

# 根系水质模型中土壤与作物参数优化及其不确定性评价

房全孝<sup>1,2</sup>

(1. 青岛农业大学旱作农业技术实验室, 青岛 266109;  
2. 中国科学院南京土壤研究所土壤与农业可持续发展国家重点实验室, 南京 210008)

**摘要:** 农业系统模型参数优化存在很高的不确定性, 是模型应用研究的重点和难点。该研究利用自动优化程序 PEST (parameter estimation software) 对根系水质模型 (root zone water quality model, RZWQM) 中土壤参数 (土壤水力学参数和根系生长参数) 和作物遗传参数进行了优化, 结果表明 PEST 优化模拟结果明显优于传统试错法的校正结果, 且具有较高的参数优化效率。模型参数优化不确定性评价表明校正数据和参数初始值的选择、土壤水力学参数估算方法、不同类型参数间的相互作用以及优化目标方程 (误差来源计算) 都明显影响模型模拟结果。以上过程中土壤水力学参数优化值差异较小, 但其土壤水分特征曲线却明显不同。通过以上评价分析提高了 RZWQM 相关参数优化结果的可靠性及其模拟功能, 降低了模型参数优化的不确定性, 为 PEST 优化其他模型参数提供了重要支持。

**关键词:** 模型, 优化, 不确定性, 根系水质模型, PEST

doi: 10.3969/j.issn.1002-6819.2012.10.019

中图分类号: S154.1; Q141

文献标志码: A

文章编号: 1002-6819(2012)-10-0118-06

房全孝. 根系水质模型中土壤与作物参数优化及其不确定性评价[J]. 农业工程学报, 2012, 28(10): 118-123.

Fang Quanxiao. Optimizing and uncertainty evaluation of soil and crop parameters in root zone water quality model[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2012, 28(10): 118-123. (in Chinese with English abstract)

## 0 引言

获取准确、可靠的参数是农业系统模型应用扩展研究的重点和难点<sup>[1-2]</sup>。由于模型参数间的非线性关系或不同类型参数之间的相互作用 (如在校正作物参数时可能受到土壤参数的影响, 反之亦然), 导致模型参数优化结果存在很大的不确定性<sup>[3]</sup>。另外, 如试验校正数据的选取、模型相关过程的模拟方法 (如土壤水力学过程模拟方法)、模型参数的相互作用以及模型参数优化的目标方程等都是农业系统模型参数优化的不确定性来源。通过客观评价模型参数优化的不确定性来源, 明确其对模型优化模拟结果的影响, 对于降低模型参数优化结果的不确定性和提高模型模拟功能有重要意义。

模型参数优化和不确定性评价主要是利用参数优化算法和自动优化程序进行<sup>[4]</sup>。比较典型的模型参数优化方法有洗牌复形演化算法 (shuffled complex evolution, SCE)<sup>[5]</sup> 和遗传算法 (genetic algorithms) 等<sup>[6]</sup>。近年来广泛应用于模型的参数优化和不确定评价分析<sup>[7-12]</sup>。但是这些方法很少用于农业系统模型的参数优化, 多数情况下农业系统模型参数校正采用试错法 (trial and error), 此方法受模型使用者经验及其主观因素影响很大, 导致模型参数

校正结果难以达到最优且存在很大的不确定性。自动优化程序 PEST (parameter estimation software)<sup>[13]</sup> 用于优化根系水质模型 (root zone water quality model, RZWQM) 中土壤水力学参数, 表现出明显的优势和较高的效率<sup>[14]</sup>, 但没有涉及对不同类型模型参数 (如土壤参数和作物参数等) 的优化分析。本研究利用自动优化程序 PEST 分析 RZWQM 的土壤与作物参数校正过程中的不确定性来源对模型优化结果的影响, 主要包括试验校正数据的选择、土壤水力学参数估算方法、土壤参数和作物参数的相互作用以及误差目标方程来源 (土壤水分模拟误差和作物产量模拟误差) 等几个方面。通过评价 RZWQM 参数优化结果的不确定性及其对模拟结果的影响, 为提高模型参数优化的可靠性及其模拟功能提供支持。

## 1 材料与方法

### 1.1 田间试验和数据测定

试验于 2001—2003 年在中科院禹城生态实验站水分试验场进行, 共 2 个小麦-玉米种植周期。试验设计 4 个处理, 高水处理 1 (ISBG) 在拔节、挑旗和开花期灌溉, 处理 2 (ISBN) 在拔节和挑旗期灌溉, 处理 3 (ISNN) 在拔节期灌溉和处理 4 (INNN) 为干旱 (不灌水) 处理, 3 次重复, 其他管理措施与大田管理一致。土壤为中壤土, 土壤肥力中等以上, 耕作层有机质质量分数为 1.4%, 全氮为 0.08%, 全磷 (P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>) 为 0.3%, 全钾 (K<sub>2</sub>O) 为 2.08%。冬小麦品种为 93-52, 播量为 250 万株/hm<sup>2</sup>, 玉米品种为农大 108, 播量为 66 000 株/hm<sup>2</sup>。详细试验见文献<sup>[15]</sup>。

