#### DOI: 10.11766/trxb202005030212

周晓冰,栾永霞,林青,徐绍辉.数值反演模型模拟层状土壤水力性质[J].土壤学报,2021,58(5):1214-1223. ZHOU Xiaobing, LUAN Yongxia, LIN Qing, XU Shaohui. Numerical Inversion-based Simulation of Hydraulic Properties of Stratic Soil[J]. Acta Pedologica Sinica, 2021,58(5):1214-1223.

# 数值反演模型模拟层状土壤水力性质<sup>\*</sup>

周晓冰<sup>1</sup>, 栾永霞<sup>2</sup>, 林 青<sup>1</sup>, 徐绍辉<sup>1†</sup>

(1. 青岛大学环境科学与工程学院,山东青岛 266071; 2. 青岛市城阳区水资源服务中心,山东青岛 266109)

**摘 要:**土壤水力性质主要包括土壤水力传导率和水分特征曲线,是进行土壤水分运动数值模拟必不可少的基础数据。自然 界中的土壤大都呈层状分布,模拟中涉及的水力性质参数较均质土壤更多。通过室内土柱入渗试验,利用 Hydrus-1D 软件对 垂向一维水分运动进行数值模拟,以入渗过程中不同实测变量(累积入渗量、压力水头及二者组合)为目标函数开展数值反 演,优化得到各层土壤水力性质。根据决定系数(*R*<sup>2</sup>)、均方根误差(RMSE)、变异系数(CV*s*)、优化参数相关矩阵及优化 参数标准误差等评价指标,探讨了不同测定变量对解非唯一性、准确性等的影响。结果表明,目标函数仅含有累积入渗量时, 虽然反演模拟值与实测值符合度较高,*R*<sup>2</sup>达到 0.999, RMSE 小于 0.005 62 cm,但用压力水头实测值验证参数准确性,效果 较差,*R*<sup>2</sup>最高仅为 0.338, RMSE 小于 0.096 5 cm。使用压力水头作为目标函数进行参数优化求解时,拟合度 *R*<sup>2</sup>达到 0.855 以上,RMSE 小于 0.038 4 cm;用累计入渗量实测值进行验证,效果较好,*R*<sup>2</sup>可达到 0.99 以上,RMSE 小于 0.038 56 cm。 累积入渗量和压力水头联合反演求土壤水力性质拟合度较高,*R*<sup>2</sup>达到 0.905 以上,RMSE 小于 0.035 4 cm。虽然累积入渗量 和压力水头联合反演时 *R*<sup>2</sup>和 RMSE 指标次于累积入渗量,但累积入渗量和压力水头联合反演可以一定程度降低优化参数的 相关性和标准误差,从而降低解的非唯一性,提高解的准确性。以上结论可为层状土壤瞬态流试验反演参数过程中,测量变量的选取提供科学依据。

# Numerical Inversion-based Simulation of Hydraulic Properties of Stratic Soil

ZHOU Xiaobing<sup>1</sup>, LUAN Yongxia<sup>2</sup>, LIN Qing<sup>1</sup>, XU Shaohui<sup>1†</sup>

(1. College of Environmental Science & Engineering, Qingdao University, Qingdao, Shandong 266071, China; 2. Qingdao Chengyang District Water Resources Service Center, Qingdao, Shandong 266109, China)

Abstract: [Objective] Soil hydraulic properties refer mainly to soil hydraulic conductivity and water characteristic curve, which are essential basic data for numerical simulation of soil water movement. Most soils in nature are present in layers, but in the simulation experiments so far done, the soils were assumed to be homogeneous in texture. [Method] Through an indoor soil column infiltration test, vertical one-dimensional water movement was numerically simulated with the aid of Hydrous-1D software, and numerical inversions were carried out with the variables (cumulative infiltration volume, pressure head and

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金项目(41571214)资助 Supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 41571214)

<sup>†</sup> 通讯作者 Corresponding author, E-mail: shhxu@qdu.edu.cn

作者简介:周晓冰(1992—),女,河南安阳人,硕士,主要从事地下水环境中水和溶质运移的数值模拟。E-mail:15253239805@163.com 收稿日期: 2020-05-03; 收到修改稿日期: 2020-12-29; 网络首发日期(www.cnki.net): 2021-03-25

combination of both) measured in the infiltration process in the indoor soil column infiltration test as objective functions to optimize the parameters obtained of the hydraulic properties of each layers of the static soil. In the light of the evaluation indices, such as determination coefficient ( $R^2$ ), root mean square error (RMSE), coefficient of variation ( $CV_s$ ), correlation matrix of the optimized parameters and standard error of the optimized parameters, effects of different measured variables on non-uniqueness and accuracy of the solution were discussed. [Result] Results show that when the objective functions contain only the cumulative infiltration, although the value simulated through inversion is in good agreement with the measured value,  $R^2$  reached up to 0.999 and RMSE was less than 0.005 62 cm, but the parameters verified with the measured value of pressure head was not so good in accuracy, with  $R^2$  being only 0.338, and RMSE less than 0.096 5 cm. When the pressure head was used as the objective function for parameter optimization and solution, the fitting degree  $R^2$  reached up to 0.855 and RMSE was less than 0.038 4 cm; the use of the measured value of cumulative infiltration in verification was quite good in effect, with  $R^2$  reaching up to 0.99 and RMSE being less than 0.038 56 cm. The simulation of hydraulic properties of the soil through inversion using cumulative infiltration and pressure head in combination was quite high in goodness of fit, with  $R^2$  reaching more than 0.905 and RMSE less than 0.035 4 cm. Although in the inversion, the indices,  $R^2$  and RMSE, were inferior to that using cumulative infiltration, the inversion reduced correlation and standard error of the optimized parameters to a certain extent, thereby reducing the solution Non-uniqueness, and improving accuracy of the solution. [Conclusion] The above conclusions may serve as reference for selection of measured variables for use in the inversion for parameters of transient flow in the static soil.

