

基于遗传算法的非饱和溶质运移参数优化^{*}

任长江¹ 白丹¹ 周蓓蓓¹ 梁伟² 周文^{1,3} 程鹏^{1,3}

(1. 西安理工大学水利水电学院, 西安 710048; 2. 陕西师范大学旅游与环境学院, 西安 710062;
3. 华北水利水电学院数学与信息科学学院, 郑州 450011)

摘要: 根据室内实验和数值模拟数据, 分别以土壤含水率和溶质质量浓度的实测值与其计算值标准差最小为优化目标, 建立溶质和水分运移参数识别的多目标优化模型, 采用遗传算法、有限差分法和线性加权法相结合的计算方法, 对模型进行优化求解。分别以单组、2组和3组时刻实验数据组合作为参数优化初始数据, 获取了土壤非饱和水分和溶质运移参数值, 并以1345 min时刻实验数据进行验证。含水率计算值与实测值相关系数的最大值和最小值分别为0.9753和0.9450; 溴离子溶液质量浓度的计算值与实测值相关系数最大值和最小值分别为0.9646和0.9352, 实测值与计算值吻合较好, 表明用这一方法识别非饱和水分-溶质运移参数是可行的。

关键词: 溶质运移 参数识别 遗传算法

中图分类号: S152 文献标识码: A 文章编号: 1000-1298(2013)09-0068-05

Optimization of Solute Transport Parameters in Unsaturated Soil Based on Genetic Algorithm

Ren Changjiang¹ Bai Dan¹ Zhou Beibei¹ Liang Wei² Zhou Wen^{1,3} Cheng Peng^{1,3}

(1. Institute of Water Resources and Hydro-electric Engineering, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China
2. College of Tourism and Environment, Shaanxi Normal University, Xi'an 710062, China
3. College of Mathematics and Information Science, North China University of Water Resources and Electric Power, Zhengzhou 450011, China)

Abstract: According to the experiment and numerical simulation, a multi-objective optimization model for identification of solute and water transport parameters was built up, which use soil water content and the minimum standard deviation of measured and observed water content and solute as optimized objective. A combination of genetic algorithm, finite difference and linear weighted method was applied for calculation. Taking one, two and three groups experimental data as initial data, solute transport parameters in unsaturated soil were obtained and verified by using the experimental data at 1345 min. The maximum and minimum correlation coefficient between calculated and measured value of water content were 0.9753 and 0.9450. The maximum and minimum correlation coefficient between calculated and measured value of bromonium ion concentration was 0.9646 and 0.9352. The measured results were well coincided with the calculated results and showed the feasibility of the proposed method.

Key words: Solute transport Parameters identification Genetic algorithm

引言

化学污染物在土壤等多孔介质中的迁移转化过

程直接涉及污染物对环境的影响程度, 为此各种溶质运移模型^[1~5]也相继建立。对模型参数的求解, 除了以往的最大似然法^[6]、矩分析法^[7]、最小二乘

收稿日期: 2012-09-18 修回日期: 2012-11-07

* 国家自然科学基金资助项目(50979089)

作者简介: 任长江, 博士生, 主要从事节水灌溉理论与技术研究, E-mail: 971932670@qq.com

通讯作者: 白丹, 教授, 博士生导师, 主要从事节水灌溉理论与技术研究, E-mail: xautbd@sohu.com

法^[8]、图解法^[9]和有限体积法^[10]等方法外, 近年来一些新的方法也在溶质运移问题中得到应用。对于稳态水流溶质运移问题, 杨文涛^[11]提出了估算溶质运移参数的图解-最小二乘法, 杨强^[12]采用单纯形法结合有限差分法对稳态水流问题进行了求解。而非饱和溶质运移问题则更为复杂, 翟春生^[13]忽略分子扩散作用, 假定水动力弥散系数只是平均空隙流速的函数, 根据溶质通量等于水动力弥散通量与对流通量之和, 采用差分法对非饱和溶质运移问题进行了求解; 王永峰^[14]将求解水动力弥散系数的问题转换为补余误差反函数计算值与观测值误差最小化问题; 崔凯^[15]采用同伦方法等算法对水动力弥散系数既非含水率亦非平均空隙流速函数非饱和溶质运移问题进行了求解。对于非饱和溶质运移问题, 为便于求解, 以上研究对水动力弥散系数进行了简化, 这会降低数值模拟的精度。因此本文提出一种通过简单实验设备获取一维土壤水分和溶质运移参数且能精确模拟水分和溶质运移过程的方法。