土壤水分用中子仪测定, 测定深度为 120 cm, 每层间隔 10~20 cm, 每 5~7 d 观测一次, 降水和灌水后加

收稿日期: 2011-07-20 修订日期: 2012-04-23

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (30800164); 山东省优秀中青年科学家科研奖励基金 (BS2009NY003); 山东省自然科学基金 (ZR2010CQ010); 土壤与农业可持续发展国家重点实验室开放课题 (Y052010012); 2011 青岛市科技发展计划 (11-2-3-18-nsh)

作者简介: 房全孝 (1976—), 男, 山东青州人, 副教授。主要从事农田生态系统过程模拟和优化调控研究。青岛 青岛农业大学农学院, 266109。

Email: fqx01@163.com

测。作物产量及其构成要素（穗数、穗粒数和千粒质量）在收获时测定，具体方法见文献<sup>[15]</sup>。农田常规气象数据在实验站气象观测场对常规气象数据进行了收集，主要包括最高、最低气温，大气相对湿度，太阳辐射，风速，日降雨量等，作为模型的气候驱动输入。农田管理（作物种植、收获、施肥、灌溉以及耕作等措施）记录作为模型的输入。

### 1.2 RZWQM 及其土壤水力学模拟过程

RZWQM 是由美国农业部所属农业系统研究所开发的农业系统模型，综合了物理、生物和化学过程模拟农业生产系统中作物生长和水分、养分以及杀虫剂在作物根区的运动和传输<sup>[16]</sup>。RZWQM 中土壤水分运移和传输是其他过程的基础，模型根据不同土壤层次的土壤物理特性（土壤体积质量、孔隙度等）和水力学特性模拟土壤水分运移和传输，其中土壤水分-吸力关系是利用 Brooks-Corey (BC) 模型描述<sup>[17]</sup>，这个模型广泛应用于模拟不同气候和土壤环境条件下土壤水分和养分动态<sup>[2-3,18]</sup>。

RZWQM 根据 BC 模型提供了几种估算土壤水分-吸力特征曲线的方法，如单参数方法（one-parameter method）<sup>[19]</sup>和双参数方法（two-parameter method）<sup>[20]</sup>，两种参数估算方法区别在于所需的参数数量不同。对于单参数方法，土壤水分-吸力关系如下<sup>[21]</sup>

$$\ln(\psi) = a + b \ln(\theta - \theta_r) \quad (1)$$

$$a = p + qb \quad (2)$$

$$b = -1/\lambda \quad (3)$$

其中， $p$  和  $q$  为常数，对于不同类型土壤有<sup>[21]</sup> $p = -0.52$  和  $q = 0.67$  ( $\psi$  为土壤吸力，单位为 kPa)； $a$  和  $b$  是常数； $\lambda$  是土壤孔隙分布指数（无量纲量）， $\theta$  为土壤含水率 ( $\text{cm}^3/\text{cm}^3$ )， $\theta_r$  为土壤残余含水率 ( $\text{cm}^3/\text{cm}^3$ )。

根据公式 (1)、(2)、(3) 和土壤吸力为 33 kPa 时土壤含水率 ( $\theta_{1/3}$ ,  $\text{cm}^3/\text{cm}^3$ ) 和土壤饱和含水率 ( $\theta_s$ ,  $\text{cm}^3/\text{cm}^3$ ) 可计算  $\lambda$

$$\lambda = \frac{\ln((\theta_s - \theta_r) / 0.67)}{\ln(33) + 0.52} \quad (4)$$

根据文献<sup>[20]</sup>，BC 模型中其他参数计算如下土壤空隙进气吸力值  $\psi_b$  (kPa)

$$\psi_b = \left(\frac{B}{\theta_s - \theta_r}\right)^{1/\lambda} \quad (5)$$

$$B = ((\theta_{1/3} - \theta_r) \times 333)^\lambda \quad (6)$$

当  $\theta_s$  和  $\theta_r$  已知的情况下（一般可依据土壤容积质量获得），土壤水分-吸力曲线可根据  $\theta_{1/3}$  进行估算，因此称为单参数法。

双参数方法计算土壤水分与吸力关系是根据  $\theta_{1/3}$ （土壤吸力 33 kPa (333 cm 压力水头)）和  $\theta_{15}$ （土壤吸力为 1 500 kPa (15000 cm 压力水头)时土壤含水率,  $\text{cm}^3/\text{cm}^3$ )，由公式 (1) 可得到

$$\ln(333) = a + b \ln(\theta_{1/3} - \theta_r) \quad (7)$$

$$\ln(15000) = a + b \ln(\theta_{15} - \theta_r) \quad (8)$$

结合公式 (3)，土壤空隙分布指数  $\lambda$  可计算为

$$\lambda = \frac{\ln((\theta_{1/3} - \theta_r) / (\theta_{15} - \theta_r))}{\ln(15000 / 333)} \quad (9)$$

其他的 BC 模型参数可由公式 (5) 和 (6) 获得。

由于这种方法需要参数  $\theta_{1/3}$  和  $\theta_{15}$  估算土壤水分-吸力曲线，称为双参数法。

### 1.3 RZWQM 模型参数的初始化

模型参数的初始化是根据试验测定结果和模型内部参数设定进行。在 RZWQM 中包括试验站点蒸散参数、土壤物理特性参数、土壤水力学参数、土壤养分参数、根系生长参数以及作物参数等<sup>[3]</sup>，本研究针对试验设计（灌溉试验）选取模型关键参数包括土壤水力学参数、土壤根系生长参数 (SRGF) 和作物参数 (表 1) 作为重点进行优化和校正的参数，其他参数的确定如土壤养分参数等见文献<sup>[22]</sup>。