Key words: Numerical inversion; Static soil; Infiltration experiment; Soil hydraulic properties; Non-uniqueness

土壤水力性质是水分运动方程的重要参数,主 要包括水力传导率  $K(\theta)$ 、土壤水分特征曲线  $\theta(h)$ 等,是建立土壤水分运动数学模型的基础。参数的 可靠性直接影响水分运动模型预测的准确性。尽管 有许多实验室和田间方法可以用来确定包气带中 以土壤水分特征曲线和水力传导率为代表的土壤 水力性质,但大多数方法需要静态或稳态流条件来 满足相应分析方法的假设条件或需要较精密的仪 器,这使得测量耗时耗力,可行性不高,特别是当 土壤的空间变异性很强且区域范围较大时, 更增加 了测量的难度。因此,人们开始发展间接方法来估 计土壤水力性质。间接方法有土壤转换函数法、物 理-经验法、分形几何法、土壤形态学网络模型和数 值反演方法等[1]。其中数值反演方法由于具有以下 优点受到研究者的关注<sup>[2-4]</sup>:(1)无需精密的测量仪 器;(2)不需要达到稳态水流,在初始和边界条件上 较直接方法更加灵活;(3)可以从单个瞬态流实验同 时估算土壤水分特征曲线和水力传导率;(4)为优 化参数提供置信区间。但数值反演方法在确定土壤 水力性质时通常存在解的非唯一性问题。

关于如何减少数值反演方法解的非唯一性和提高参数估计的准确性,国内外学者做了许多相关研究<sup>[5-7]</sup>。Toorman 等<sup>[8]</sup>借助响应曲面方法对目标函数 进行分析,使用出流量、压力水头、含水量的不同 组合作为目标函数的测量变量,结果表明,如果在 目标函数中包含压力水头值,对参数估计的敏感性 将一定程度有所提高。此外,压力水头的测量位置 对参数估计也有影响,可以据此确定需要测定的变 量及位置。van Dam 等<sup>[9]</sup>通过出流实验模拟结果, 说明仅采用累计出流量数据容易导致解的非唯一 性,而加入 $\theta(h)$ 信息可以得到可靠的参数解。Eching 等[10-11]在多步出流实验的累积出流量数据基础上添 加测定的土壤压力水头数据,以三次不同初始参数 反演结果的变异系数表征解的唯一性,在反演土壤 水分特征曲线和非饱和水力传导率时得到了较好的 拟合效果,验证了增加压力水头信息可以提高解的 唯一性。Šimunek 和 van Genuchten<sup>[12]</sup> 应用了张力 圆盘入渗数据进行数值反演,求解水力特征参数, 通过参数与目标函数的响应曲面分析使用哪些入渗 数据可以提高解的唯一性,认为可以适当增加剖面 的压力水头信息和含水量信息来提高计算准确性, 而加入累积入渗量信息不能改善拟合结果。Zijlstra 和 Dane<sup>[13]</sup>将反演方法应用于层状土壤, 土壤剖面由 一个、两个或三个不同的层位组成,设定水分含量 测量值为时间和深度的函数,下边界设为压力水头 关于时间的函数,以最小化目标函数法优化参数, 结果认为随着优化参数数量的增加,反演问题可能 变得不适定,反演的不适定性取决于输入数据集的

大小。张俊等<sup>[14-15]</sup>利用数值反演方法耦合瞬时出流 实验推求土壤水力学参数,结果显示,单步出流实 验在目标函数中增加压力水头信息、多步出流实验 联合累积出流量和压力水头信息,均可以减小反演 问题的非唯一性。

综上所述,利用数值反演方法推求土壤水力性 质方法虽然有多种,前人也做了关于降低数值反演 方法解的非唯一性和提高参数估计准确性的相关研 究,但通常只考虑单层土壤,而对层状土壤反演其 土壤水力性质的研究还较少,需要深入开展这方面 的工作。本研究结合室内层状土柱入渗试验,运用 Hydrus-1D<sup>[16]</sup>中的反演(inverse solution)模块求解 层状土壤水力性质,并分析目标函数中包含累积入 渗量、土壤压力水头及两者组合对解的唯一性及准 确性的影响。以此探究获得可靠层状土壤水力性质 需要测量的试验变量。

# 1 材料与方法

### 1.1 供试土壤

土样取自青岛市即墨区移风店镇农田,土壤类 型为棕壤。经测定土壤的基本物理性质如表1所示。

| Table 1         Physico-chemical properties of tested soils |                   |          |         |                    |                       |  |  |  |  |
|---|-------------------|----------|---------|--------------------|-----------------------|--|--|--|--|
| 深度  | + 擅 盾 册 ( 羊 国 判 ) | 石卜米古     | 粉彩      | 私約                 | 容重                    |  |  |  |  |
| Depth   | 工录质地(天西南)         | San 1/0/ | 1)J 197 | ※日 4型。<br>C1===/0/ | Bulk density          |  |  |  |  |
| /cm   | Soll lexture      | Sand/%   | 5111/%  | Clay/%             | / $(g \cdot cm^{-3})$ |  |  |  |  |
| 0~50  | 砂质壤土 Sandy loam   | 63.35    | 26.84   | 9.81               | 1.68                  |  |  |  |  |
| 50~120  | 粉砂壤土 Silty loam   | 39.84    | 53.16   | 7.00               | 1.62                  |  |  |  |  |
| 120~150   | 粉砂壤土 Silty loam   | 28.91    | 58.41   | 12.68              | 1.57                  |  |  |  |  |