1 一维非饱和惰性溶质运移理论

一维垂直非饱和水分和溶质运移方程为

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) - \frac{\partial K(\theta)}{\partial x} \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\theta c)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta D_{lh} \frac{\partial c}{\partial x} \right) - \frac{\partial (J_w c)}{\partial x} \quad (2)$$

$$J_w = -D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} - K(\theta) \quad (3)$$

初始和边界条件

$$\begin{cases} \theta = \theta_a, c = c_a & (t=0, x) \\ \theta = \theta_b, c = c_b & (t, x=0) \\ \theta = \theta_a, c = c_a & (t, x=\infty) \end{cases} \quad (4)$$

式中 θ —土壤体积含水率, cm^3/cm^3

c —土壤溶质质量浓度, mg/L

θ_a —初始含水率, cm^3/cm^3

θ_b —上边界(饱和)含水率, cm^3/cm^3

c_a —土壤初始质量浓度, mg/L

c_b —土壤上边界质量浓度, mg/L

D_{lh} —水动力弥散系数, cm^2/min

$D(\theta)$ —非饱和扩散率, cm^2/min

$K(\theta)$ —非饱和导水率, cm/min

J_w —土壤水流通量, $\text{cm}^3/(\text{cm}^2 \cdot \text{min})$

t —入渗时间, min x —入渗距离

水分和溶质运移参数计算公式为

$$D(\theta) = D_0 (\theta/\theta_b)^\beta \quad (5)$$

$$K(\theta) = K_s (\theta/\theta_s)^m \quad (6)$$

$$D_{lh}(\theta, \nu) = D_w a e^{b\theta} + \lambda \nu \quad (7)$$

式中 K_s —饱和导水率, cm/min
 θ_s —饱和含水率, cm^3/cm^3
 D_w —溶质在自由水中的扩散系数, cm/min
 λ —弥散度, cm
 ν —平均孔隙流速, cm/min
 D_0, β, m, a, b —经验常数

Olsen^[16]认为当土壤水吸力在 30.4 ~ 1520 kPa 范围内时, $b = 10, a$ 的变化范围为 0.001 ~ 0.005。

2 待求参数优化模型及求解步骤

2.1 建立模型

对于一维垂直惰性非饱和溶质运移问题, 通过实验可获得不同时间和不同空间上土壤含水率和溶质质量浓度实测值, 同时又可对式(1)和式(5)采用差分法, 代入式(6)、式(7)中参数获得和实验对应时空条件下的土壤含水率和溶质质量浓度计算值。以土壤含水率和溶质质量浓度的实测值和计算值的标准差最小建立含水率和溶质运移参数优化多目标函数, 即

$$\begin{cases} \min Z_1 = \sqrt{\sum_{j=1}^h \sum_{i=1}^n (\theta_{ij} - \theta_{ij}(D(\theta), K(\theta)))^2/n} \\ \min Z_2 = \sqrt{\sum_{j=1}^h \sum_{i=1}^n (c_{ij} - c_{ij}(D(\theta), K(\theta), D_{lh}))^2/n} \\ D_{0\min} \leq D_0 \leq D_{0\max} \\ \beta_{\min} \leq \beta \leq \beta_{\max} \\ K_{s\min} \leq K_s \leq K_{s\max} \\ m_{\min} \leq m \leq m_{\max} \\ D_{w\min} \leq D_w \leq D_{w\max} \\ a_{\min} \leq a \leq a_{\max} \\ \lambda_{\min} \leq \lambda \leq \lambda_{\max} \end{cases} \quad (8)$$

式中 i —观测点序号 n —观测点总数
 j —时间点序号 h —时间点总数
 θ_{ij} — j 时刻第 i 点含水率实测值, cm^3/cm^3
 $\theta_{ij}(D(\theta), K(\theta))$ — j 时刻第 i 点含水率计算值, cm^3/cm^3
 c_{ij} — j 时刻第 i 点溶质质量浓度实测值, mg/L
 $c_{ij}(D(\theta), K(\theta), D_{lh})$ — j 时刻第 i 点溶质质量浓度计算值, mg/L