表 1 RZWQM 中关键参数及其校正范围

Table 1 Key parameters and their calibration ranges for PEST in RZWQM

土壤参数	优化范围	小麦遗传参数	优化范围	玉米遗传参数	优化范围
土壤水分饱和和导水率 $K_s/(\text{cm}\cdot\text{h}^{-1})$	0.10~5.00	春化作用特性 $PIV$	50	基于积温的幼苗生长期特性 $PI/(\text{C}\cdot\text{d})$	230
		光周期特性 $PID$	60	光周期敏感特性 $P2/\text{d}$	0.4
土壤吸力在 333 cm 压力水头时的土壤含水率 $\theta_{1/3}/(\text{cm}^3\cdot\text{cm}^{-3})$	0.15~0.35	基于积温的灌浆期特性 $P5/(\text{C}\cdot\text{d})$	350~480	基于积温的灌浆期特性 $P5/(\text{C}\cdot\text{d})$	800
		单位质量籽粒数特性 $G1/\text{g}^{-1}$	20~40	单株最大穗粒数 $G2/\text{粒}$	600~900
土壤吸力在 15000 cm 压力水头时的土壤含水率 $\theta_{15}/(\text{cm}^3\cdot\text{cm}^{-3})$	0.05~0.18	潜在灌浆速率 $G2/(\text{mg}\cdot\text{d}^{-1})$	20~40	潜在灌浆速率 $G3/(\text{mg}\cdot\text{d}^{-1})$	5~12
		花期潜在单茎穗质量 $G3/\text{g}$	0.5~2	基于积温的出叶间隔特性 $PHINT/(\text{C}\cdot\text{d})$	50
根系生长参数 $SRGF$	0.00~0.90	基于积温的出叶间隔特性 $PHINT/(\text{C}\cdot\text{d})$	80		

注：表中数值为 PEST 程序校正时的参数优化范围，其中土壤水力学参数的优化范围根据模型给出的默认值确定，同时考虑土壤参数在不同的土壤层次（5 个层次）校正范围的差异<sup>[18]</sup>，如根系生长参数 (SRGF) 在 0~15 cm 设定为固定值 1，而在 15~60 cm 以下，设定为 0.3~0.85，在 60~120 cm 土壤层以下，设定值为 0~0.3。作物参数中与作物生育期有关的参数（如小麦品种参数  $PIV$ ,  $PID$ , 和  $PHINT$ ；玉米品种参数  $P1$ ,  $P2$ , 和  $PHINT$ ）是根据观测结果进行人工校正后设定为固定值<sup>[22]</sup>。

### 1.4 PEST 自动优化程序与 RZWQM 参数优化不确定性分析

PEST 是一个独立的模型参数优化软件，它利用自己的输入和输出文件连接模型，而不需要对模型进行修改<sup>[13]</sup>。在优化 RZWQM 土壤水力学参数时，利用 PEST 中 PAR2PAR 工具首先计算 BC 模型(公式(1)~

(9))，再进行 PEST 与 RZWQM 之间的数据交换。PEST 优化模型参数采取基于梯度的 Gauss-Marquard-Levenberg 算法，根据模拟结果和测定结果的差异调整每个参数的数值<sup>[13]</sup>。PEST 参数优化的目标方程与方差相似，计算方法如下：

$$\Phi = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \{w_i \times [O(t_i) - P(F, t_i)]\}^2 \quad (10)$$

式中,  $F$  是一系列参数,  $O(t_i)$  是在时间  $i$  的观测值,  $P(F, t_i)$  是在模型时间  $i$  的模拟值,  $w_i$  是观测值的权重系数,  $n$  是观测值的个数。本研究中有两种类型观测值 (土壤水分和作物产量), 根据  $\Phi$  值的大小设计不同的权重系数, 可使土壤水分和作物产量模拟误差的比例控制在一定的范围内。

PEST 自动优化工具可降低人为主观因素的影响 (如试错法), 可更客观的评价模型参数优化过程, 如模型校正数据和参数初始值的选择 (结果分析中 2.1 和 2.2 部分)、不同类型参数间的相互作用 (作物参数与土壤参数, 结果分析中 2.3 部分)、土壤水力学参数估算方法 (Brooks-Corey 模型参数的估算方法, 结果分析中 2.4 部分)、以及优化目标方程 (误差来源计算, 结果分析中 2.5 部分) 等对模型参数优化结果和参数优化值 (结果分析中 2.6 部分) 的影响, 从而实现对模型参数优化的不确定性分析。表 2 是利用 PEST 评价 RZWQM 参数优化的不确定性来源, 这些校正过程或参数间相互作用都对 PEST 优化模型参数的结果有重要影响, 通过分析这些参数优化不确定性来源有助于改善模型优化结果和降低参数优化的不确定性, 改善模型的模拟效果, 这是人工试错校正法难以实现的。