表1 供试土壤的理化性质

由表 1 结果可知,采样点的土体构型相对属于 "上粗下细型"。土壤质地分为两种: 0~50 cm 为质 地较粗的砂壤,其砂粒含量明显高于下层,渗透性 较好; 50 cm 以下为粉砂壤,下部土壤黏粒含量较 高,渗透性较差。

#### 1.2 试验方法

试验采用室内层状土柱定水头积水入渗方法, 有机玻璃柱填装土柱,马氏瓶供水,使马氏瓶内管 底端与液面相平以维持 2 cm 恒定水头(图 1)。有 机玻璃柱规格:内径 19 cm,高 80 cm,一侧开六孔 安装张力计,上端设进水口,下端设出水口。马氏 瓶规格:内径 9 cm。土柱分三层按田间土层排列顺 序填装,从上至下,土层厚度分别为 20 cm、20 cm 和 25 cm。由于田间原状土容重较大,室内土柱无 法还原田间状态,故试验按照设计容重填装,从上 至下容重分别为 1.57 g·cm<sup>-3</sup>、1.45 g·cm<sup>-3</sup>、 1.40 g·cm<sup>-3</sup>。土柱表层和底层分别铺设 2 cm、5 cm 石英砂,由于石英砂质地与表层土相差较小,与底 层相差较大,为了减小模拟误差,上部土层厚度概 化为 22 cm,下部土层厚度概化为 27 cm,土柱总厚 度为 69 cm。6个张力计从上至下分别放置在 9、19、 29、39、49和59 cm 深度处。土柱底端张力计读数 开始变化时停止通水。试验全程监测各张力计读数 和马氏瓶读数。



Fig. 1 Indoor soil column test device/cm

1.3 土壤水分运动模型的建立

Hydrus-1D 模型是由国际地下水模型中心公布

的数值模拟软件,用来模拟一维饱和-非饱和多孔介 质中水、热、溶质的运移过程。

土壤水分以垂向运动为主,因此模型采用一维 垂直入渗 Richards 方程描述土壤水分运动:

$$C(h)\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(h)\frac{\partial h}{\partial z} \right] - \frac{\partial K(h)}{\partial z}$$
(1)

土壤水力函数用 van Genuchten-Mualem 模型 表示:

$$\theta(h) = \begin{cases} \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{\left[1 + |\alpha h|^n\right]^m} h < 0\\ \theta_s & h \ge 0 \end{cases}$$
(2)

$$K(h) = K_s S_e^{\ l} \left[ 1 - (1 - S_e^{\frac{1}{m}})^m \right]^2$$
(3)

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \tag{4}$$

式中, C(h) 为比水容量 (cm<sup>-1</sup>),  $K_s$  为饱和水力传 导率 (cm·min<sup>-1</sup>), K(h) 为非饱和水力传导率 (cm·min<sup>-1</sup>),  $S_e$  为饱和度,  $\theta_s$  为土壤饱和含水量 (cm<sup>3</sup>·cm<sup>-3</sup>),  $\theta_r$  为残余含水量 (cm<sup>3</sup>·cm<sup>-3</sup>),  $\alpha$  为进气 吸力相关的参数 (cm<sup>-1</sup>), m 和 n 为形状系数, h 为 压力水头(cm); z 为土壤深度(cm); t 为时间(min)。 其中, m=1-1/n, l=0.5。

以上方程包含了 5 个独立参数,  $\theta_r$ ,  $\theta_s$ ,  $\alpha$ , n和  $K_s$ , 未知参数通过最小化目标函数获取<sup>[15]</sup>。参数 的优化计算采用 Hydrus-1D, version 4.16 (US Salinity Laboratory)。Hydrus-1D 中目标函数最小化 的方法采用 LM 法,该方法结合了牛顿法和最速下 降法,为优化参数提供置信区间,并作为一种标准 方法在水力学中求非线性拟合最小平方和而被普遍 采用<sup>[17-19]</sup>。

初始条件:

 $h = h_0(z)$  0 < z < L t = 0 (5)

上边界:

 $h(0,t) = H_0 \qquad z = 0 \qquad t > 0$ 

下边界:

$$\frac{\partial h}{\partial Z} = 0 \qquad \qquad L = 69 \text{ cm} \qquad t > 0 \qquad (7)$$

式中, $h_0(z)$ 为模拟开始时的土壤压力水头值,监测点处为实测值,其余节点采用插值法计算得到, $H_0$ 为土壤表面积水深度(2 cm)。

时间和空间离散:对试验条件下的一维水分运动进行数值模拟,模拟时长为*T*=1 220 min,对应于59 cm 深度处水势传感器读数开始变化的时间。计算过程采用可变时间步长。空间步长为 0.5 cm,依据土柱总厚度 69 cm 将土壤剖分为 138 个单元,共139 个节点。

