INSTITUUT VOOR CULTUURTECHNIEK EN WATERHUISHOUDING
NOTA no. 126 d.d. 8 februari 1962

Een numerieke oplossing voor de grafische vereffening van de pF-curve

ir.Ph.Th. Stol

Inleiding

Bij het toepassen van een formule voor de pF-curve worden nog steeds moeilijkheden ondervonden met betrekking tot de vereffeningsprocedure. De voorgestelde werkwijze - besproken in nota 113:"Het vereffenen van een formule voor de pF-curve"- lijkt rekentechnisch aan de voornaamste bezwaren tegemoet te kunnen komen, doch in slechts enkele gevallen blijkt convergentie naar een eindwaarde van de parameters op te treden. Dit valt aan de hand van de gegevens niet vooraf te voorspellen, zodat steeds afgewacht moet worden of de vereffening zal slagen. Deze ervaring werd opgedaan bij de Afdeling Bewerking Waarnemingsuitkomsten in 's-Gravenhage waar een aantal monsters met de gegeven formules zijn doorgerekend.

Door Visser werd een methode gegeven om de pF-curve van de gedaante

$$b(a - pF) = \log \frac{v^p}{(P - v)^{1-p}} \qquad (1)$$

langs grafische weg te vereffenen. Hiertoe wordt een geschatte waarde van de parameter P gebruikt ten einde een vereffening op de constanten a, b en p uit te voeren. Door verschillende waarden van P te proberen ontstaat uit de te tekenen figuur een indruk omtrent de beste waarde die aan de constante P, het poriënvolume, moet worden toegekend.

In deze nota zal uiteengezet worden op welke wijze de grafische bewerking door een numerieke kan worden vervangen. Tevens zal aangegeven worden op welke wijze de onzekerheid in het bepalen van de constanten, en dan met name van P, kan worden verminderd. Als practische doelstelling wordt nagestreefd een snellere wijze van werken te verkrijgen door met behulp van de computer uit een stelsel lineaire vergelijkingen de oplossing te laten berekenen.

24/0262/25

Van meer principiële aard is de toepassing van de beschreven methode met betrekking tot de vereffeningsprocedure. Het lijkt niet uitgesloten dat de moeilijkheden welke bij de vereffening in de richting van de v - as (zie nota 113) worden ondervonden een gevolg zijn van het feit dat beginschattingen worden gebruikt die niet voldoende dicht de optimale waarde van de parameters benaderen. Uit een vereffening in de pF-richting, waarin ook de parameter P betrokken wordt, worden waarden voor de parameters gevonden die als beginschatting voor een volgende vereffening kunnen dienen.

De grafische vereffening

De uitgangsformule (1) wordt voor de grafische vereffening als volgt herleid:

$$b(a - pF) = p \log v - (1 - p) \log(P - v)$$

waarna met $(1 - p) = q$ ontstaat

$$b(a - pF) = \log v - q \left\{ \log v + \log(P - v) \right\}$$

en met andere symbolen:

$$b(a - pF) = c_1 - q\,(c_1 + c_2) \tag{2}$$

Deze formule dient tot grondslag van de grafische vereffening. Hierin worden v en (P - v) op logarithmische schalen uitgezet, (P - v) in negatieve richting, waardoor de afstand tussen de polygonen c_1 en c_2 gegeven wordt door:

$$\Delta = c_1 - q\,(c_1 - c_2) \tag{3}$$

waardoor uit (2)

$$pF = -\frac{1}{b}\,\Delta + a \tag{4}$$

Dit is een rechte in pF en Δ als variabelen. De constanten a en b kunnen hierin door grafische vereffening bepaald worden. Opgemerkt wordt dat (3) slechts kan worden verkregen door voor P à priori een waarde aan te nemen.

De numerieke vereffening

De uitgangsformule (1) wordt nu in de volgende vorm gebracht:

$$pF + \frac{1}{b} \log v - \frac{q}{b} \left\{ \log v + \log (P - v) \right\} - a = \delta$$

Hierin stelt δ de afwijking tussen berekende en gemeten waarde voor en de eis is nu dat de som van de kwadraten van δ minimaal is dus:

$$[\delta\delta] \text{ minimaal}$$

De voorwaarden zijn nu:

$$\frac{\partial [\delta\delta]}{\partial a} = 0 \qquad (5)$$

$$\frac{\partial [\delta\delta]}{\partial b} = 0 \qquad (6)$$

$$\frac{\partial [\delta\delta]}{\partial q} = 0 \qquad (7)$$

$$\frac{\partial [\delta\delta]}{\partial P} = 0 \qquad (8)$$

waarin:

$$[\delta\delta] = \Sigma \left[pF + \frac{1}{b} \log v - \frac{q}{b} \left\{ \log v + \log(P - v) \right\} - a \right]^2$$