表 2 利用 PEST 评价 RZWQM 参数优化结果的不确定性  
Table 2 Assessment of uncertainty parameter optimization in RZWQM using PEST

模型参数优化的不确定性来源	评价方法
模型校正数据选择	选择高水处理 (ISBG) 和低水处理 (INNN) 对比模型校正结果
土壤水力学参数初始值	利用田间试验测定值和模型默认值对比模型校正结果
不同类型参数之间的相互作用	不同参数类型分别优化 (固定某一参数类型) 或同时优化对模型校正结果的影响, 具体参数和过程见表 1 和表 5
土壤水力学参数估算方法	单参数法和双参数法对比模型校正结果
目标方程 (误差来源) 计算	土壤水分模拟误差与作物产量模拟误差的比例对模型校正结果的影响

### 1.5 模型参数优化结果的评价

模型模拟结果评价采用偏差 ( $bias$ )、标准方差 ( $RMSE$ ) 以及模型模拟效率 ( $NSME$ ) 3 个指标, 计算方法如下

$$bias = \frac{\sum_{i=1}^n (O_i - P_i)}{n \times O_{avg}} \times 100\% \quad (11)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (O_i - P_i)^2}{n}} \quad (12)$$

$$NSME = 1.0 - \frac{\sum_{i=1}^n (O_i - P_i)^2}{\sum_{i=1}^n (O_i - O_{avg})^2} \quad (13)$$

式中,  $P_i$  是第  $i$  次模拟值,  $O_i$  是第  $i$  次观测值,  $O_{avg}$  是所有观测值的平均值,  $n$  是观测数据个数。

## 2 结果与分析

### 2.1 模型校正数据的选择对优化模拟结果的影响

表 3 可以看出, 在其他模型参数校正过程都相同的情况下, 模型参数校正数据的选择对模型优化模拟结果有重要影响: 当利用高水处理 1 (ISBG) 校正时, RZWQM 模拟 0~120 cm 土壤水分的  $RMSE$  分别为 2.63 cm (单参数法) 和 2.55 cm (双参数法); 当利用低水处理 (INNN) 校正时, RZWQM 模拟 0~120 cm 土壤水分的  $RMSE$  分别为 2.35 cm (单参数法) 和 2.40 cm (双参数法)。但其验证结果中  $RMSE$  分别为 2.18 cm (单参数法) 和 2.59 cm (双参数法)、2.79 cm (单参数法) 和 2.86 cm (双参数法)。可见当用高水处理 1 作为校正数据时, 模型校正结果和验证结果差异较小, 模型整体模拟结果相对较稳定, 其他评价指标如  $bias$  和  $NSME$  也具有同样的趋势, 即校正结果 (处理 1) 和验证结果 (处理 4) 差异较小。因此选取高水处理 1 (ISBG) 作为模型参数校正数据较为合理。这种交叉验证的方法在一定程度上也降低了参数优化的不确定性<sup>[14]</sup>。

表 3 不同校正数据下 RZWQM 模拟 0~120 cm 土壤水分贮量  
Table 3 Effect of calibration data selection on RZWQM predicted 0-120 cm soil water storage

模型校正数据选择	参数估算方法	校正结果			验证结果		
		偏差 /%	标准方差 /cm	模拟效率	偏差 /%	标准方差 /cm	模拟效率
处理 1 校正和处理 4 验证	单参数法	-0.96	2.63	0.21	1.75	2.18	0.65
	双参数法	1.37	2.55	0.27	5.08	2.59	0.50
处理 4 校正和处理 1 验证	单参数法	-0.06	2.35	0.59	-3.76	2.79	0.12
	双参数法	2.27	2.40	0.57	-1.88	2.86	0.08

### 2.2 土壤水力学参数初始值对模型模拟土壤水分的影响

在其他模型参数校正过程都相同的情况下, 土壤水力学参数 ( $\theta_{13}$  和  $\theta_{15}$ ) 初始值的 2 种获取方法 (田间测定值和模型默认值) 对 RZWQM 优化模拟结果有一定的影响 (表 4): 其中以田间测定值为初始值时优化模拟结果明显好于模型默认值 (具有较低的  $RMSE$  和  $bias$  值和较高的  $NSME$  值)。可见利用 PEST 优化时参数初始值的选择应采用田间测定值, 而参数默认值可作为对比结果参考。两种参数初始值选取方法对单参数法的影响较小, 但是对双参数法的模拟结果影响较大, 这可能是由于双参数法需要两个参数 ( $\theta_{13}$  和  $\theta_{15}$ ), 因此初始值的影响可能更大。用 PEST 自动优化时可选择更多地初始值对比, 可在一定程度上改善参数优化结果。

表 4 不同参数初始值下对模型模拟 0~120 cm 土壤水分贮量  
Table 4 Effect of initial soil hydraulic parameters on RZWQM predicted 0-120 cm soil water storage

参数估算方法	土壤水力学参数确定方法	模型优化模拟结果		
		偏差 /%	标准方差 /cm	模拟效率
单参数法	模型默认值	1.50	2.67	0.19
	田间测定值	0.64	2.64	0.21
双参数法	模型默认值	5.72	3.27	-0.21
	田间测定值	3.34	2.68	0.19