初始参数的选取: Hydrus-1D 模型各层土壤水 力学参数的选取至关重要,虽然最小化目标函数方 法计算复杂度低,但对参数初始值敏感,且得到的 优化参数可能是局部最优,而非全局最优,因此需 要尝试不同的初始参数值。对于 van Genuchten-Mualem 中的六个参数  $\theta_r$ ,  $\theta_s$ ,  $\alpha$ , n,  $K_s$ , l, 其中 l通常设为 0.5。θ,采用风干土的质量含水量与体积含 水量的关系计算得到, θ。通过试验时土柱内各层土 壤容重计算出的孔隙度获得。为降低反演的复杂程 度,反演计算时固定参数 $\theta_r$ 和 $\theta_s$ (表2),主要对3 层土壤的 $\alpha$ , n, K<sub>s</sub>共9个参数进行优化。Carsel 和 Parrish<sup>[20]</sup>根据概率分布的方法分析大量数据得到了 不同土壤类型的 van Genuchten 非饱和水力参数, 洗 取相应土质的 a, n, K<sub>s</sub>参数值作为反演的初值, 并 根据反演效果调整反演时 a, n, K, 的初值, 以达到 更好反演效果,调整后的参数见表3。

表 2 未参与反演的部分土壤水力学参数

| Table 2         Soil hydraulic parameters no | t invol | ved in | inversion |
|--|---------|--------|-----------|
|--|---------|--------|-----------|

| 土壤层次       | 土壤深度          | $	heta_r$                    | $	heta_s$                    |
|------------|---------------|------------------------------|------------------------------|
| Soil level | Soil depth/cm | / ( $cm^{3} \cdot cm^{-3}$ ) | / ( $cm^{3} \cdot cm^{-3}$ ) |
| 1          | 0~22          | 0.023                        | 0.420                        |
| 2          | 22~42         | 0.045                        | 0.450                        |
| 3          | 42~69         | 0.100                        | 0.470                        |

### 1.4 评价指标

为了探究层状土壤一维水分运动中测量变量的 类型和数量对数值反演参数唯一性和准确性的影

5期

(6)

表 3 各情景下的参数初始值

Table 3 Initial values of parameters relative to scenario

| 情景<br>Scenario | 测量变量<br>Measured<br>variable | $\alpha_1$ / ( cm <sup>-1</sup> ) | $n_1$ | $K_{s1}$ / ( cm·min <sup>-1</sup> ) | $\alpha_2$ / ( cm <sup>-1</sup> ) | <i>n</i> <sub>2</sub> | $K_{s2}$ / ( cm·min <sup>-1</sup> ) | $\alpha_3$ / ( cm <sup>-1</sup> ) | <i>n</i> <sub>3</sub> | $K_{s3}$ / ( cm·min <sup>-1</sup> ) |
|----------------|------------------------------|-----------------------------------|-------|-------------------------------------|-----------------------------------|-----------------------|-------------------------------------|-----------------------------------|-----------------------|-------------------------------------|
| Ι              | Q                            | 0.08                              | 2.8   | 0.015                               | 0.011                             | 2.8                   | 0.003                               | 0.004                             | 2.9                   | 0.000 18                            |
| II             | Q                            | 0.039                             | 3.0   | 0.025                               | 0.01                              | 2.8                   | 0.002 5                             | 0.008                             | 2.5                   | 0.000 8                             |
| III            | Q                            | 0.30                              | 1.9   | 0.015                               | 0.011                             | 2.8                   | 0.004                               | 0.006                             | 2.55                  | 0.000 18                            |
| IV             | Н                            | 0.015                             | 2.65  | 0.010 4                             | 0.006                             | 2.5                   | 0.001 94                            | 0.004                             | 2.9                   | 0.000 3                             |
| V              | Н                            | 0.04                              | 2.35  | 0.020                               | 0.011                             | 2.2                   | 0.002 5                             | 0.002 7                           | 2.0                   | 0.000 33                            |
| VI             | Н                            | 0.09                              | 1.94  | 0.029                               | 0.013                             | 2.1                   | 0.002 7                             | 0.002 5                           | 2.0                   | 0.000 28                            |
| VII            | Q+ $H$                       | 0.02                              | 2.8   | 0.018                               | 0.008                             | 2.4                   | 0.003 5                             | 0.03                              | 2.0                   | 0.000 2                             |
| VIII           | Q+ $H$                       | 0.04                              | 2.8   | 0.020                               | 0.011                             | 2.2                   | 0.003                               | 0.008                             | 2.0                   | 0.000 3                             |
| IX             | Q+H                          | 0.036                             | 3.0   | 0.015                               | 0.01                              | 2.8                   | 0.003                               | 0.003                             | 2.6                   | 0.001 3                             |

响,分别将累积入渗量(*Q*)、不同位置压力水头(*H*) 及两者组合(*Q*+*H*)作为目标函数中的测量变量, 对土壤水力学参数进行优化求解。每次反演过程使 用 3 组不同初始值(表 3)进行运算。对目标函数 为*Q*、*H*和*Q*+*H*的9次水分运动模拟过程分别用情 景(I,II,III)、(IV,V,VI)和(VII,VII,IX) 表示。采用*R*<sup>2</sup>, RMSE指标对拟合效果进行定量化 评价。*R*<sup>2</sup>也称为决定系数,代表了回归方程对实测 值的拟合度,值越接近 1,拟合效果越好。RMSE 为均方根误差,值越小代表拟合效果越好。对于解 的非唯一性用变异系数(CV<sub>s</sub>)进行评价,并结合优 化参数的相关性矩阵以及优化参数的标准误差对反 演效果进行分析。