Z_1 —含水率单目标优化值
 Z_2 —溶质浓度单目标优化值

2.2 求解模型

式(8)是一个非线性多目标优化模型, 且含水

率和溶质质量浓度单位量纲不同,对于此类问题可先通过归一化处理,将含水率和溶质质量浓度转换为0~1区间的无量纲数值,再采用线性加权法将其转换成单目标函数进行求解,即

$$\theta_{sij} = \theta_{ij} / \sum_{i=1}^n \theta_{ij} \quad (j=1, \dots, h) \quad (9)$$

$$c_{sij} = c_{ij} / \sum_{i=1}^n c_{ij} \quad (j=1, \dots, h) \quad (10)$$

$$\min Z = \alpha \min Z_1 + (1 - \alpha) \min Z_2 =$$

$$\frac{\alpha \sqrt{\sum_{j=1}^h \sum_{i=1}^n (\theta_{sij} - \theta_{sij}(D(\theta), K(\theta)))^2 / n} +}{(1 - \alpha) \sqrt{\sum_{j=1}^h \sum_{i=1}^n (c_{sij} - c_{sij}(D(\theta), K(\theta), D_{lh}))^2 / n}} \quad (11)$$

式中 θ_{sij} —— 归一化后的含水率, cm^3/cm^3
 c_{sij} —— 归一化后的溶质质量浓度, mg/L
 α —— 权重系数, $0 < \alpha < 1$

2.3 计算步骤

式(11)是一个含有7个参数 $D_0, \beta, K_s, m, D_w, a, \lambda$ 的非线性单目标规划模型,其目标函数值与各点含水率以及溶质质量浓度的实测值和计算值有关,而含水率以及溶质质量浓度计算值与这7个参数有关,针对这一复杂的优化问题,可采用 Matlab 遗传算法工具箱^[17]进行优化求解。其中水分和溶质运移方程采用有限差分法^[18]求解;而待求参数计算的非线性数学模型采用遗传算法求解,遗传算法适应度反映算法进化过程中解的优劣,根据实际问题可建立适应度函数

$$y = 1 / (1 + \min Z(D(\theta), K(\theta), D_{lh})) \quad (12)$$

优化过程如图1所示。

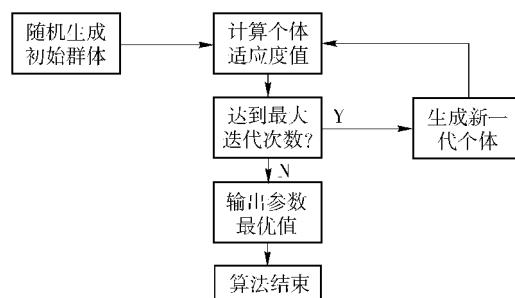


图1 遗传算法流程图

Fig. 1 Flow chart of genetic algorithm

初始群体由 $D_0, \beta, K_s, m, D_w, a, \lambda$ 7个参数组成,个体应满足式(8)约束条件。个体适应度函数值:将待求参数代入式(5)~(7)中,分别计算非饱和扩散率、非饱和导水率和水动力弥散系数,然后将它们代入式(1)和式(2)水分和溶质运移方程,采用有限差分法获得含水率和溶质质量浓度的计算

值,将其与含水率和溶质质量浓度实测值 θ_{ij}, c_{ij} 代入式(12)计算个体适应度值。新一代群体:根据上一代个体适应度函数值、设定的交叉概率和变异概率生成新一代群体,新一代群体也应满足式(8)约束条件。

3 实例

3.1 实验方法及实测数据

实验土样为西安土,风干后过1 mm筛,按1.35 g/cm³容重均匀装入有机玻璃土柱,土壤粒径分布见表1。土壤初始含水率 $\theta_a = 0.075 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$,饱和含水率 $\theta_b = 0.45 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$,实验土柱高100 cm,内截面积105.68 cm²,供水装置为高50 cm、内截面积30.50 cm²的圆柱形马氏瓶,入渗溶液KBr的质量浓度 $c_b = 100 \text{ mg/L}$,土壤 Br⁻¹初始质量浓度 $c_a = 0 \text{ mg/L}$ 。为了保证原始数据的准确性,避免由于在同一土柱连续取土对水分入渗断面的破坏,由此造成对下一组时刻水分和溶质分布的影响,实验采取在相同条件下,同时对4组土柱在入渗结束时(t 为225、420、815和1345 min)取土测量。对含水率采用105°C、12 h干燥箱加热法进行测量,而对 Br⁻¹的测量,则先做出 Br⁻¹质量浓度与电势的关系标线,然后采用溴离子计测量土壤浸提液的电势,通过换算便可获得 Br⁻¹质量浓度实测值。实测土壤含水率和 Br⁻¹质量浓度见图2。

