

一种推求 van Genuchten 方程参数的高性能优化方法*

钱天伟^{1,2} 陈繁荣¹ 杜晓丽³ 武贵斌³

(1 中国科学院广州地球化学研究所, 广州 510640)
(2 太原科技大学环境科学与工程系, 太原 030024)
(3 中国辐射防护研究院, 太原 030006)

AN OPTIMIZATION METHOD WITH HIGH PERFORMANCE FOR ESTIMATING THE
PARAMETERS OF THE VAN GENUCHTEN'S EQUATION

Qian Tianwei^{1,2} Chen Fanrong¹ Du Xiaoli³ Wu Guibin³

(1 Guangzhou Institute of Geochemistry, Chinese Academy of Sciences, Guangzhou 510640, China)
(2 Department of Environmental Science and Engineering, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, China)
(3 China Institute for Radiation Protection, Taiyuan 030006, China)

关键词 van Genuchten 方程; 土壤水分滞留曲线; 优化; 非饱和导水率
中图分类号 S152.72 文献标识码 A

非饱和土壤的水分运动对于污染物迁移有非常重要的影响。特别是对于一些建造于非饱和带中的放射性废物处置库中的放射性核素, 由于其对环境潜在的巨大的危害性, 一旦工程屏障失效, 作为天然屏障, 非饱和土壤将对核素迁移起决定作用, 因此, 研究非饱和土壤的水力学特征、特别是非饱和导水率的确定是核废物处置安全评价工作的重要内容。从土壤水分滞留曲线来计算非饱和导水率是实际土壤水动力学计算中常用的手段^[1]。

描述土壤水分滞留曲线有多种经验公式, 其中 van Genuchten 方程由于其曲线形状与实测结果十分接近, 近年来已被大量用于土壤水分运动的研究工作^[2~4]。该方程含有 4 个独立的未知参数, 一般可根据由压力仪法等测定的不同的压力、含水量值, 以 van Genuchten 方程的最小二乘形式作为目标函数, 利用优化方法获得这 4 个参数^[5]。从目前已发表的文献看, 一般的优化方法虽然能够获得较理想的参数值, 但多数方法对参数的初始估计值要求较高^[6,7], 使用起来尚存在不便。

本文分别采用单纯形调优法和单纯形加速法作为优化手段, 编制了相关的计算程序 REDT 和 REDJ, 对 van Genuchten 方程的 4 个独立的未知参数进行了优化拟合, 并与 van Genuchten 等开发的 RETC 程序的计算结果进行了对比, 目的在于寻找一种性能好、效率高的优化方法。

1 非饱和水力特性的数学模型

1.1 van Genuchten 方程

van Genuchten 方程的基本表达形式为:

$$\theta(h) = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{[1 + |\alpha h|^n]^m} \quad \left[n = \frac{1}{1-m}, h < 0 \right] \tag{1}$$

式中, θ 为含水量($L^3 L^{-3}$), θ_r 、 θ_s 分别是残余含水量和饱和含水量($L^3 L^{-3}$), h 为压力水头(L), $\alpha(L^{-1})$ 和 n 为表示水分滞留曲线的参数。

1.2 Mualem 水力传导率方程

Mualem 水力传导率方程的基本表达形式为:

* 中国科学院百人计划项目(中科院人教字[2000]524号)、中国博士后基金和王宽诚博士后基金项目资助
- 通讯作者
作者简介: 钱天伟(1968~), 副研究员, 博士, 现为中国科学院广州地球化学研究所博士后。主要从事核废物处置及环境修复等领域的研究工作。对 REDT 软件有兴趣者可向作者索取。E-mail: twqian@21cn.com
收稿日期: 2003-08-26; 收到修改稿日期: 2004-01-15

$$K(\theta)=K_sS^{1/2}[1-(1-S^{1/m})^m]^2 \tag{2}$$

其中, $S=\frac{\theta-\theta_r}{\theta_s-\theta_r}$, 为饱和度(-)。(2) 式中, K 、 K_s 分别为非饱和、饱和导水率(L T⁻¹)。

从(2) 式可知, 只要确定了 van Genuchten 方程, 也就是 θ 、 θ_s 、 α 和 n (或 m) 这 4 个独立的参数得到确定, 就可以计算出不同含水量的非饱和水力传速率。

2 优化模型

单纯形方法原理简单, 对目标函数要求不高, 只需要目标函数本身, 不需要目标函数的一阶或二阶导数, 是目前应用较广的一种优化方法。本文分别采用这种方法中的无约束单纯形调优法与无约束单纯形加速法进行参数寻优。

2.1 目标函数

选取 van Genuchten 方程的最小二乘形式为目标函数, 其表达式为:

$$E = \sum_{i=1}^N (\theta_i(h) - \hat{\theta}_i)^2 \tag{3}$$

式中, θ 、 $\hat{\theta}$ 分别为计算和实测的含水量, N 为实测的 $\theta \sim h$ 数据对个数。

2.2 算法

单纯形调优法的基本算法可参考文献[8]。实际计算中, 初始单纯形任意两顶点间距离本文设置为 0.1, 该值可以任意给定后试算, 越接近实际距离收敛越快。对于常见的土壤水分滞留曲线, 给定范围在 0.01~ 10 之间一般均可。在 REDT 程序中该值不需要用户确定。