# 2 结果与讨论

## 2.1 不同目标函数的拟合结果

图 2 表示目标函数中测量变量为累积入渗量时 拟合结果,图 3 表示目标函数中测量变量为压力水 头时拟合结果,图 4 和图 5 为目标函数中测量变量 为累积入渗量与压力水头组合时拟合结果。由图 2— 图 5 可以看出模拟值与实测值符合程度较好,但 19 cm 处压力水头的模拟较差。导致该结果的可能 原因如下:(1)19 cm 处张力计读数受气泡影响读 数上升较慢,未能及时反映出压力水头的变化,即 由于仪器引起的测量误差;(2)19 cm 处张力计位 置靠近中层土壤上界面,土体构型为上粗下细,进



图 2 目标函数为 Q 的 Q-t 拟合结果 Fig. 2 Result of Q-t fitting with objective function Q



图 5 目标函数为 Q+H时的 Q-t 拟合结果 Fig. 5 Result of Q-t fitting with the objective function Q+H

水受空气阻力影响,水分在 19 cm 处运移较慢,土 壤达到饱和需要较长时间,而模型未考虑进气阻力 致使模型默认水分到 19 cm 处后很快达到饱和,因 此模拟值与测量值吻合度较差。

#### 2.2 不同目标函数的模拟精度

表 4 为 9 种情景的反演效果定量化评价,总体拟 合效果良好, R<sup>2</sup>均在 0.855~0.999 之间, RMSE 值在 0.005 50 cm~0.038 4 cm 之间。三种目标函数下 R<sup>2</sup> 大小顺序为 Q >Q+H >H, RMSE 值大小顺序为 Q <Q+H<H。结果表明:以 R<sup>2</sup>和 RMSE 值为评价依据, 且目标函数测量变量为累积入渗量时, 拟合效果最 优; 压力水头与累积入渗量组合时效果次之; 只用压 力水头数据反演拟合效果较差。这可能是由于 19 cm 处压力水头模拟值和实测值相差较大导致的。

表 4 各情景下的模拟效果评价

| Table 4 | Evaluation | of the | simulation | in | effect relative | to scenario |
|---------|------------|--------|------------|----|-----------------|-------------|
|---------|------------|--------|------------|----|-----------------|-------------|

| 情景       | 测量变量              | - 2   | DMCE/    |
|----------|-------------------|-------|----------|
| Scenario | Measured variable | $R^2$ | KMSE/cm  |
| Ι        | Q                 | 0.999 | 0.005 58 |
| II       | Q                 | 0.999 | 0.005 62 |
| III      | Q                 | 0.999 | 0.005 50 |
| IV       | Н                 | 0.858 | 0.037 1  |
| V        | Н                 | 0.855 | 0.038 4  |
| VI       | Н                 | 0.859 | 0.038 3  |
| VII      | Q+ $H$            | 0.907 | 0.034 7  |
| VIII     | Q+ $H$            | 0.908 | 0.034 6  |
| IX       | Q+H               | 0.905 | 0.035 4  |

#### 2.3 不同目标函数反演结果的变异系数

由表 5 可以看出,目标函数仅有累积入渗量时, 变异系数总体最小,目标函数仅有压力水头时变异 系数总体最大。这可能由于累积入渗量实验误差较 小,而 19 cm 处压力水头模拟值与实测值相差较大, 导致目标函数为压力水头时变异系数较大。当目标 函数为压力水头和累积入渗量的组合时,变异系数 总体较目标函数只有压力水头时小。变异系数越小, 解的非唯一性越小。说明在压力水头数据基础上加 入累积入渗量数据可以减小解的非唯一性。

表 5 不同目标函数反演结果的变异系数

|           |            | Table 5 C                       | oefficient of va  | ariation of the | inversion rela | tive to objectiv | ve function |                       |                   |  |  |  |
|-----------|------------|---------------------------------|-------------------|-----------------|----------------|------------------|-------------|-----------------------|-------------------|--|--|--|
| 目标函数      |            | 变异系数 Coefficient of variation/% |                   |                 |                |                  |             |                       |                   |  |  |  |
| Objective |            |                                 | V                 |                 |                | V                |             |                       | V                 |  |  |  |
| function  | $\alpha_1$ | $n_1$                           | $\mathbf{K}_{s1}$ | $\alpha_2$      | $n_2$          | $K_{s2}$         | $\alpha_3$  | <i>n</i> <sub>3</sub> | $\mathbf{K}_{s3}$ |  |  |  |
| Q         | 4.5        | 1.5                             | 4.3               | 15.0            | 0.0            | 11.6             | 31.8        | 1.5                   | 14.3              |  |  |  |
| Н         | 79.4       | 16.4                            | 41.5              | 41.9            | 10.8           | 28.8             | 12.1        | 15.7                  | 32.3              |  |  |  |
| Q+ $H$    | 30.1       | 6.1                             | 10.5              | 16.1            | 10.0           | 18.2             | 22.7        | 0.0                   | 39.0              |  |  |  |

注:参数的下角标数字代表土壤层次 Note: The subscript numbers of the parameters represent the soil level

#### 2.4 不同目标函数反演参数的相关性

参数相关矩阵反映了两个参数值之间的相关 性。值为-1或+1表示完全线性相关,而0表示不相 关。参数之间的高度相关性会导致低估参数的不确 定性,降低收敛速度并增加非唯一性<sup>[21]</sup>。根据 Hydrus-1D软件模拟结果反演信息(Inverse solution information)中的相关性矩阵(correlation matrix), 分析不同目标函数在9种情景下数值反演的优化参 数之间的相关系数,相关系数绝对值大于 0.9 的数 值表示相关性显著。通过对比不同目标函数下参数 间相关性显著的数量,分析参数的不确定性和非唯 一性。