表1 土壤粒径组成

Tab. 1 Composition of soil particle

粒径/mm	0~0.02	0.02~0.05	0.05~1
质量分数/%	15.608	40.116	44.274

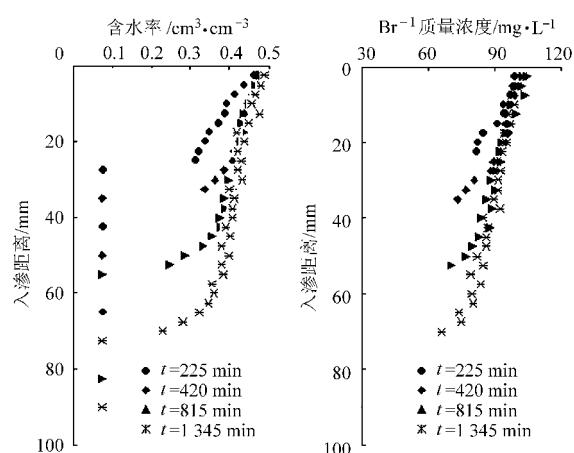


图2 含水率和Br⁻¹质量浓度实测值

Fig. 2 Water content and measured value of mass concentrations of Br⁻¹

3.2 待求参数计算

本例中遗传算法采用实数编码,遗传算法主要

参数为: 遗传代数 200, 个体数目 50, 交叉概率 0.8, 变异概率 0.2, 权重系数 $\alpha = 0.5$, 待求参数约束条件^[15, 18~21]为: $4.12 \text{ cm}^2/\text{min} \leq D_0 \leq 25 \text{ cm}^2/\text{min}$, $1.8 \leq \beta \leq 10$, $0.0002 \text{ cm}/\text{min} \leq K_s \leq 0.12 \text{ cm}/\text{min}$, $2 \leq m \leq 21$, $0.0006 \text{ cm}/\text{min} \leq D_w \leq 0.006 \text{ cm}/\text{min}$,

$0.001 \leq a \leq 0.005$, $0.05 \text{ cm} \leq \lambda \leq 5 \text{ cm}$ 。分别采用单组数据(225、420、815 min)、2 组数据组合(225/420、225/815、420/815 min)、3 组数据组合(225/420/815 min), 共 7 组数据作为参数优化初始数据, 代入式(12)优化求解, 得表 2 所示参数最优值。

表 2 参数最优值

Tab. 2 Optimal parameters

时间/min	$D_0/\text{cm}^2 \cdot \text{min}^{-1}$	β	m	$K_s/\text{cm} \cdot \text{min}^{-1}$	$D_w/\text{cm} \cdot \text{min}^{-1}$	a	λ/cm
225	4.85	3.93	6.05	0.00501	0.0021	0.0036	1.54
420	4.75	3.74	6.15	0.00494	0.0022	0.0034	1.48
815	4.69	3.85	6.43	0.00529	0.0028	0.0034	1.75
225/420	4.88	4.09	6.25	0.00537	0.0025	0.0035	1.49
225/815	4.74	4.08	5.82	0.00688	0.0033	0.0038	1.64
420/815	4.99	4.25	5.86	0.00603	0.0039	0.0031	1.58
225/420/815	4.77	4.09	6.47	0.00527	0.0027	0.0034	1.55

3.3 参数验证

为了验证优化所求参数合理性, 将 225/420/815 min 初始数据组合所得参数代入式(1)和式(5), 计算 $t=1345 \text{ min}$ 时的含水率和 Br^- 质量浓度分布, 如图 3 所示。

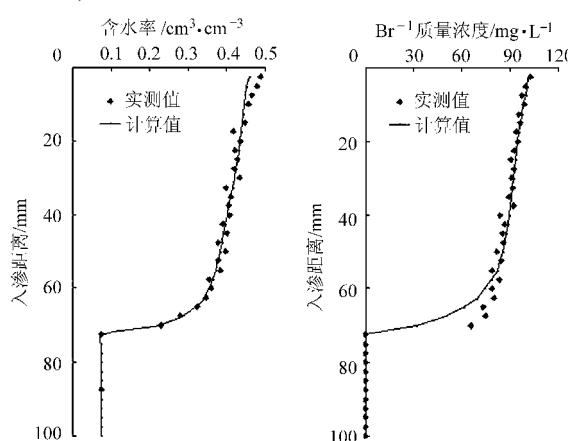
图 3 含水率和 Br^- 质量浓度的实测值与计算值Fig. 3 Measured and calculated value of water content and mass concentrations of Br^-

