

根据颗粒大小分布估计土壤水分特征曲线: 分形模型的应用*

刘建立 徐绍辉

(中国科学院南京土壤研究所, 南京 210008)

摘要 根据 UNSODA 数据库和文献中的 11 种质地共 554 个样品的颗粒大小分析和水分特征曲线资料, 对 Tyler Wheatcraft, Brooks Corey 和 Rieu Sposito 三种分形模型在预测土壤水分特征曲线中的适用性进行了研究。结果表明, Brooks Corey 形式的分形模型预测精度高于其它两种模型。同时本文还指出了这三种模型适用的土壤质地范围, 即 Brooks Corey 模型对于中、粗质地的土壤预测效果好于另外两种模型, Rieu Sposito 分形模型则适用于细质地土壤, Tyler-Wheatcraft 模型的预测误差界于二者之间, 也适用于中、粗质地的土壤。

关键词 分形, 水分特征曲线, 颗粒大小分布, UNSODA

中图分类号 S152.7

非饱和土壤的水力性质(包括水分特征曲线和非饱和水力传导率函数)是进行土壤中水分与污染物运移模拟的最重要的物理参数。但是, 由于这些参数具有强烈的空间变异性, 而且野外测定耗时费力, 使得直接测定方法在较大区域的研究中往往是不可行的。近些年来, 根据土壤基本物理性质如质地、容重、有机质含量等估计土壤水力参数的间接方法在实际工作中得到了较多的应用^[1]。在这些方法当中, 分形几何方法占了相当的比重^[2]。Tyler 和 Wheatcraft^[3] 首先用颗粒大小分析资料确定空隙分形维数, 并成功地估计了土壤水分特征曲线。之后, 他们又进一步发展了这一模型^[4,5]。Rieu 和 Sposito 则提出了考虑团聚体的分形水分特征曲线理论模型^[6]。Toledo 等利用分形方法建立了土壤水分特征曲线和水力传导率模型^[7]。Kravchenko 和 Zhang 对 Tyler Wheatcraft 模型进行了改进, 提出了根据颗粒分析资料计算表面分形维数的方法^[8]。相对于土壤转换函数方法(包含神经网络方法)而言, 分形方法不需要大量的土壤样本, 而且通过理论分形来描述土壤的空隙结构分布, 在经验的土壤水分特征模型(如 Brooks 和 Corey 模型)中引入了明确的物理意义。本文根据非饱和土壤水力性质数据库——UNSODA^[9] 以及文献中的颗粒大小分析等资料对分形模型在预测水分特征曲线中的适用性进行了研究。

1 分形模型

在 Arya 和 Paris 物理-经验模型^[10]的基础上, Tyler 和 Wheatcraft 于 1989 年首先将分形几何理论引入土壤水力性质的研究中。通过采用 Sierpiński Carpet 理论分形, Tyler 和 Wheatcraft 指出, Arya-Paris 模型中的经验指数等价于弯曲空隙壁的分形维数^[3]。进一步的研究表明, 经验水分特征曲线模型(如 Brooks Corey 模型和 Campbell 模型)中的经验指数与分形维数之间存在直接的线性关系^[4,5,11]。

Arya-Paris 物理-经验模型利用了累积颗粒大小分布曲线与土壤水分特征曲线的形状相似性的概念。首先将颗粒大小分布曲线分为 n 个级别, 考虑单位质量的土样, 并假定每个级别对应于一个等价的空隙半径, 则各级别的空隙体积为,

$$V_{vi} = (W_i / \rho_p) e = \pi r_i^2 l_i; \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (1)$$

式中 V_{vi} 是对应于第 i 个级别的空隙体积, W_i 是第 i 个级别的颗粒质量, ρ_p 是固体颗粒密度, $e = (\rho_p -$

* 国家自然科学基金课题(No. 49971041)、中国科学院南京土壤研究所所长基金课题(ISSDF0004)和国家重点基础研究发展规划项目(G1999011803)