三种目标函数情况下反演参数相关性显著的总 数量,目标函数为Q、H和Q+H时分别为24、6和 7个。由此可见,当目标函数中只有Q时,反演参 数相关性显著的总数明显多于其他两种情况。说明 目标函数只包含累积入渗量时,参数之间相关性较 强。此时模型建议固定相关性较强的两个参数中的 一个,以便于对另一个参数更准确求解,否则在此 情况下得出的参数优化结果不确定性和非唯一性很 强,易出现异参同效现象。这主要是由于层状土壤 水力性质参数较多和水分运动模型的高度非线性造 成的。而目标函数为压力水头及累计入渗量和压力 水头组合时,参数相关性显著的数量基本相等,且 大幅减少,这是由于目标函数中含压力水头时,提 供了不同深度处土壤压力水头随时间变化的信息, 限定了更多约束条件,减少了异参同效现象。因此, 目标函数中包含压力水头时对降低反演过程参数非 唯一性有明显效果。

#### 2.5 不同目标函数反演参数的标准误差

Hydrus-1D 提供了关于拟合参数的统计信息, 其中参数的标准误差是度量拟合结果精确度的指标,由最优值附近的 95%置信区间确定,标准误差 越小,参数预测的 95%置信区间越窄,拟合结果确 定性越高。对三种目标函数下优化参数的标准误差 进行分析,9种情景下优化参数的标准误差列在表 6 中,9个参数的标准误差中,除 a<sub>1</sub>之外,其余参数 的标准误差大小顺序均为 Q+H<H<Q。表明累积入 渗量与压力水头组合的参数拟合精确度最高,压力 水头次之,累积入渗量最差。

#### 2.6 验证反演参数的准确性

为进一步比较目标函数中不同测量变量对数值 反演求得的参数准确度的影响,对累积入渗量反演 优化的参数结果(表 7)进行正演,预测各观测点 压力水头值随时间变化,并与实测值进行对比(图 6),验证参数的准确性<sup>[15]</sup>。同样方法对压力水头反 演优化的参数结果用累计入渗量预测值与实测值进 行对比,得出结果如图 7 所示。

由图 6 可以看出目标函数只包含累积入渗量时 所求参数对压力水头的预测值与实测值相差较大, 三次模拟 *R*<sup>2</sup>分别为 0.334、0.338、0.332, RMSE 分 别为 0.096 1 cm、0.095 6 cm、0.096 5 cm。由图 7

| 1221 |
|------|
|------|

|                | Table 6         Standard error of optimized parameters relative to scenario |                                   |       |                                   |                              |                       |                                     |                                   |                       |                                     |
|----------------|---|-----------------------------------|-------|-----------------------------------|------------------------------|-----------------------|-------------------------------------|-----------------------------------|-----------------------|-------------------------------------|
| 情景<br>Scenario | 测量变量<br>Measured<br>variable  | $\alpha_1$ / ( cm <sup>-1</sup> ) | $n_1$ | $K_{s1}$ /(cm·min <sup>-1</sup> ) | $a_2$ / ( cm <sup>-1</sup> ) | <i>n</i> <sub>2</sub> | $K_{s2}$ / ( cm·min <sup>-1</sup> ) | $\alpha_3$ / ( cm <sup>-1</sup> ) | <i>n</i> <sub>3</sub> | $K_{s3}$ / ( cm·min <sup>-1</sup> ) |
| Ι              | Q   | 0.001 1                           | 1.02  | 0.019                             | 0.021                        | 4.17                  | 0.004 8                             | 0.004                             | 4.80                  | 0.000 6                             |
| Π              | Q   | 0.001 2                           | 1.38  | 0.024                             | 0.019                        | 3.95                  | 0.006 3                             | 0.002                             | 3.04                  | 0.000 6                             |
| Ш              | Q   | 0.001 9                           | 1.45  | 0.031                             | 0.046                        | 5.03                  | 0.005 3                             | 0.015                             | 18.66                 | 0.001 9                             |
| IV             | Н   | 0.002                             | 1.21  | 0.004 1                           | 0.001                        | 1.90                  | 0.000 6                             | 0.002 7                           | 0.993                 | 0.001 1                             |
| $\mathbf{V}$   | Н   | 0.010                             | 0.77  | 0.006 2                           | 0.004                        | 0.78                  | 0.000 5                             | 0.001 6                           | 1.326                 | 0.000 4                             |
| VI             | Н   | 0.024                             | 0.51  | 0.002 9                           | 0.003                        | 0.54                  | 0.000 2                             | 0.001 3                           | 1.165                 | 0.000 4                             |
| VII            | Q+ $H$  | 0.002 7                           | 0.527 | 0.002 1                           | 0.001 4                      | 0.515                 | 0.000 5                             | 0.000 6                           | 0.405                 | 0.000 1                             |
| VIII           | Q+ $H$  | 0.002 8                           | 0.576 | 0.001 8                           | 0.001 4                      | 0.332                 | 0.000 3                             | 0.001 3                           | 0.485                 | 0.000 3                             |
| IX             | Q+ $H$  | 0.005 0                           | 0.217 | 0.001 0                           | 0.000 9                      | 0.192                 | 0.000 2                             | 0.001 8                           | 0.596                 | 0.000 6                             |