2.3 土壤与作物参数相互作用对 RZWQM 模拟结果的影响

在 2.1 和 2.2 基础上,即选择高水处理 1 和水力学参数测定值为初始值(表 3、4),通过固定某一类型模型参数(如作物参数或土壤水力学参数)或同时优化两类模型参数,分析模型土壤参数与作物参数之间的相互作用对优化模拟结果的影响(在每一步中 PEST 优化模型参数时校正次数在 250 次以上)(表 5)。从第①步(模型初始校正结果)到第③步(土壤参数及根系生长参数),两种参数估算方法模拟土壤水分的 RMSE 值从 2.86、3.27 cm 下降到 2.23、2.63 cm,说明通过 PEST 优化土壤水力学参数和根系生长参数可明显改善土壤水分初始模拟结果(试错法校正结果),由于此步骤没有涉及到作物参数,作物产量的模拟结果稍降低。第④步利用 PEST 优化作物参数时,两种参数估算方法模拟作物

产量结果较初始结果(试错法)明显改善。与第③步相比, RMSE 值从 704 或 684 kg/hm<sup>2</sup> 下降到 481 或 336 kg/hm<sup>2</sup>,但是土壤水分模拟效果却稍微下降, RMSE 值分别从 2.23 和 2.63 cm(第③步)增加到 2.52 和 2.98 cm(第④步),其他指标(bias 和 NSME)也表现出相同的变化趋势。可见在土壤水力学参数与作物参数优化过程中改善作物产量模拟结果的同时伴随着土壤水分模拟效果的下降(第③步到第④步),反之亦然(第②步到第③步)。因此在前 4 步参数优化的基础上,对土壤参数和作物参数同时进行优化(第⑤步),即充分考虑土壤参数和作物参数之间的相互作用,所得到的模拟结果比第④步都有改善(表 5),在土壤水分和作物产量模拟结果之间达到较合理的平衡,模型优化结果整体最优。

表 5 RZWQM 中土壤参数与作物参数的相互作用对模拟优化结果的影响  
Table 5 Effect of interactions between soil and crop genetic parameters on calibration results in RZWQM

模型参数优化过程 <sup>a</sup>	土壤水分贮量						作物产量			
	单参数法			双参数法			单参数法		双参数法	
	偏差/%	标准方差/cm	模拟效率	偏差/%	标准方差/cm	模拟效率	偏差/%	标准方差/cm	偏差/%	标准方差/cm
第①步: 初始校正结果	1.5	2.86	0.07	5.72	3.27	-0.21	9.22	661	8.86	648
第②步: 土壤水力学参数	-2.31	2.74	0.15	4.22	2.79	0.12	8.54	634	7.32	629
第③步: 土壤根系生长参数	-0.89	2.23	0.44	-3.29	2.63	0.22	10.61	704	11.12	684
第④步: 作物遗传参数	-1.74	2.52	0.28	2.88	2.98	-0.01	6.27	481	3.34	336
第⑤步: 所有参数	-0.71	2.27	0.42	3.17	2.55	0.26	4.53	455	2.21	305

注: 第①步初始校正结果是在 2.1 结果(选择处理 1 为校正数据)和 2.2 结果(测定参数值为初始值)基础上利用试错法获得; 第②步也是在 2.1 和 2.2 基础上利用 PEST 自动优化土壤水力学参数(其他参数固定); 第③步是在第②步基础上利用 PEST 自动优化土壤根系生长参数(其他参数固定); 第④步在第③步基础上利用 PEST 优化作物遗传参数(其他参数固定); 第⑤步是在第④步基础上利用 PEST 同时优化以上所有参数类型。

2.4 土壤水力学参数估算方法对土壤水分模拟结果的影响

在 2.1、2.2、2.3 节分析结果中(表 3、4、5)两种土壤水力学参数估算方法(单参数法和双参数法)优化模拟 0~120 cm 土壤水分贮量结果存在一定的差异,说明不同校正过程(表 4、5)或数据选择(表 3)对两种参数估算方法的优化模拟结果有一定的影响,但其模拟结果都明显优于初始模拟结果(表 5): 其中在模型校正数据选择的影响分析中(表 3),单参数法除处理 1 校正结果稍差外,其他情况都优于双参数法(较低的 RMSE 值和较高的 NSME 值); 在参数初始值选择的影响分析中(表 4),单参数法优化模拟结果都优于双参数法; 在土壤参数与作物参数相互作用的影响分析中(表 5),单参数法在模拟土壤水分贮量方面具有明显的优势。可以看出单参数法比双参数法优化模拟土壤水分贮量效果更好(具有较低的 RMSE 值和较高的 NSME 值)。

理论上双参数法可调控的参数比单参数法多,优化空间更大,但是本试验条件下模拟土壤水分过程中却没有表现出优势,可能与试验数据的数量、范围等因素有关,需要进一步验证。从表 5 中第⑤步优化模拟结果可看出,尽管单参数法模拟土壤水分结果比双参数法好,但是产量模拟结果却比双参数方法差,可见双参数法在综合模拟土壤水分和作物产量时具有较好的适应性,模拟整体效果较好。