收稿日期: 2001-12-24; 收到修改稿日期: 2002-04-20

$\rho_b)/\rho_b$ 是空隙比, ρ_b 是土样的干容重, r_i 是等价的空隙半径, l_i 是空隙长度。

假定每个级别的土壤颗粒都是球形的, 并且具有一个等价的半径 R_i , 则由 n_i 个球形颗粒组成的毛细管的长度等于

$$l_i = 2R_i n_i^\alpha \quad (2)$$

$$n_i = 3W_i / (4\pi\rho_p R_i^3) \quad (3)$$

式中, α 是一个经验参数, 用于代表实际土壤中颗粒形状与分布的不规则性。Tyler 和 Wheatcraft 的研究表明^[3], α 实际上是弯曲空隙壁的分形维数 D_l 。根据分形的幂定律(Power law), D_l 可以从颗粒大小—数目关系中计算出来, 即

$$N_i R_i^{D_p} = \text{常数} \quad (4)$$

$$D_l = D_p - 2 \quad (5)$$

式中, N_i 是半径大于 R_i 的土壤颗粒的累积个数, D_p 是颗粒大小分布的分形维数。

对应于每个颗粒级别的体积水分含量, θ_i , 通过对各个级别的空隙体积累加得到, 即

$$\theta_i = \sum_{j=1}^i V_{ij} \rho_b \quad (6)$$

根据式(1)~(3), 可以得到每个颗粒级别相应的空隙半径如下

$$r_i = 0.8165R_i \sqrt[3]{en_i^{(1-\alpha)}} \quad (7)$$

压力水头则根据毛细上升方程得到

$$h_i = \frac{2\gamma}{\rho_w g r_i} \quad (8)$$

式中, γ 是水的表面张力, ρ_w 是水的比重, g 是重力加速度。利用式(1)~(8)就可以根据土壤容重、固体颗粒密度和颗粒大小分析资料计算出土壤水分特征曲线。

根据上述估计毛细管长度的方法, Kravchenko 和 Zhang 利用 Menger 海绵理论分形推导了根据颗粒大小分析资料计算土壤空隙表面分形维数的方法, 得到等价颗粒半径、质量百分含量以及表面分形维数之间的关系如下^[8]

$$W(\leq R_i) = cR_i \frac{3D_s^2 - 13D_s + 14}{D_s^2 - 5D_s + 4} + 1 \quad (9)$$

式中, $W(\leq R_i)$ 为小于等价颗粒半径 R_i 的累积质量百分含量, D_s 为表面分形维数, c 为系数。

对上式进行对数转换, 即可根据累积颗粒分布曲线得到表面分形维数。为了估计水分特征曲线, 采用了两种水分特征模型^[6,11], 其指数项均表示为分形维数的形式, 即

$$\text{Rieu Sposito 模型: } \theta(h) = \theta_0 - 1 + (h_0/h)^{3-D_s} \quad (10)$$

$$\text{Brooks Corey 模型: } \theta(h) = \theta_r + (\theta_0 - \theta_r)(h_0/h)^{3-D_s} \quad (11)$$

式中, $\theta(h)$ 是压力水头为 h 时的体积水分含量, θ_0 是饱和水分含量, θ_r 是剩余水分含量, h_0 是进气压力。

2 实例研究

本次研究共采用了 554 个土样的分析资料(表 1), 其中 549 个土样的颗粒大小分布和实测水分特征曲线来自非饱和土壤水力性质数据库 UNSODA^[9], 另外 5 个土样的分析资料来自 Arya 和 Paris^[10]。所选取的土壤从砂土到粘土共 11 种质地, 各土样都有详细的实测水分特征曲线(不少于 6 个实测值)。对颗粒大小分析级别较少(少于 5 个级别)的土壤, 采用了对数线性插值后的颗粒大小分布曲线来计算分形维数。考虑到分形模型的一般性, 式(10)和(11)中的剩余水分含量 θ_r 和进气压力 h_0 采用 Rawls 等^[12]给出的不同质地土壤的典型取值(表 1), 而没有使用实测数据。

表 1 计算中采用的平均剩余水分含量和进气压力

Table 1 Mean values of residual water content and air entry pressure used in calculation for various soil textures