Stel hierin kortheidshalve:

$$\left\{ \log v + \log(P - v) \right\} = \left\{ L \right\}$$

De voorwaarden (5), (6), (7) en (8) worden nu uitgewerkt door uitvoering van de partiële differentiaties. De factoren die hierbij als constanten optreden, met name de afgeleiden van $\frac{1}{b}$ en $\frac{q}{b}$ naar b, vallen bij het gelijk aan nul stellen weg zodat de voorwaarden zijn:

$$\Sigma \left[pF + \frac{1}{b} \log v - \frac{q}{b} \left\{ L \right\} - a \right] = 0 \qquad (5a)$$

$$\Sigma \left[pF + \frac{1}{b} \log v - \frac{q}{b} \left\{ L \right\} - a \right] \left[\log v - q \left\{ L \right\} \right] = 0 \qquad (6a)$$

$$\Sigma \left[pF + \frac{1}{b} \log v - \frac{q}{b} \left\{ L \right\} - a \right] \left\{ L \right\} = 0 \qquad (7a)$$

$$\Sigma \left[pF + \frac{1}{b} \log v - \frac{q}{b} \left\{ L \right\} - a \right] \frac{1}{P - v} = 0 \qquad (8a)$$

De sommatie vindt plaats over de n waarnemingen. Wordt nu P geschat, dan moeten de constanten a, b en q nog opgelost worden. Voor deze drie onbekenden zijn vier vergelijkingen beschikbaar zodat één vergelijking kan vervallen. Uit de bovenstaande betrekkingen wordt nu (6a) geschrapt. In deze vergelijking komen namelijk $\frac{q^2}{b}$ en aq voor waardoor (6a) niet-lineair in de onbekenden is. Uit (5a), (7a) en (8a) ontstaan nu de normaalvergelijkingen, welke in matrix-vorm luiden:

onbekenden	$\frac{q}{b}$	a	$-\frac{1}{b}$	$= 1$
	$[\{L\}]$	n	$[\log v]$	$[pF]$
	$[\{L\}^2]$	$[\{L\}]$	$[\{L\} \log v]$	$[\{L\}\, pF]$
	$[\frac{\{L\}}{P - v}]$	$[\frac{1}{P - v}]$	$[\frac{\log v}{P - v}]$	$[\frac{pF}{P - v}]$

Hieruit wordt een oplossing van $\frac{q}{b}$, a en $\frac{1}{b}$ en daarmee van a, b en p verkregen (zie Appendix).

Uiteraard is de kleinste kwadraten-oplossing die waarmee voldaan wordt aan het gehele stelsel (5a) tot en met (8a). Deze wordt verkregen wanneer voor P die waarde wordt ingevuld die eveneens aan het stelsel beantwoordt. De geschatte waarde voor P zal in het algemeen niet aan deze eis voldoen, aangezien de kwadraatsom van de afwijkingen en dus de standaardafwijking bij een geschatte waarde slechts toevallig min. zal zijn. Worden nu met verschillende waarden van het poriënvolume P de normaalvergelijkingen (5a), (7a) en (8a) opgelost, dan behoren bij deze oplossingen verschillende waarden voor de standaardafwijking s. Uit een figuur die de samenhang tussen P en s weergeeft kan vervolgens de bij het minimum van s behorende optimale waarde van P gevonden worden.

Voorbeelden van vereffening

Met de figuren in de bijlagen wordt een viertal mogelijkheden besproken die zich bij de vereffening kunnen voordoen.

In het eerste voorbeeld (fig, 1) wordt het geval gedemonstreerd dat in de betrekking tussen de standaardafwijking s en het poriënvolume P een duidelijk minimum aanwezig is. Voor dit minimum waarvoor P $\approx$ 80,6 werd de pF-curve geconstrueerd met de bijbehorende waarden van de overige constanten. Wordt het gegeven met de grootste afwijking in vochtgehalte buiten beschouwing gelaten dan ontstaat in de relatie tussen de standaardafwijking en het poriënvolume de curve s^1. De minimum waarde blijkt nu 0.004 te bedragen. Vooral bij hoge pF-waarden is de aanpassing nu veel beter.

In voorbeeld 2 (fig, 2) ontleend aan "Het vereffenen van de pF-curve langs grafische weg" (Visser) doet het geval zich voor dat geen minimum-waarde van s optreedt in het gebied tussen de hoogste bepaalde waarde van het vochtgehalte en de eindwaarde v = 100. Wordt voor dit geval aangenomen dat $P = v_{pF=0.4} + 0.1$ dan ontstaat met de bijbehorende waarden van de overige constanten de pF-curve die eveneens in de figuur staat afgebeeld.

De vereffening kan overigens nog verder doorgevoerd worden naar een minimum waarde van s, doch dan zal de methode, uitgewerkt in nota 113, gevolgd moeten worden en vervalt de eenvoudige procedure die aan de thans beschreven werkwijze ten grondslag ligt. Wordt het punt met de grootste afwijking weer buiten beschouwing gelaten, dan ontstaat de curve s^1 die bij zelfde P-waarden een kleinere standaardafwijking aanwijst dan de curve s. Ook nu ontstaat echter geen minimum.

Het derde voorbeeld (fig, 3) illustreert de mogelijkheid van optreden van een minimum in de betrekking tussen s en P bij een zeer grote waarde van het poriënvolume.