2.5 PEST 自动优化目标方程的误差来源比例对模型优化结果的影响

利用 PEST 程序中的权重系数可以调整误差来源(目

标方程)比例。从表 6 可以看出,目标方程的误差来源比例(土壤水分模拟误差比作物产量模拟误差,计算方法见公式(10)对 PEST 自动优化 RZWQM 的模拟结果(即土壤水分和作物产量模拟结果)有明显影响: 随着误差来源比例(土壤水分误差/作物产量误差)的提高(1: 20 增加到 20: 1),RZWQM 优化模拟土壤水分结果逐渐改善,而作物产量的模拟误差却增加。从本研究结果看,土壤水分误差来源和作物产量误差来源应控制在 1: 1 左右可以同时获得较好的土壤水分和作物产量模拟结果,比例过高或过低可能导致参数过度矫正,使土壤水分或作物产量模拟误差增加,模型整体模拟结果变差。

表 6 PEST 优化目标方程中模拟误差来源对模型模拟结果的影响  
Table 6 Effect of objective functions used by PEST on simulation results in RZWQM

参数估算方法	模拟误差来源比例( $\Phi_S/\Phi_Y$ )	土壤水分贮量			作物产量	
		偏差/%	标准方差/cm	模拟效率	偏差/%	标准方差/(kg·hm <sup>-2</sup> )
单参数法	1:20	0.60	2.73	0.15	8.58	602
	1:1	-0.96	2.63	0.21	6.38	830
	20:1	-1.64	2.51	0.31	-11.47	1820
双参数法	1:20	-0.21	2.78	0.12	0.95	157
	1:1	1.37	2.55	0.27	1.92	170
	20:1	1.04	2.36	0.37	-5.62	834

注:  $\Phi_S/\Phi_Y$  是土壤水分贮量模拟误差( $\Phi_S$ )与作物产量模拟误差( $\Phi_Y$ )的比例,误差计算方法为公式(10)。

2.6 模型参数相互作用或参数估算方法对土壤水力学参数优化值的影响

不同的模型参数优化过程或参数估算方法(表5)对土壤水力学参数优化结果的影响相对较小(表7):不同土壤层次的参数 $\theta_{1/3}$ 和 $\theta_{15}$ 随土壤层次的深度变化趋势一致,且相同的土壤层次差异相对较小(不同土壤层次平均差异在5%以内)。但是单参数法优化结果中0~10 cm土壤层 $K_s$ 值明显高于双参数法,在其他层次差异较小。对于参数 $\theta_{15}$ ,单参数法在0~10 cm土壤层次高于双参数法(0.114和0.097 cm<sup>3</sup>/cm<sup>3</sup>),而在80~120 cm土壤层次比双参数法低(0.189和0.160 cm<sup>3</sup>/cm<sup>3</sup>)。尽管土壤水力学参数优化值差异较小,但其土壤水分吸力曲线存在较大的差异(图1):在0~10 cm土壤层次,当土壤水

分饱和度(( $\theta-\theta_r$ )/( $\theta_s-\theta_r$ ))较低时(小于0.4),两种方法估算的土壤吸力差异较小,当土壤水分饱和度高于0.4时,差异较大;在10~20 cm土壤层次,单参数法估算的土壤吸力显著低于双参数法的估算值;在20~60 cm以及60~80 cm土壤层次两种方法的估算值差异较小;而在80~120 cm土壤层次,单参数法估算的土壤水分吸力值显著高于双参数法的估算值。不同土壤层次土壤水分吸力曲线的差异导致土壤水分在不同土壤层次的运移和分布不同,是模型优化模拟土壤水分差异的主要原因。

3 结 论

PEST 自动优化结果表现出比常规试错法明显的优势和较高的优化效率,即明显改善了人工试错法校正结果,这一结果主要与 PEST 自动优化参数时调用模型次数较多有关(参数优化次数越多,模型优化模拟结果可能越优)。同时 PEST 自动优化需要选取合理的初始值(如田间测定值优于模型默认值)、参数估算方法及参数优化目标方程等将有助于获得最优的参数值和模拟结果。

模型参数优化不确定性来源分析结果表明 1)在当前土壤、气候和水分处理条件下,单参数法模拟土壤水分优于双参数法,但双参数法在模拟土壤水分和作物产量的整体模拟效果上具有优势;2)RZWQM 土壤参数与作物遗传参数在优化过程中存在明显的相互作用,在改善土壤水分模拟结果的同时导致作物产量模拟效果下降,反之亦然,这需要综合平衡,多次优化才能实现;3)在 PEST 自动优化过程中,目标方程的误差来源(土壤水分和作物产量模拟误差)对模型优化模拟结果有显著影响,在两个误差比例控制在 1:1 左右时(利用 PEST 中的权重系数控制),模型整体优化结果最好;4)不同校正过程获取的土壤水力学参数值差异较小,但其土壤水分-吸力曲线存在明显的差异,这是导致不同优化模拟结果的主要原因。通过以上模型参数优化不确定性来源评价提高了 RZWQM 中土壤和作物参数优化结果的准确性和可靠性,明显改善了模型模拟土壤水分和作物产量的效果。以上研究结果为 PEST 优化其他模型参数提供了重要理论和技术支持。