土壤质地 Soil texture	样本个数 Sample number	剩余水分含量	进气压力
		Residual water content ($\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$)	Air entry pressure (cm)
砂土	134	0.020	7.25
壤砂土	52	0.035	8.70
砂壤土	81	0.041	14.71
砂质粘壤土	45	0.068	27.78
壤土	100	0.027	11.11
粉砂壤土	62	0.015	20.83
粘壤土	24	0.075	25.64
粉砂粘壤土	22	0.040	32.26
砂质粘土	1	0.109	29.41
粉砂质粘土	13	0.056	34.48
粘土	20	0.090	37.04

在模拟中,将实测的饱和水分含量 θ_0 作为水分特征曲线分形计算的拟合点。由 Tyler Wheatcraft(以下简称 TW)模型计算得出的水分特征曲线通过 RETC 程序^[13]用 van Genuchten 经验模型进行拟合,得到的光滑曲线用于实测值与计算值的对比,而采用 Rieu Sposito(简称为 KZ RS)和 Brooks Corey(简称为 KZ BC)模型的计算结果直接与实测值进行对比。体积水分含量预测的均方根误差用下式计算

$$RMSE = \left[\frac{1}{N} \sum (\theta_{measured} - \theta_{estimated})^2 \right]^{1/2} \quad (12)$$

式中, N 是实测水分含量的个数, $\theta_{measured}$ 是实测水分含量, $\theta_{estimated}$ 是分形模型计算得到的水分含量。

3 结果与讨论

根据 Tyler Wheatcraft 和 Kravchenko Zhang 模型的计算结果(表 2),不同质地土壤的平均分形维数有一定的变化趋势。总体而言,土壤质地越细,分形维数取值越大。分形维数的物理意义在于它反映了一个分形对象的复杂程度。对于 Tyler Wheatcraft 模型,分形维数表示了由土壤颗粒组成的毛细管的弯曲程度; Kravchenko Zhang 模型计算的分形维数则代表了三维空隙表面的不规则程度。粘粒的含量越高,土壤空隙的形状越复杂,分形维数也越大。

表 2 不同土壤质地的平均分形维数和体积水分含量预测误差(RMSE)

Table 2 Calculated fractal dimensions and root mean squared error for major soil textures

土壤质地 Soil texture	粘粒含量 Clay content (g kg^{-1})	Tyler Wheatcraft 模型		Kravchenko Zhang 模型		
		D_t	RMSE ($\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$)	D_s	RMSE(BC) ($\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$)	RMSE(RS) ($\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$)
砂土	28.50	0.934	0.155	2.716	0.089	0.114
壤砂土	65.73	0.997	0.126	2.804	0.078	0.114
砂壤土	130.3	1.101	0.113	2.869	0.057	0.138
砂质粘壤土	176.7	1.537	0.105	2.922	0.043	0.108
壤土	201.1	1.244	0.085	2.907	0.053	0.116
粉砂壤土	253.0	1.141	0.085	2.890	0.050	0.154
粘壤土	355.2	1.315	0.060	2.946	0.060	0.058
粉砂粘壤土	381.2	1.540	0.090	2.937	0.055	0.093
砂质粘土	359.0	0.912	0.175	2.946	0.010	0.085
粉砂质粘土	424.6	1.642	0.133	2.957	0.072	0.070
粘土	502.3	1.405	0.073	2.964	0.049	0.048

554 个土样采用 TW、KZ RS 和 KZ BC 分形模型预测, 其均方根误差的分布可从图 1 中看出。采用 KZ BC 模型估计的水分特征曲线总的来说效果最为理想, 其中水分含量预测误差小于 $0.05 \text{ cm}^3 \text{ cm}^{-3}$ 的土样占总个数的 47%, 误差小于 $0.10 \text{ cm}^3 \text{ cm}^{-3}$ 的占 82%。TW 模型的计算效果稍差, 预测误差小于 $0.10 \text{ cm}^3 \text{ cm}^{-3}$ 的土样占总个数的 65%。KZ RS 模型的拟合效果最差, 水分含量拟合误差小于 $0.10 \text{ cm}^3 \text{ cm}^{-3}$ 的仅占总数的 39%。