需要注意的是, 为获取本文的目标函数, 在利用 van Genuchten 方程计算含水量 θ 时, 在编程过程中还需做以下限定以避免计算中出现过小或过大值而终止计算:

若 $| \alpha h | < 10^{-20}$, 则 $Rw = \frac{1}{[1 + | \alpha h |^n]^m} \approx 1$,
 $\theta(h) = \theta_s$;
否则, 令 $NAX = n \times \text{Log10} | \alpha h |$,
若 $NAX > -10$,
若 $NAX < 10$, $\theta(h) = \theta_r + (\theta_s - \theta_r)((1 + | \alpha h |^n)^{-m})$
若 $NAX < 30$, $\theta(h) = \theta_r + (\theta_s - \theta_r)(| \alpha h |^{-mn})$
否则, $NAX \leftarrow M \times NAX$,
否则, $\theta(h) = \theta_r$

否则, $\theta(h) = \theta_s$ 。
单纯形加速法的算法可参考文献[9]。

3 实例与讨论

采用单纯形调优法和单纯形加速法分别编制了 Fortran 程序 REDT 和 REDJ。利用 REDT、REDJ 和 RETC 程序分别对某黄土地区(晚更新世 Q₃ 马兰黄土上段的轻亚黏土和亚黏土) 实测的 $\theta \sim h$ 数据(采用压力仪法测得) 进行了拟合。图 1~ 图 4 分别给出了以上 3 种方法拟合的 20cm、80cm、120cm 和 160cm 深处的水分滞留曲线。

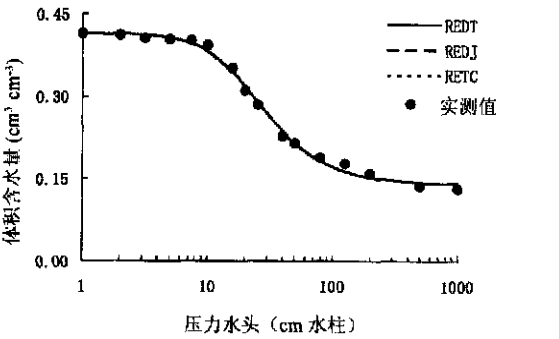


图 1 20cm 深处三种方法拟合的黄土水分滞留曲线

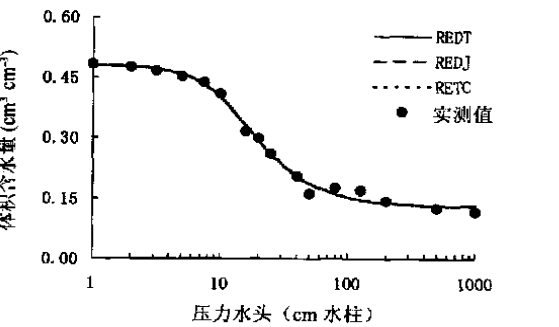


图 2 80cm 深处三种方法拟合的黄土水分滞留曲线

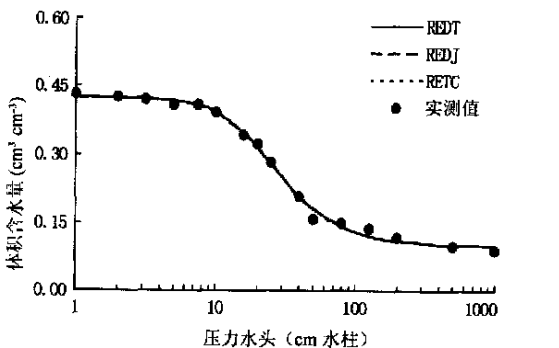


图 3 120cm 深处三种方法拟合的黄土水分滞留曲线

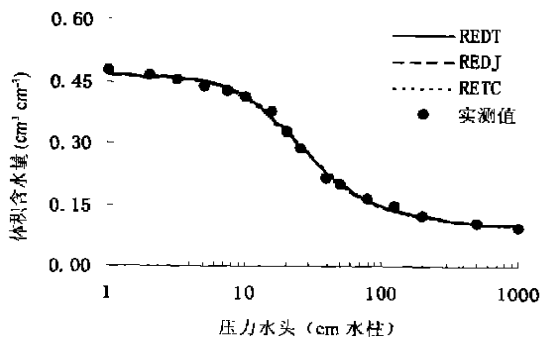


图 4 160cm 深处三种方法拟合的黄土水分滞留曲线

从图中可以看出, REDT、REDJ 拟合的各个 van Genuchten 方程参数与 RETC 几乎完全一致, 这 3 种方法获取的水分滞留曲线与实测数据拟合很好, 其中图 1、图 4 的拟合效果略好于图 2 和图 3, 原因在于不同深度拟合结果目标函数值的大小略有不同。由于本次模拟以 van Genuchten 方程的最小二乘形式作为目标函数, 因此, 最终目标函数值的大小就反映了拟合曲线对实测曲线的整体逼近程度。

