системе координат построены поле опытных точек (t_i ; $w^*(t_i)$) и график функции $w(t_i)$, полученной при решении дифференциального уравнения данной модели (рис.). Колебания отклика модели от аналитической функции модели незначительны при визуальном анализе графической интерпретации результатов эксперимента.

В качестве показателя адекватности модели реально протекающему процессу адсорбции паров воды образцом бентонита примем δ , равный сумме квадратов колебаний отклика модели:

$$\delta = \sum (w^*(t_i) - w(t_i))^2 = 49,46 \cdot 10^{-6}.$$

Показатель в силу неконтролируемого дрейфа системы дискретизированных данных, разброса характеристик ее элементов и, наконец, просто ошибок измерения представляет собой совокупную статистическую ошибку модели. Таким образом, ошибка моделирования составила около 5%, что свидетельствует о хорошей адекватности построенной модели реально протекающему процессу адсорбции паров воды образцом бентонита.

ВЫВОДЫ

В работе исследовано влияние стационарного внешнего воздействия, характеризуемого параметром f , на результаты моделирования динамики влаги в почве и возможность управления процессом адсорбции влаги при моделировании посредством изменения параметра. Авторами выведены формулы объемной влажности почвы в зависимости от диапазона значений рассматриваемого параметра. В каждом из диапазонов значений параметра модели изучен характер течения процесса сорбции паров воды твердой фазой, выявлена его зависимость от соотношения равновесной и начальной влажности. При нулевом значении рассматриваемого параметра как частный случай получена формула объемной влажности почвы в модели адсорбции М. Гризмера.

Исследования в данном направлении могут быть полезными при изучении процессов в мелиорируемых почвах, а также при совершенствовании математических методов оценки параметров почвы для дистанционного контроля и управления указанными параметрами с помощью цифровых технологий в АПК.

Список литературы

- Глобус А.М. Почвенно-гидрофизическое обеспечение агроэкологических математических моделей. Л.: Гидрометеиздат, 1987. 428 с.
- Добровольский Г.В., Никитин Е.Д. Функции почв в биосфере и экосистемах. М.: Наука, 1990. 260 с.
- Заварзин Г.А. Взаимодействие геосферы и биосферы // Экология и почвы. Пушино, 1998. С. 139–153.
- Зуев В.С. К методике измерения и расчета параметров уравнения БЭТ по сорбции водяного пара // Научно-технический бюллетень по агрономической физике. 1986. № 69. С. 54–58.
- Капинос В.А., Тонких А.П. Определение полной изотермы паров воды почвами // Почвоведение. 1986. № 10. С. 107–113.
- Ковалев И.В., Ковалева Н.О. Экологические функции почв и вызовы современности // Экологический вестник Северного Кавказа. 2020. Т. 16. № 2. С. 4–16.
- Кудеяров В.Н., Хакимов Ф.И., Деева Н.Ф. и др. Оценка дыхания почв России // Почвоведение. 1995. № 1. С. 33–42.
- Моисеев К.Г., Терлеев В.В. Влияние увеличения количества осадков на структуру почвенного покрова и текстурные свойства почв // Агрофизика. 2019. № 4. С. 22–30.
- Свирижев Ю.М. Нелинейные волны, диссипативные структуры и катастрофы в экологии. М.: Наука, 1987. 368 с.
- Смагин А.В. Газовая фаза почв. М.: Изд-во МГУ, 2005. 301 с.
- Смагин А.В. Теория и методы оценки физического состояния почв // Почвоведение. 2003. № 3. С. 328–341.
- Смагин А.В. Газовая функция почв // Почвоведение. 2000. № 10. С. 1211–1223.
- Смагин А.В., Карелин Д.В. О влиянии ветра на газообмен почвы и атмосферы // Почвоведение. 2021. № 3. С. 327–337.
- Уваров Г.И. Экологические функции почв. 3-е издание, стереотипное. СПб.: Лань, 2018. 296 с.
- Фролов Ю.Г. Курс коллоидной химии. М.: Химия, 1989. 464 с.
- Харитонов Г.В., Витязев В.Г., Лапекина С.И. Математическая модель адсорбции паров воды почвами // Почвоведение. 2010. № 2. С. 196–205.
- Харитонов Г.В., Шеин Е.В., Витязев В.Г., Лапекина С.И. Уравнение для описания полной изотермы адсорбции паров воды почвами // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 17. Почвоведение. 2003. № 1. С. 8–14.
- Харитонов Г.В., Витязев В.Г. Изотермы сорбции водяного пара почвами // Почвоведение. 2000. № 4. С. 446–453.
- Brunauer S., Emmet P.H., Teller E. Adsorption of gases in multimolecular layers // J. Amer. Chem. Soc. 1938. Vol. 60. pp. 309–319.
- Grismer M.E. Kinetics of water vapor adsorption on soils // Soil Sci. 1987. Vol. 143. № 5. pp. 367–371.
- Grismer M.E. Vapor adsorption kinetics and vapor diffusivity // Soil Sci. 1987. Vol. 144. № 1. pp. 1–5.
- Orchiston H.D. Adsorption of water vapor: 1. Soils at 25°C. SoilSci. 1953. 76: 453–465.
- Pavlidis V., Fedorov Y., Chkalova M., Suleymenova R. A priori estimates of the mass of the burnt materials in rooms of buildings in the integral mathematical model of the initial stage of the fire // E3S Web of Conferences. Nalchik, 2021. pp. 01–06.