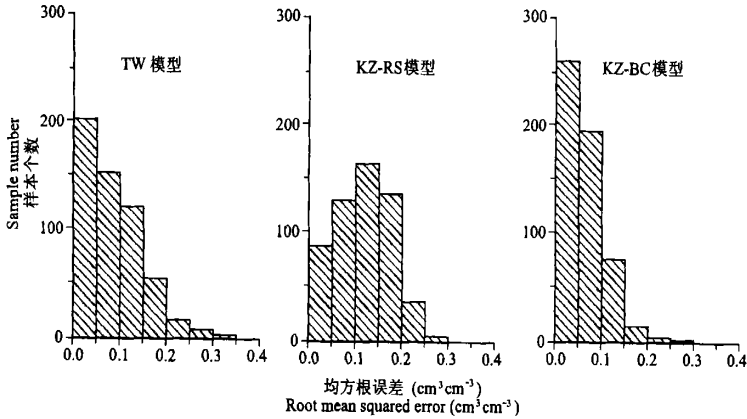
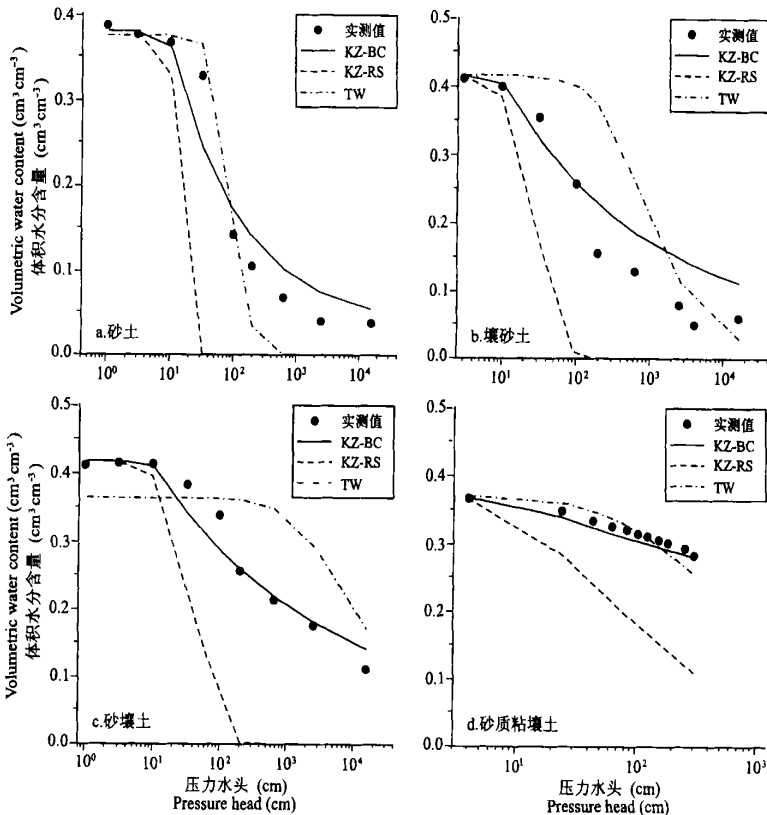