在计算过程中, REDT 程序无需用户给定初值, 可通过输入的拟合参数个数等信息自行给定。REDJ 和 RETC 程序对初值要求较高, 要求初值尽量靠近最终结果, 否则会得到错误结果, 例如拟合的 θ_r 大于 θ_s 、结果参数值出现负数等等, 甚至出现不收敛的情况。

为进一步说明初值对拟合程序的影响, 图 5 给出了初值分别为 $\theta_r = 0.2$ 、 $\theta_s = 0.6$ 、 $\alpha = 0.5$ 和 $m = 0.1$ 时 RETC 对前述 20 cm 深处水分滞留曲线的拟合结果及与实测数据、REDT 拟合结果的对比。从图 5 中可见, 在给定前述初值条件下, RETC 程序模拟的水分滞留曲线与实测数据及本文开发的 REDT 程序拟合结果偏差较大。另一程序 REDJ 尽管曲线拟合效果类似 REDT, 但所得参数结果意义无法解释($\theta_r = 0.415$ 、 $\theta_s = 0.142$ 、 $\alpha = 0.054$ 和 $m = 1.63$), 饱和含水量小于残余含水量, $m > 1$ 等等, 显然是错误的。通过对不同类型土壤水分滞留曲线的优化拟合, 发现 REDT 程序基本都能得出正确的结果且收敛速度很快, REDJ 和 RETC 尽管也可以给出正确结果, 但需要给出尽可能好的参数初始估计值或不断进行初始估计值的修正才可获得。以上对比结果说明本研究开发的 REDT 程序在性能上优于 REDJ 程序和 van Genuchten 等开发的 RETC 程序, 值得进一步推广。

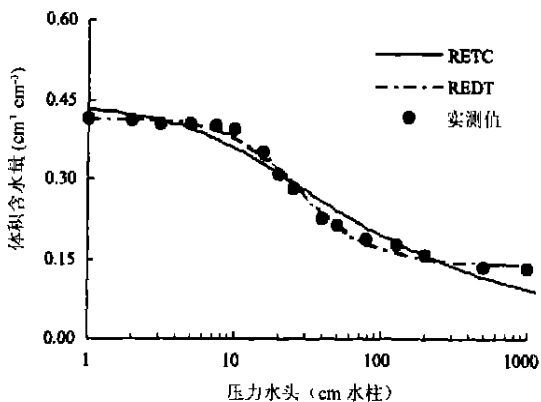


图 5 REDT 和 RETC 的性能对比

4 结 论

通过对某黄土区不同深度轻亚粘土和亚粘土的水分滞留曲线的优化拟合, 表明本研究开发的 REDT 程序和 REDJ 程序以及 van Genuchten 等开发的 RETC 程序都能给出与实测数据拟合很好的结果, 其中 REDT 程序不需要用户给出初值, 对于常见类型的土壤质地, 均能给出令人满意的拟合结果, 性能明显优于其他两个程序。

致 谢 本文黄土水分滞留实验数据由中国辐射防护研究院程金茹副研究员提供, 仅致谢忱!

参 考 文 献

[1] Yeh G T. FEMEATER: A finite-element model of water flow through saturated-unsaturated porous media-first revision. Environment Science Division Publication, No. 2943. ORNL- 5567/ R1, USA, 1987

[2] 邵明安, 王全九, Robert H. 推求土壤水分运动参数的简单入渗法 II. 实验验证. 土壤学报, 2000, 37(2): 218~ 224

[3] 朱安宁, 张佳宝, 陈效民, 等. 封丘地区土壤传递函数的研究. 土壤学报, 2003, 40(1): 53~ 57

[4] 徐绍辉, 张佳宝, 刘建立, 等. 表征土壤水分滞留曲线的几种模型的适应性研究. 土壤学报, 2002 39(4): 498~ 504

[5] 王金生, 杨志峰, 陈家军, 等. 包气带土壤水分滞留特征研究. 水利学报, 2000, (2): 1~ 6

[6] van Genuchten M Th, Leij F J, Yates S R. The RETC code for quantifying the hydraulic functions of unsaturated soils. Report No. EPA/ 600/ 2- 91/065, US Environmental Protection Agency, Office of Research and Development, Washington D C, 1991. 4~ 13

[7] 李春友, 任理, 李保国. 利用优化算法求算 van Genuchten 方程参数. 水科学进展, 2001, 12(4): 473~ 478

[8] 徐士良. FORTRAN 常用算法程序集(第二版). 北京: 清华大学出版社, 1997. 408~ 414

[9] 范鸣玉, 张莹. 最优化技术基础. 北京: 清华大学出版社, 1982. 156~ 171