References

- Globus A.M. *Pochvenno-gidrofizicheskoye obespecheniye agroekologicheskikh matematicheskikh modeley* [Soil-hydrophysical support of agroecological mathematical models]. Leningrad: Gidrometeoizdat, 1987, 428 p.
- Dobrovolskiy G.V., Nikitin E.D. *Funktsii pochv v biosfere i ekosistemakh* [Functions of soils in the biosphere and ecosystems]. Moscow: Nauka, 1990, 260 p.
- Zavarzin G.A. Vzaimodeystviye geosfery i biosfery [Interaction of geosphere and biosphere] // *Ekologiya i pochvy, Pushchino*, 1998, pp. 139–153.
- Zuyev V.S. K metodike izmereniya i raschyota parametrov uravneniya BET po sorbtzii vo-dyanogo para [On the method for measuring and calculating the parameters of the BET equation for water vapor sorption] // *Nauchno-tekhnicheskiiy byulleten' po agronomicheskoy fizike*, 1986, no. 69, pp. 54–58.
- Kapinos V.A., Tonkikh A.P. Opredeleniye polnoy izotermiy parov vody pochvami [Determination of the total isotherm of water vapor by soils] // *Pochvovedeniye*, 1986, no. 10, pp. 107–113.
- Kovalev I.V., Kovaleva N.O. Ekologicheskkiye funktsii pochv i vyzovy sovremennosti [Ecological functions of soils and modern challenges] // *Ekologicheskiiy vestnik Severnogo Kavkaza*, 2020, vol. 16, no. 2, pp. 4–16.
- Kudeyarov V.N., Khakimov F.I., Deyeva N.F. i dr. Otsenka dykhaniya pochv Rossii [Assessment of soil respiration in Russia] // *Pochvovedeniye*, 1995, no. 1, pp. 33–42.
- Moiseyev K.G., Terleyev V.V. Vliyaniye uvelicheniya kolichestva osadkov na strukturu pochvennogo pokrova i teksturnyye svoystva pochv [Effects of increased precipitation on soil cover structure and textural properties of soils] // *Agrofizika*, 2019, no. 4, pp. 22–30.
- Svirezhev Yu.M. *Nelineynyye volny, dissipativnyye struktury i katastrofy v ekologii* [Non-linear waves, dissipative structures and catastrophes in ecology]. Moscow: Nauka, 1987, 368 pp.
- Smagin A.V. *Gazovaya faza pochv* [Gas phase of soils]. Moscow: Publishing House of MSU, 2005, 301 p.
- Smagin A.V. Teoriya i metody otsenki fizicheskogo sostoyaniya pochv [Theory and methods of assessing the physical condition of soils] // *Pochvovedeniye*, 2003, no. 3, pp. 328–341.
- Smagin A.V. Gazovaya funktsiya pochv [Gas function of soils] // *Pochvovedeniye*, 2000, no. 10, pp. 1211–1223.
- Smagin A.V., Karelin D.V. O vliyaniy vetra na gazoobmen pochvy i atmosfery [On the influence of wind on the gas exchange of soil and atmosphere] // *Pochvovedeniye*, 2021, no. 3, pp. 327–337.
- Uvarov G.I. *Ekologicheskkiye funktsii pochv* [Ecological functions of soils]. 3-ye izdaniye, stereotipnoye. Saint-Petersburg: Lan', 2018, 296 p.
- Frolov Yu.G. Kurs kolloidnoy khimii [Colloidal chemistry course]. Moscow: Khimiya, 1989, 464 p.
- Kharitonova G.V., Vityazev G.V., Lapekina S.I. Matematicheskaya model' adsorbtsii parov vody pochvami [Mathematical model of water vapor adsorption by soils] // *Pochvovedeniye*, 2010, no. 2, pp. 196–205.
- Kharitonova G.V., Shein Ye.V., Vityazev V.G., Lapekina S.I. Uravneniye dlya opisaniya polnoy izotermiy adsorbtsii parov vody pochvami [Equation for describing the total isotherm of water vapor adsorption by soils] // *Vestn. Mosk. un-ta. Ser. 17. Pochvovedeniye*, 2003, no. 1, pp. 8–14.
- Kharitonova G.V., Vityazev V.G. Izotermiy sorbtzii vodyanogo para pochvami [Isotherms of water vapor sorption by soils] // *Pochvovedeniye*, 2000, no. 4, pp. 446–453.
- Brunauer S., Emmet P.H., Teller E. Adsorption of gases in multimolecular layers // *J. Amer. Chem. Soc.* 1938. Vol. 60. pp. 309–319.
- Grismer M.E. Kinetics of water vapor adsorption on soils // *Soil Sci.* 1987. Vol. 143. № 5. pp. 367–371.
- Grismer M.E. Vapor adsorption kinetics and vapor diffusivity // *Soil Sci.* 1987. Vol. 144. № 1. pp. 1–5.
- Orchiston H.D. Adsorption of water vapor: 1. Soils at 25°C. *SoilSci.* 1953. 76: 453–465.
- Pavlidis V., Fedorov Y., Chkalova M., Suleymenova R. A priori estimates of the mass of the burnt materials in rooms of buildings in the integral mathematical model of the initial stage of the fire // *E3S Web of Conferences*. Nalchik, 2021. pp. 01–06.