图 1 三种分形模型的水分含量预测误差分布

Fig. 1 Histograms of root mean squared error for three fractal models



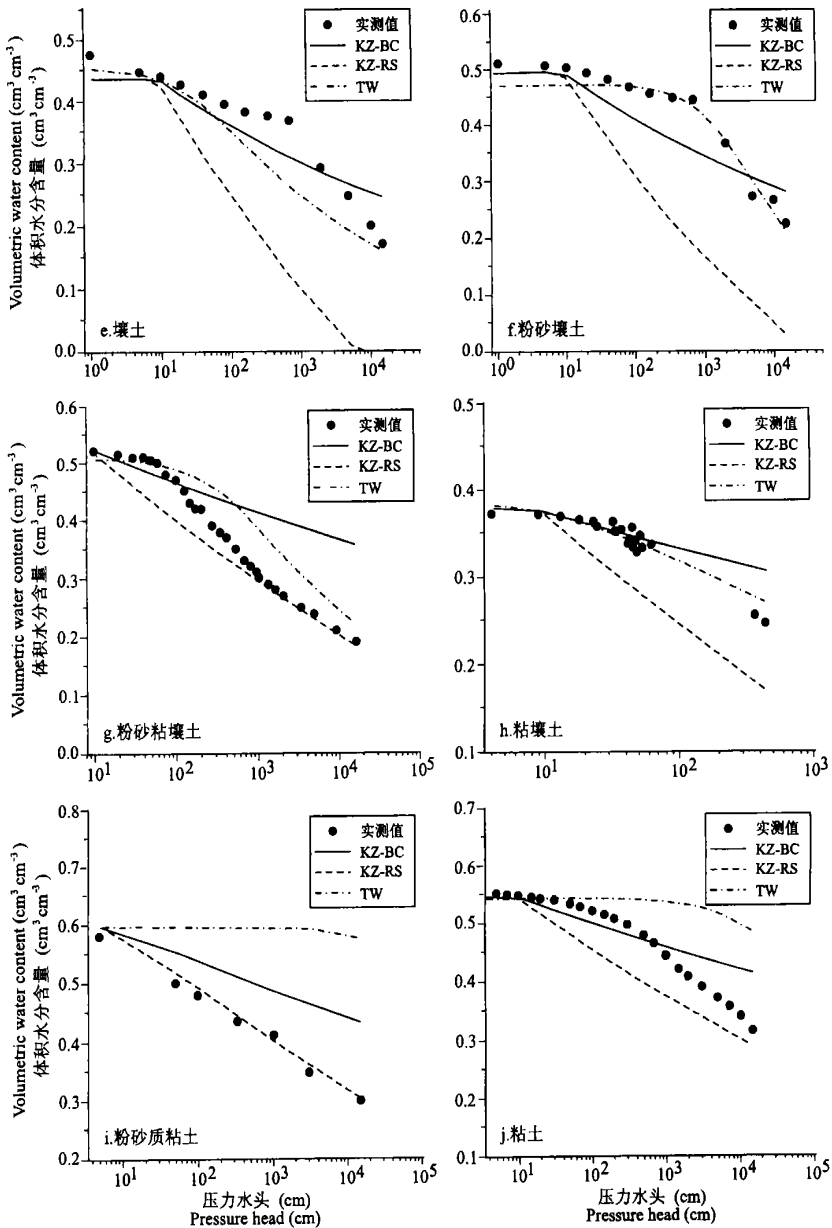


图2 不同质地的土壤采用分形模型预测的水分特征曲线与实测值的对比

Fig. 2 Comparison between measured and model-estimated water retention characteristic curves for various soil textures

同一模型对于不同质地土壤的预测效果也有较大差别。根据表2, KZ-RS方法对于中、粗质地的土壤(砂质、壤质土壤)拟合效果比KZ-BC方法差, 预测的水分特征曲线明显偏离了实测值。而对于粘土类土壤其效果优于KZ-BC方法或与其相当。TW模型的计算误差与土壤质地之间的关系不太明显, 总的来说对于中、粗质地的土壤效果要好于细质地。但即使是同一种粗质地的土壤, 有些土样的预测效果

很好,而有些则效果很差,这可能与颗粒大小分级数目过少、插值方法以及实验误差等有关。在这三种方法中,KZ BC 方法在中、粗质地土壤的预测方面最为理想,其结果很好地吻合了实测的水分特征曲线(图 2)。这一结果对于实际工作中根据土壤质地选取适用的分形模型具有一定的指导意义。

应当指出,在大多数情况下,KZ BC 模型在高吸力段过高地估计了土壤的体积水分含量。KZ RS 模型则过低地估计了高吸力段的体积水分含量,对于中粗质地的土壤表现得尤其明显(图 2a, 2b)。因此,在实际应用中还应注意这些模型适用的吸力范围。同时,分形维数是作为水分特征曲线模型中的指数项出现的,颗粒大小分布的分级个数和分析精度在很大程度上决定了预测水分特征曲线的精度,特别是对细质地的土壤这一点更为重要。

综上所述,不同分形模型在间接估计非饱和土壤的水分特征曲线中存在不同的适用范围(包括质地、吸力等)。在此范围内,分形模型预测的水分特征曲线具有足够的精度,可用于实际问题的研究之中。