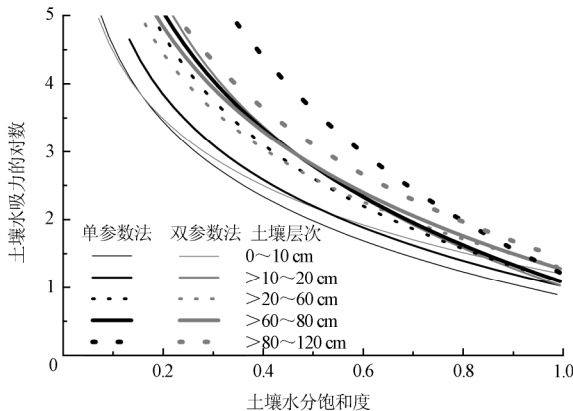
[参 考 文 献]

[1] Boote K J, Jones J W, Pickering N B. Potential uses and limitations of crop models[J]. Agronomy Journal, 1996, 88(5): 704-716.  
 [2] Green T R, Ahuja L R, Benjamin J G. Advances and challenges in predicting agricultural management effects on soil hydraulic properties[J]. Geoderma, 2003, 116(1/2): 3-27.  
 [3] Ahuja L R, Ma L., Parameterization of agricultural system models: current approaches and future needs[M]. Ahuja L R, Ma L, Howell T A, Agricultural System Models in Field Research and Technology Transfer, London, Lewis Publishers, 2002, 273-316.  
 [4] Beven K, Binley A. The future of distributed models-model calibration and uncertainty prediction[J]. Hydrological Processes, 1992, 6(3): 279-298.

表 7 RZWQM 中土壤饱和导水率和土壤含水率的优化结果比较  
Table 7 Comparisons of optimized soil saturated hydraulic conductivity, and soil water content in RZWQM

模型参数校正步骤	土壤层次	单参数法			双参数法		
		$K_s$	$\theta_{1/3}$	$\theta_{15}$	$K_s$	$\theta_{1/3}$	$\theta_{15}$
第②步 土壤水力学参数 (其他参数固定)	0~10 cm	4.30	0.150	0.066	2.57	0.206	0.087
	>10~20 cm	1.93	0.266	0.143	1.79	0.250	0.112
	>20~60 cm	1.77	0.219	0.103	2.00	0.222	0.116
	>60~80 cm	1.99	0.239	0.118	0.69	0.245	0.160
	>80~120 cm	1.05	0.288	0.166	0.93	0.295	0.160
第③步 根系生长参数 (其他参数固定)	0~10 cm	4.40	0.250	0.131	1.81	0.245	0.100
	>10~20 cm	0.80	0.217	0.102	1.56	0.223	0.107
	>20~60 cm	2.00	0.258	0.136	2.00	0.259	0.136
	>60~80 cm	1.40	0.279	0.156	1.47	0.258	0.160
	>80~120 cm	1.40	0.311	0.191	1.16	0.304	0.160
第④步 作物参数 (其他参数固定)	0~10 cm	4.80	0.280	0.157	1.00	0.253	0.100
	>10~20 cm	1.75	0.219	0.103	2.00	0.200	0.102
	>20~60 cm	2.50	0.254	0.132	2.00	0.272	0.146
	>60~80 cm	2.40	0.310	0.190	0.25	0.325	0.160
	>80~120 cm	4.40	0.212	0.102	1.15	0.230	0.100
第⑤步同时优化 土壤水力学参数 根系生长参数 作物参数	0~10 cm	2.00	0.203	0.091	2.00	0.266	0.149
	>10~20 cm	2.00	0.250	0.129	2.00	0.252	0.118
	>20~60 cm	0.58	0.267	0.144	1.38	0.272	0.137
	>60~80 cm	1.70	0.325	0.208	1.80	0.303	0.160
	>80~120 cm	1.70	0.325	0.208	1.80	0.303	0.160

注:表中 $K_s$ 为土壤饱和导水率; $\theta_{1/3}$ 和 $\theta_{15}$ 分别为土壤吸力在333 kPa或15000 kPa时土壤含水率。第①步初始校正结果是利用人工试错法校正获得,没有利用自动优化程序 PEST,因此没有列入表中。



注:土壤水分饱和度为( $\theta-\theta_r$ )/( $\theta_s-\theta_r$ );土壤水吸力根据公式(1)~(9)和表7中数据计算, $\theta_r$ 和 $\theta_s$ 值为模型默认值。

图 1 土壤水分饱和度与土壤水吸力的对数之间的关系比较  
Fig.1 Comparison of the relationships between soil relative saturation and soil suction in RZWQM