#### 表 6 各情景优化参数的标准误差

#### 表 7 各情景下参数的优化结果

 Table 7
 Optimization of the parameters relative to scenario

| 情景<br>Scenario | 测量变量<br>Measured<br>variable | $\alpha_1$ / ( cm <sup>-1</sup> ) | $n_1$ | $K_{s1}$ / ( cm·min <sup>-1</sup> ) | $\alpha_2$ / ( cm <sup>-1</sup> ) | <i>n</i> <sub>2</sub> | $K_{s2}$ / ( cm·min <sup>-1</sup> ) | $\alpha_3$ / ( cm <sup>-1</sup> ) | <i>n</i> <sub>3</sub> | <i>K</i> <sub>s3</sub><br>/ ( cm·min <sup>-1</sup> ) |
|----------------|------------------------------|-----------------------------------|-------|-------------------------------------|-----------------------------------|-----------------------|-------------------------------------|-----------------------------------|-----------------------|--|
| Ι              | Q                            | 0.001 6                           | 1.95  | 0.014                               | 0.014                             | 3.00                  | 0.006 6                             | 0.003                             | 2.83                  | 0.000 4  |
| П              | Q                            | 0.001 5                           | 1.99  | 0.013                               | 0.012                             | 3.00                  | 0.006 0                             | 0.002                             | 2.92                  | 0.000 4  |
| Ш              | Q                            | 0.001 7                           | 1.93  | 0.015                               | 0.016                             | 3.00                  | 0.007 6                             | 0.004                             | 2.87                  | 0.000 5  |
| IV             | Н                            | 0.016                             | 2.17  | 0.012 3                             | 0.006                             | 2.90                  | 0.001 6                             | 0.004 2                           | 2.00                  | 0.001 1  |
| $\mathbf{V}$   | Н                            | 0.043                             | 2.54  | 0.020 3                             | 0.011                             | 2.50                  | 0.002 4                             | 0.003 3                           | 2.60                  | 0.000 6  |
| VI             | Н                            | 0.098                             | 1.83  | 0.029 5                             | 0.015                             | 2.36                  | 0.002 8                             | 0.003 9                           | 2.00                  | 0.000 6  |
| VII            | Q+ $H$                       | 0.028                             | 2.43  | 0.017                               | 0.011                             | 2.34                  | 0.002 6                             | 0.003                             | 2.00                  | 0.000 4  |
| VIII           | Q+ $H$                       | 0.028                             | 2.32  | 0.018                               | 0.016                             | 2.00                  | 0.003 8                             | 0.004                             | 2.00                  | 0.000 6  |
| IX             | Q+ $H$                       | 0.045                             | 2.62  | 0.021                               | 0.013                             | 1.96                  | 0.003 1                             | 0.005                             | 2.00                  | 0.000 9  |

可知目标函数值包含压力水头时所求参数对累积入 渗量的预测值与实测值符合程度较高,三次模拟 R<sup>2</sup> 分别为 0.996、0.994、0.993, RMSE 分别为 0.028 76 cm、0.034 02 cm、0.038 56 cm。由此可见 运用累积入渗量数据对土壤水力学参数进行数值反 演的准确性较差,而目标函数中包含压力水头时反 演结果准确性较好,基本能反映累计入渗量和压力 水头随时间的变化关系。

#### 结 论 3

目标函数仅含有累积入渗量时反演模型模拟值

与实测值符合度虽然较高,决定系数 R<sup>2</sup>达到 0.999, 均方根误差 RMSE 小于 0.005 62 cm; 但用压力水头 实测值验证参数准确性的效果较差,  $R^2$  最高仅为 0.338, RMSE 小于 0.096 5 cm。使用压力水头作为 目标函数进行参数优化求解, 拟合度 R<sup>2</sup>达到 0.855 以上, RMSE 小于 0.038 4 cm; 对反演得到的参数 用累计入渗量实测值进行验证,R<sup>2</sup>可达到0.99以上, RMSE 小于 0.038 56 cm, 效果较好。累积入渗量和 压力水头联合反演求土壤水力性质拟合度较高, R<sup>2</sup> 达到 0.905 以上, RMSE 小于 0.035 4 cm。虽然累积 入渗量和压力水头联合反演的 R<sup>2</sup>和 RMSE 指标次于 累积入渗量,但累积入渗量和压力水头联合反演可



注: I ), II ), II )分别表示使用表 7 中情景 I ), II ), II )的参数优化结果进行正演时压力水头预测值和实测值的对比。Note: I ), II ) and III ) represents the comparison between the predicted and observed values of the pressure head in forward modeling using optimized parameters in scenario I ), II ) and III ), respectively, in Table 7.

图 6 目标函数为 Q 的压力水头预测值与实测值对比

Fig. 6 Comparison of the predicted value and observed value of the pressure head with Q being objective function



注: IV ), V ), VI ) 分别表示使用表 7 中情景 IV ), V ), VI ) 的参数优化结果进行正演时累积入渗量预测值和实测值的对比。 Note: IV ), V ) and VI ) represents the comparison between the predicted and observed values of the cumulative infiltration in forward modeling using optimized parameters in scenario IV ), V ) and VI ), respectively, in Table 7.

#### 图 7 目标函数为 H 的累积入渗量预测值与实测值对比

Fig. 7 Comparison of the predicted value and the observed value of the cumulative infiltration volume with H being the objective function

以一定程度降低优化参数的相关性和标准误差,从 而降低解的非唯一性,提高解的准确性。综上所述, 由于层状土壤水力性质的参数较多,数值反演方法 求参数的不确定性和非唯一性较强,若单独使用一 种测量数据进行反演计算,很难确定参数的准确性 和唯一性。此外,若这一测量变量误差较大,将严 重降低结果准确性。因此数值反演过程应尽量使用 不同类型和较多数量的测量变量以增加约束条件, 提高数值反演解的唯一性、确定性和准确性。

#### 参考文献(References)

- XuSH, LiuJL. Advances in approaches for determining unsaturated soil hydraulic properties[J]. Advances in Water Science, 2003, 14 (4): 494—501. [徐绍辉, 刘 建立. 土壤水力性质确定方法研究进展[J]. 水科学进 展, 2003, 14 (4): 494—501.]
- [2] Ma M M, Lin Q, Xu S H. Water infiltration characteristics of layered soil under influences of

different factors and estimation of hydraulic parameters[J]. Acta Pedologica Sinica, 2020, 57 (2): 347—358. [马蒙蒙, 林青, 徐绍辉. 不同因素影响下层 状土壤水分入渗特征及水力学参数估计[J]. 土壤学报, 2020, 57 (2): 347—358.]