参考文献

1. van Genuchten M Th, Leij F J. On estimating the hydraulic properties of unsaturated soils. In: van Genuchten M Th, *et al.* ed. Proc. Int. Worksh. on Indirect Methods of Estimating the Hydraulic Properties of Unsaturated Soils. University of California, Riverside, CA, 1992. 1~ 14
2. Young IM, Crawford J W, Rappoldt C. New methods and models for characterizing structural heterogeneity of soil. *Soil and Tillage Research*, 2001, 61: 33~ 45
3. Tyler S W, Wheatcraft S W. Application of fractal mathematics to soil water retention estimation. *Soil Science Society of America Journal*, 1989, 53: 987~ 996
4. Tyler S W, Wheatcraft S W. Fractal processes in soil water retention. *Water Resources Research*, 1990, 26: 1 047~ 1 056
5. Tyler S W, Wheatcraft S W. Fractal scaling of particle size distributions: analysis and limitations. *Soil Science Society of America Journal*, 1992, 56: 362~ 369
6. Rieu M, Sposito G. Fractal fragmentation, soil porosity, and soil water properties. I. Theory. *Soil Science Society of America Journal*, 1991, 55: 1 231~ 1 238
7. Toledo P G, Novy R A, Davis H T, *et al.* Hydraulic conductivity of porous media at low water content. *Soil Science Society of America Journal*, 1990, 54: 673~ 679
8. Kravchenko A, Zhang R D. Estimating the soil water retention from particle size distributions: A fractal approach. *Soil Science*, 1998, 163: 171~ 179
9. Leij F J, Alves W J, van Genuchten M Th, *et al.* Unsaturated soil hydraulic database, UNSODA 1.0 User' manual. USEPA Report 600/R- 96/095. U. S. Environmental Protection Agency, Cincinnati, OH. 1996
10. Arya L M, Paris J F. A physicoempirical model to predict the soil moisture characteristic from particle size distribution and bulk density data. *Soil Science Society of America Journal*, 1981, 45: 1 023~ 1 030
11. Perrier E, Rieu M, Sposito G, *et al.* Models of water retention curve for soils with a fractal pore size distribution. *Water Resources Research*, 1996, 32: 3 025~ 3 031
12. Rawls W J, Brakensiek D L, Saxton K E. Estimation of soil water properties. *Trans. ASAE*, 1982, 25: 1 316~ 1 320
13. van Genuchten M Th, Leij F J, Yates S R. The RETC code for quantifying the hydraulic functions of unsaturated soils. USEPA Report 600/2- 91/065. U. S. Environmental Protection Agency, Ada, Oklahoma, 1991

FIGURING SOIL WATER CHARACTERISTIC CURVE BASED ON PARTICLE SIZE DISTRIBUTION DATA: APPLICATION OF FRACTAL MODELS

Liu Jiar li Xu Shaor hui

(*Institute of Soil Science, Chinese Academy of Sciences, Nanjing 210008, China*)

Summary

Soil hydraulic properties, including soil water characteristic curve and the unsaturated hydraulic conductivity function, are the key information necessary for study of water and solute movement in the vadose zone. Unfortunately, the great spatial variability and the complexity of soil make direct measurement of these properties costly, time-consuming and error-prone. For a large-scale application, this may be even infeasible. Hence, indirect methods, which relate more easily measured soil physical properties to hydraulic properties, have been considered valuable alternatives. In the present study, three fractal models, i. e., Tyler-Wheatcraft, Rieu-Sposito and Brooks-Corey models are used to figure out soil water characteristic curve based on particle size distribution data. Applicability of these models is evaluated based on the particle size distribution and soil water characteristic curves of 554 soil samples cited from the Unsaturated Soil Hydraulic Database, UNSODA and other publications. Soil textures of these samples cover the range from sand to heavy clay, and each sample has more than six pairs of pressure-water content measurements. Goodness-of-fit between measured and estimated volumetric water content is expressed in terms of root mean squared error. Results show that, the predictive accuracy of Brooks-Corey model is higher than that of the other two fractal models. In addition, it is suggested that models should be applied to soils texture specifically. In other words, for medium- and coarse-textured soils, Brooks-Corey model is preferable, while Rieu-Sposito model is much more suitable for fine-textured soils. And Tyler-Wheatcraft model is in between the two aforementioned models in terms of estimation error. Tyler-Wheatcraft model can be used for both coarse- and medium-textured soils.

Key words Fractal, Soil water characteristic curve, Particle size distribution, UNSODA