图 3 表明溶质质量浓度以及含水率的实测值与计算值吻合较好, 经计算含水率实测值与计算值相关系数和标准差分别为 0.9753 和 $0.0507 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$; Br^- 质量浓度的相关系数和标准差分别为 0.9646 和 8.5454 mg/L , 实测值与计算值相关性较大而标准差较小, 这表明本文提出的方法求解溶质运移参数是可行的。

3.4 讨论

为了进一步分析不同时刻实测数据为参数优化初始数据对 1345 min 时刻水分和溶质质量浓度精度的影响, 把表 2 参数代入式(1)和式(2)获得含水率和 Br^- 质量浓度计算值, 7 组参数所得含水率以

及 Br^- 质量浓度的实测值与计算值的相关系数和标准差如表 3 所示。

表 3 相关系数和标准差

Tab. 3 Correlation coefficient and standard deviation

时间 /min	θ		Br^- 质量浓度	
	相关系数	标准差 $/\text{cm}^3 \cdot \text{cm}^{-3}$	相关系数	标准差 $/\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$
225	0.944	0.064	0.962	12.234
420	0.963	0.057	0.935	7.470
815	0.968	0.050	0.958	8.530
平均值	0.958	0.060	0.952	9.411
225/420	0.957	0.050	0.959	9.377
225/815	0.972	0.045	0.960	7.332
420/815	0.964	0.064	0.961	10.074
平均值	0.964	0.053	0.960	8.928
225/420/815	0.975	0.051	0.965	8.545

由表 3 可知: 单组数据作为参数优化初始数据, 含水率实测值与计算值的相关系数和标准差平均值分别为 0.958 和 $0.060 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$, 2 组数据组合所计算的含水率实测值与计算值相关系数和标准差平均值分别为 0.964 和 $0.053 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$, 而 3 组数据分别为 0.975 和 $0.051 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$, 单组、2 组、3 组实测数据作为参数优化数据, 整体呈现出初始数据越多所计算的相关系数越大和标准差越小的规律; 对于 Br^- 质量浓度, 单组平均、2 组平均、3 组数据所计算的相关系数分别为 0.952、0.960、0.965, 标准差分别为 9.411、8.928、8.545 mg/L, 也是呈现初始数据越多所计算的相关系数越大、标准差越小的变化规律。初始数据越多数值计算越精确, 但需要测量的数据点也越多, 实验工作量越大, 而且所得相关系数和标准差精度提高幅度不大, 因此在满足实验精度要求下应选用适量实测数据作为参数优化初始数

据,以2组数据为佳,既保证了实验精度又减少了实验工作量,遗传算法数值迭代所需时间也较少。

4 结束语

以含水率和溶质质量浓度实测值和计算值标准差最小为优化目标,建立了溶质迁移参数优化的目

标函数,综合运用有限差分法、遗传算法、线性加权法等对溶质迁移参数进行了优化求解。分析了7组不同时刻实测数据组合作为模型优化初始数据对实验模拟精度的影响,初始实验数据越多,数值模拟越精确,为了保证实验精度和减少工作量,参数优化初始数据以2组数据为佳。