- [5] Duan Q Y, Sorooshian S, Gupta V. Effective and efficient global optimization for conceptual rainfall-runoff models[J]. *Water Resources Research*, 1992, 28(4): 1015–1031.
- [6] Wang Q J. The genetic algorithm and its application to calibrating conceptual rainfall-runoff models[J]. *Water Resources Research*, 1991, 27(9): 2467–2471.
- [7] Gupta H V, Sorooshian S, Hogue T S, et al. Advances in automatic calibration of watershed models[M]. Duan Q Y, Gupta H V, Sorooshian S, et al. Calibration of watershed models. Washington, DC, AGU, 2003, 9–28.
- [8] Madsen H, Wilson G, Ammentrop H C. Comparison of different automated strategies for calibration of rainfall-runoff models[J]. *Journal of Hydrology*, 2002, 261(1/4): 48–59.
- [9] Vrugt J A, Gupta H V, Bouten W, et al. A shuffled complex evolution metropolis algorithm for optimization and uncertainty assessment of hydrologic model parameters[J]. *Water Resources Research*, 2003, 39(8): 1201, doi: 10.1029/2002WR001642.
- [10] 吴锦, 余福水, 陈仲新, 等. 基于 EPIC 模型的冬小麦生长模拟参数全局敏感性分析[J]. *农业工程学报*, 2009, 25(7): 136–142.  
Wu Jin, Yu Fushui, Chen Zhongxin, et al. Global sensitivity analysis of growth simulation parameters of winter wheat based on EPIC model[J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE)*, 2009, 25(7): 136–142. (in Chinese with English abstract)
- [11] 杨晓华, 杨志峰, 酆建强, 等. 水文模型参数识别算法研究及展望[J]. *自然科学进展*, 2006, 16(6): 657–661.  
Yang Xiaohua, Yang Zhifeng, Li Jianqiang, et al. Advances in parameter optimization algorithm of hydraulic model[J]. *Progress of Natural Science*, 2006, 16(6): 657–661. (In Chinese with English abstract)
- [12] Yapo P O, Gupta H V, Sorooshian S. Multi-objective global optimization for hydrologic models[J]. *Journal of Hydrology*, 1998, 204(1/4): 83–97.
- [13] Doherty J. PEST: Software for Model-Independent Parameter Estimation[R]. Watermark Numerical Computing, Corinda, Australia, 2005.
- [14] Fang Q X, Green T R, Ma L, et al. Optimizing soil hydraulic parameters in RZWQM2 under fallow conditions[J]. *Soil Science Society of America Journal*. 2010, 74(6): 1897–1913.
- [15] Fang Q X, Chen Y H, Yu Q, et al. Much improved irrigation wheat-maize double use efficiency in an intensive cropping system in the North China Plain[J]. *Journal of Integrative Plant Biology* 2007: 49(10): 1517–1526.
- [16] Ahuja L R, Rojas K W, Hanson J D, et al. (ed.). The Root Zone Water Quality Model[M]. Highlands Ranch, CO, Water Resources Publishers, 2000.
- [17] Brooks R, Corey A. Hydraulic properties of porous media[R]. Hydrology Paper 3, Colorado State University, Fort Collins, 1964.
- [18] Ma L, Hoogenboom G, Saseendran S A, et al. Effects of estimating soil hydraulic properties and root growth factor on soil water balance and crop production[J]. *Agronomy Journal*, 2009, 101(3): 572–583.
- [19] Ahuja L R, Naney J W, Williams R D. Estimating soil-water characteristics from simpler properties or limited data[J]. *Soil Science Society of America Journal*, 1985, 49(5): 1100–1105.
- [20] Williams R D, Ahuja L R. Scaling and estimating the soil water characteristic using a one-parameter model[M]. Pachepsky Y, Radcliffe D E, Selim H M E, Scaling Methods in Soil Physics. Boca Raton, FL, CRC Press, 2003, 35–48.
- [21] Ahuja L R, Williams R D. Scaling water characteristic and hydraulic conductivity based on Gregson-Hector-McGowan approach[J]. *Soil Science Society of America Journal*, 1991, 55(2): 308–319.
- [22] 房全孝, 于强, 王建林. 利用 RZWQM-CERES 模拟华北平原农田土壤水分动态及其对作物产量的影响[J]. *作物学报*[J]. 2009, 35(6): 1122–1130.  
Fang Quanzhao, Yu Qiang, Wang Jianlin. Modeling the effect of soil water on wheat-maize double cropping system using RZWQM-CERES[J]. *Acta Agronomica Sinica*, 2009, 35(6): 1122–1130. (In Chinese with English abstract)

## Optimizing and uncertainty evaluation of soil and crop parameters in root zone water quality model

Fang Quanzhao<sup>1,2</sup>

(1. Dryland Farming Laboratory, Qingdao Agricultural University, Qingdao 266109, China; 2. State Key Laboratory of Soil and Sustainable Agriculture, Institute of Soil Science, Chinese Academy of Sciences, Nanjing 210008, China)

**Abstract:** Reducing uncertainty in optimizing agricultural system model parameters is the key issue for model applications. An automated parameter estimation software (PEST) was used to calibrate the soil parameters and crop genetic parameters in the root zone water quality model (RZWQM). The simulation results optimized by PEST were better than the calibration results via manual trial and error method, and showed higher efficiency. Parameterization uncertainty analysis of the model by PEST showed that the calibration data selection, initial parameter value, soil hydraulic parameter estimation method, interactions between these different parameter types and objective functions (error resources) had significant influences on PEST optimization results. Similar optimized soil hydraulic parameters were obtained from above processes, but produced different soil water retention curve. By above assessment, the uncertainty in RZWQM parameter optimization was reduced with improved soil water and crop yield predictions. This result can help optimize parameters of other similar models by PEST.

**Key words:** models, optimization, uncertainty analysis, root zone water quality model, PEST