Uit de 14 berekende waarden geeft de figuur de suggestie dat dit minimum asymptotisch bereikt zal worden. Mogelijk is hier de samenhang tussen vochtgehalte en pF dusdanig vervormd door eventuele analyse fouten dat een goede aanpassing van (1) aan de meetuitkomsten niet meer met de toegepaste vereffeningsmethoden verkregen kan worden.

Wordt de bewerking uitgevoerd zonder het punt pF = 0.4 in de berekening op te nemen dan ontstaat curve s^1 die nu wel een minimum heeft en wel bij pF = 62 met s^1 = 0.281. Rekentechnisch ontstaat er een oplossing (weergegeven in de onderste grafiek van fig, 3) die echter als pF-curve niet aanvaardbaar is.

Het voorbeeld van figuur 4 tenslotte werd ontleend aan "Aanwijzingen bij het construeren van een rechte pF-curve of een rechte granulaire curve" (Fonck, nota 122). Het minimum in de betrekking tussen de standaardafwijking en het poriënvolume is vrij breed. De afwijkingen van de punten ten opzichte van de berekende curve blijken zeer klein te zijn.

In een laatste figuur (fig. 5) zijn de verschillen tussen gemeten en berekende v bij de gegeven pF-waarden uitgezet. Het blijkt dat in de voorbeelden 1 en 2 het grootste verschil optreedt bij pF = 2.0. De verschillen tussen de berekende en gemeten vochtgehalten bedragen in voorbeeld 4 ten hoogste 0.5 volume procenten.

Slotbeschouwing

In deze nota werd een methode besproken waarmee door middel van een stel lineaire vergelijkingen een oplossing verkregen kan worden voor het vereffenen van de formule voor de pF-curve (1). Deze methode kan dienen ter vervanging van een grafische methode en heeft het voordeel dat een inzicht verkregen wordt in de relatie tussen de standaardafwijking en de - overigens moeilijk door middel van vereffening te bepalen - parameter voor het poriënvolume. Met behulp van computers zou als volgt te werk gegaan kunnen worden. Volgens de in de Appendix gegeven formules worden de constanten a, b en p opgelost voor opklimmende waarden van P, te beginnen vanaf een waarde die bijvoorbeeld 0.1% hoger ligt dan het hoogste vochtgehalte. De bewerking wordt gestaakt indien voldoende informatie met betrekking tot het minimum van s is verkregen.

De verkregen uitkomsten kunnen als grondslag voor meer verfijnde werkwijzen dienen.

Appendix

Oplossing van de normaalvergelijkingen

De matrix van de normaalvergelijkingen heeft de volgende gedaante:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} A & B & C & \alpha \\ D & A & E & \beta \\ F & G & H & \gamma \end{array}\right)$$

De eerste twee bewerkingen bestaan uit het delen van de eerste rij door A en het schoonvegen van de eerste kolom. De resultaten zijn achtereenvolgens:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & \frac{B}{A} & \frac{C}{A} & \frac{\alpha}{A} \\ D & A & E & \beta \\ F & G & H & \gamma \end{array}\right)$$

en

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & \frac{B}{A} & \frac{C}{A} & \frac{\alpha}{A} \\ 0 & A-\frac{DB}{A} & E-\frac{DC}{A} & \beta-\frac{D\alpha}{A} \\ 0 & G-\frac{FB}{A} & H-\frac{FC}{A} & \gamma-\frac{F\alpha}{A} \end{array}\right)$$

Wordt vervolgens de gehele hoofddiagonaal op 1 herleid en de elementen onder deze diagonaal op 0 dan wordt de zogenaamde back-solution

$$-\frac{1}{b} = \frac{\frac{A\gamma - F\alpha}{A} - \frac{A\beta - D\alpha}{A^2 - BD}\left(\frac{GA-BF}{A}\right)}{\frac{AH-FC}{A} - \frac{AE-DC}{A^2-BD}\left(\frac{GA-BF}{A}\right)}$$

$$a = \frac{A\beta - D\alpha}{A^2 - BD} + \frac{1}{b}\;\frac{AE-DC}{A^2-BD}$$

$$\frac{q}{b} = \frac{\alpha}{\Lambda} + \frac{1}{b}\,\frac{C}{\Lambda} - a\,\frac{B}{\Lambda}$$

De laatste uitkomst kan met $p = 1 - q$ nog in de volgende vorm gebracht worden:

$$p = 1 - \frac{b\alpha}{\Lambda} - \frac{C}{\Lambda} + \frac{baB}{\Lambda}$$

De oplossing bestaat nu uit de volgende drie vergelijkingen:

$$b = \frac{(\Lambda E-DC)(G\Lambda-BF) - (\Lambda^2-BD)(\Lambda H-FC)}{(\Lambda^2-BD)(\Lambda\gamma-F\alpha) - (\Lambda\beta-D\alpha)(G\Lambda-BF)}$$

$$a = \frac{\Lambda\beta-D\alpha}{\Lambda^2-BD} + \frac{1}{b}\,\frac{\Lambda E-DC}{\Lambda^2-BD}$$

$$p = \frac{\Lambda - b\,(\alpha - aB) - C}{\Lambda}$$

Hiermee worden a, b en p dus rechtstreeks opgelost.