参 考 文 献

- 1 Kuznetsov A V, Nield D A. The effects of combined horizontal and vertical heterogeneity on the onset of convection in a porous medium with vertical through flow [J]. *Transport in Porous Media*, 2011, 90(2): 465~478.
- 2 Sheng Feng, Wang Kang, Zhang Renduo, et al. Modeling preferential water flow and solute transport in unsaturated soil using the active region model [J]. *Environmental Earth Sciences*, 2011, 62(7): 1491~1501.
- 3 Caner Yürütüa, Matthew J Jonesb, Joachim Ulricha. Modeling of diffusion for crystal growth [J]. *Soft Materials*, 2012, 10(1~3): 257~284.
- 4 Herckenrath D, Langevin C D, Doherty J. Predictive uncertainty analysis of a saltwater intrusion model using null-space Monte Carlo [J]. *Water Resources Research*, 2011, 47(5): W5504.
- 5 马娟娟,孙西欢,郭向红,等.蓄水多坑入渗条件下土壤水分运动建模与试验[J].农业机械学报,2010, 41(3): 46~51.
Ma Juanjuan, Sun Xihuan, Guo Xianghong, et al. Numerical simulation on soil water movement under water storage pits irrigation [J]. *Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery*, 2010, 41(3): 46~51. (in Chinese)
- 6 Bresler E, Naor A. Estimating transport parameters in soils by a maximum likelihood approach [J]. *Soil Science Society of America Journal*, 1987, 51(4): 870~875.
- 7 Jury W A, Sposito G. Field calibration and validation of solute transport models for the unsaturated zone [J]. *Soil Science Society of America Journal*, 1985, 49(6): 1331~1341.
- 8 Toride Nlfjv. The extfit code for estimating transport parameters from laboratory or field tracer experiments [M]. Riverside, CA: US Salinity Laboratory, 1995.
- 9 刘春平,叶乐安,邵明安,等.土壤溶质迁移参数估计图解方法[J].土壤学报,2004,41(5): 715~720.
Liu Chunping, Ye Lean, Shao Ming'an, et al. Graphing method for parameter estimation of cde of solute transport in soils [J]. *Acta Pedologica Sinica*, 2004, 41(5): 715~720. (in Chinese)
- 10 李京玲,孙西欢,马娟娟,等.蓄水坑灌单坑土壤水分运动模型的有限体积法求解[J].农业机械学报,2011, 42(5): 63~67, 85.
Li Jingling, Sun Xihuan, Ma Juanjuan, et al. Numerical simulation for single pit soil water movement of water storage pit irrigation [J]. *Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery*, 2011, 42(5): 63~67, 85. (in Chinese)
- 11 杨文涛,刘春平,文红艳.一种估计溶质迁移参数的统计-确定性方法[J].勘察科学技术,2006(5): 16~19.
Yang Wentao, Liu Chunping, Wen Hongyan. A statistic-determined method for estimation of solute transport parameters in porous media [J]. *Site Investigation Science and Technology*, 2006(5): 16~19. (in Chinese)
- 12 杨强,高幼龙,丁伟翠,等.溶质迁移弥散系数反演数值方法初步研究[J].水资源与水工程学报,2009, 20(2): 133~136.
- 13 翟春生,邵爱军,彭建平,等.土壤水动力弥散系数的室内测定[J].南水北调与水利科技,2007, 5(5): 87~89.
- 14 王永峰.求解半无限长多孔介质柱体水动力弥散系数的一种最小二乘法[J].地下水,2010, 32(3): 6~8.
- 15 崔凯,杨国伟,李兴斯,等.用同伦方法反演非饱和土中溶质迁移参数[J].力学学报,2005, 37(3): 307~312.
Cui Kai, Yang Guowei, Li Xingsi, et al. A homotopy method for parameter inversion of solute transport through unsaturated soils [J]. *Acta Mechanical Sinica*, 2005, 37(3): 307~312. (in Chinese)
- 16 Olsen S R, Kemper W D. Movement of nutrients to plant roots [M]. *Advances in Agronomy*, 1968, 20: 91~151.
- 17 雷英杰,张善文,李续武. Matlab 遗传算法工具箱及应用[M].西安:西安电子科技大学出版社, 2005.
- 18 李韵珠,李保国.土壤溶质迁移[M].北京:科学出版社, 1998.
- 19 郑子成,李卫,李廷轩,等.基于分形理论的设施土壤水分特征曲线研究[J].农业机械学报,2012, 43(5): 49~54.
Zheng Zicheng, Li Wei, Li Tingxuan, et al. Soil water retention curve based on fractal theory in greenhouse soil [J]. *Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery*, 2012, 43(5): 49~54. (in Chinese)
- 20 Shahu J T, Hayashi S. Discussion of “analysis of extensible reinforcement subject to oblique pull” [J]. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 2010, 136(9): 1305~1308.
- 21 Shahu J T, Hayashi S. Analysis of extensible reinforcement subject to oblique pull [J]. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 2009, 135(5): 623~634.
- 22 辛绪亮,张晓冬,赵宗昌,等.离子液体[BMIM]Br的水溶液vle与扩散系数的分子模拟[J].化工学报,2012, 62(增刊2): 16~20.
Xin Xuliang, Zhang Xiaodong, Zhao Zongchang, et al. Molecule simulation of VLE and diffusion coefficient for aqueous solution of 1-butyl-3-methylimidazolium bromide [J]. *CIECS*, 2012, 62(Supp. 2): 16~20. (in Chinese)