- [3] Liu J J, Wang Q J, Wang W H, et al. Inverse solution soil hydraulic parameters and verification using hydrus-1D model[J]. World Sci-Tech R&D, 2010, 32(2): 173—175.
  [刘建军,王全九,王卫华,等.利用 Hydrus-1D 反推 土壤水力参数方法分析[J]. 世界科技研究与发展, 2010, 32(2): 173—175.]
- [4] Liu Z, Yang W Y, Zha Y Y, et al. Multiple inverse models for estimating soil hydraulic parameters based on field-scale moisture content observation[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2015, 31 (6): 135—144. [刘昭,杨文元,查元源,等. 基于田块尺度含水率观测的土壤水力参数多模型反演 [J]. 农业工程学报, 2015, 31 (6): 135—144.]
- [ 5 ] Lin Q, Xu S H. Parameter identification and uncertainty analysis of soil water movement model in field layered

soils based on Bayes Theory[J]. Journal of Hydraulic Engineering, 2018, 49 (4): 428—438. [林青, 徐绍辉. 基于 Bayes 理论的田间层状土壤水分运动参数识别及不确定性分析[J]. 水利学报, 2018, 49 (4): 428—438.]

- [6] Zhang Y G. Inverse method of heterogeneous hydraulic parameters for Vadose Zone flow[D]. Beijing: China University of Geosciences, 2014. [张永根. 非均质性包 气带水力参数反演方法研究[D]. 北京:中国地质大学, 2014.]
- [7] Xu X L, Chen X B, Chen L. Inversion effect evaluation of determining soil hydraulic parameters with different objective functions[J]. International Journal Hydroelectric Energy, 2018, 36 (10): 140—143, 169.
  [许晓梁,陈孝兵,陈力.不同目标函数对土壤水力参 数反演效果评价[J].水电能源科学, 2018, 36 (10): 140—143, 169.]
- [8] Toorman A F, Wierenga P J, Hills R G. Parameter estimation of hydraulic properties from one-step outflow data[J]. Water Resources Research, 1992, 28 (11): 3021-3028.
- [9] van Dam J C, Stricker J N M, Droogers P. Inverse method for determining soil hydraulic functions from one-step outflow experiments[J]. Soil Science Society of America Journal, 1992, 56 (4): 1042-1050.
- Eching S O, Hopmans J W. Optimization of hydraulic functions from transient outflow and soil water pressure data[J]. Soil Science Society of America Journal, 1993, 57 (5): 1167—1175.
- [ 11 ] Eching S O, Hopmans J W, Wendroth O. Unsaturated hydraulic conductivity from transient multistep outflow and soil water pressure data[J]. Soil Science Society of America Journal, 1994, 58 (3): 687–695.
- [ 12 ] Šimůnek J, van Genuchten M T. Estimating unsaturated soil hydraulic properties from tension disc infiltrometer

data by numerical inversion[J]. Water Resources Research, 1996, 32 (9): 2683-2696.

- [13] Zijlstra J, Dane J H. Identification of hydraulic parameters in layered soils based on a quasi-Newton method[J]. Journal of Hydrology, 1996, 181 (1/2/3/4): 233-250.
- [14] Zhang J, Xu S H, Liu J L, et al. Parameter estimation analysis of soil hydraulic properties[J]. Journal of Hydraulic Engineering, 2005, 36 (4): 445—451. [张 俊,徐绍辉,刘建立,等. 土壤水力性质参数估计的响 应界面和敏感度分析[J]. 水利学报, 2005, 36 (4): 445—451.]
- [ 15 ] Zhang J, Xu S H, Liu J L, et al. Inverse method to determine soil hydraulic properties from transient outflow experiments[J]. Journal of Hydrodynamics (Ser.B), 2004 (6): 675-680.
- [ 16 ] Vogel T, Huang K. Hydrus code for simulating one-dimensional water flow, solute transport, and heat movement in variably-saturated media: Version 5.0[M]. US Department of Agriculture, 1996.
- [ 17 ] Genuchten M T V. Non-equilibrium transport parameters from miscible displacement experiments[EB/OL]. 1981.
- [ 18 ] Kool J B, Parker J C, van Genuchten M T. ONESTEP: A nonlinear parameter estimation program for evaluating soil hydraulic properties from one-step outflow experiments, Bulletin 58-3, Virginia Agr. Exp. Station, Virginia, 1985.
- [19] Kool J B, Parker J C, van Genuchten M T. Parameter estimation for unsaturated flow and transport models—A review[J]. Journal of Hydrology, 1987, 91(3/4): 255—293.
- [ 20 ] Carsel R F, Parrish R S. Developing joint probability distributions of soil water retention characteristics[J].
   Water Resources Research, 1988, 24 (5): 755-769.
- [21] Šimůnek J, Hopmans J W. Parameter optimization and nonlinear fitting[M]. SSSA Book Series. Madison, WI, USA: Soil Science Society of America, 2002: 139–157.

(责任编辑: 檀满枝)