

应用三次样条函数计算土壤水分扩散率^①张俊^{1,3}, 徐绍辉², 刘建立¹, 张佳宝¹

(1 中国科学院南京土壤研究所, 南京 210008; 2 青岛大学环境科学与工程系, 山东青岛 266071;

3 中国科学院研究生院, 北京 100049)

摘要: 采用三次样条函数计算土壤含水量分布, 用土壤含水量分布计算土壤水分扩散率, 并将其与 Bruce 和 Klute 方法的结果进行比较, 结果表明: 除了土壤含水量在接近饱和时计算结果偏差较大外, 采用三次样条函数得出的土壤水分扩散率与经典的 Bruce 和 Klute 方法结果接近。因此, 三次样条函数法是计算土壤水分扩散率的一种简便可行的方法。

关键词: 三次样条函数; 水平入渗实验; 土壤水分扩散率

中图分类号: S152.7

在土壤水流运动和溶质运移的研究中, 数学模型已经被广泛应用, 而采用模型模拟的首要问题就是确定有效的模型参数^[1]。土壤水分扩散率是这些模型中的重要参数之一^[2-3]。Bruce 和 Klute^[4]在 1956 年提出了用水平入渗实验计算土壤水分扩散率, Kirkham 和 Powers^[5]详细论述了这种方法的应用。Cassel 等^[6]用不同时刻的土壤含水量分布来估计土壤水分扩散率。Clothier 等^[7]指出 Bruce 和 Klute 的方法很难对土壤水分分布曲线求导, 他们采用土壤水分分布函数导出了扩散函数, 从而避免了对实验数据的求导。Warrick^[8]用土壤水分分布数据估计土壤水力函数参数, 然后利用水力函数与水分扩散率的关系计算出土壤水分扩散率。Shao 等^[9]使用了普遍相似理论 (general similarity theory) 而不是 Boltzman 变化来计算土壤含水量分布, 然后用 Brooks 和 Corey^[10]的扩散率函数计算土壤水分扩散率。Wang 等^[11]采用 Brooks 和 Corey 的水力函数建立了土壤水分扩散率与相对含水量的幂函数模型, 并用实验数据反求得此幂函数模型的参数, 从而求得土壤水分扩散率。尽管估计土壤水分扩散率有许多方法, 但普遍使用的仍然是 Bruce 和 Klute 提出的方法^[12]。该方法的关键是获得土壤水分分布的光滑曲线。传统的做法是采用徒手作图, 因为通常不能获得解析式, 然而这种做法不但浪费时间而

且准确度不高。Erh^[13]用三次样条插值函数模拟了土壤水分特征曲线和土壤含水量分布。Ferdinand 等^[14]采用可视化数据点内插三次样条函数。本文的目的是用三次样条函数计算土壤含水量分布, 然后用导出的土壤含水量分布曲线计算出土壤水分扩散率。计算过程与 Bruce 和 Klute 的方法相似, 不同之处是土壤含水量分布的确定是用三次样条函数插值计算而不是徒手绘图。最后, 对计算出的土壤水分扩散率与 Bruce 和 Klute 法获得的土壤水分扩散率进行比较, 并且对三次样条函数的局限性进行讨论。

1 计算方法

水平入渗过程可以用扩散型方程描述:

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

其中 t 是时间, x 水平入渗是距离。边界条件是:

$$\theta = \theta_i \quad x > 0, t = 0 \quad (2)$$

$$\theta = \theta_s \quad x > 0, t \geq 0 \quad (3)$$

其中 θ_i 是初始含水量, θ_s 是进水端含水量。

Bruce 和 Klute 指出如果引入 Boltzman 变量 $\lambda = xt^{-1/2}$, 方程 (1) 可以积分得到扩散率, 计算公式如下:

①基金项目: 国家自然科学基金重大项目 (30390080)、国家高技术研究发展计划 (863) 项目 (2003AA209010) 资助。

作者简介: 张俊 (1978—), 男, 贵州贵阳人, 博士研究生, 主要从事多孔介质中溶质和水分数值模拟的研究。E-mail: jzhang@issas.ac.cn

$$D(\theta) = -\frac{1}{2} = \frac{d\lambda}{d\theta} \int_{\theta_n}^{\theta} \lambda d\theta \quad (4)$$

其中 $\frac{d\lambda}{d\theta}$ 采用自然边界条件的三次样条函数求得, 具体计算过程在大多数数值分析书里都有^[15], 在此不再赘述。方程 (4) 的积分项 $\int_{\theta_n}^{\theta} \lambda d\theta$ 采用梯形法求得, 积分区间为 0.02, 即

$$\int_{\theta_n}^{\theta} \lambda d\theta = \sum_{i=0}^m \frac{1}{2} (\lambda(\theta_i) + \lambda(\theta_{i+1})) (\theta_{i+1} - \theta_i) \quad (5)$$

其中, m 为积分区间的个数, $\lambda(\theta_{i+1})$ 、 $\lambda(\theta_i)$ 分别是 θ_{i+1} 和 θ_i 时的 λ 值。

2 材料与方法

水平入渗实验采用圭尔夫水平入渗仪, 由 9 节透明有机玻璃圆环组成, 每节为 3.5 cm, 直径为 5 cm。用马里奥特瓶供水, 在注水口采用多孔板以

获得零水头。整个试验装置如图 1 所示。土壤是采自中国科学院封丘农业生态试验站的砂土和砂质壤土。土样风干, 过 2 mm 筛, 按照文献[16]所述的方法装入有机玻璃柱。土壤的物理性质如表 1 所示。当湿润峰到达第 9 节时, 入渗结束。迅速断开供水装置, 用重量法测出每节圆柱中土壤含水量。

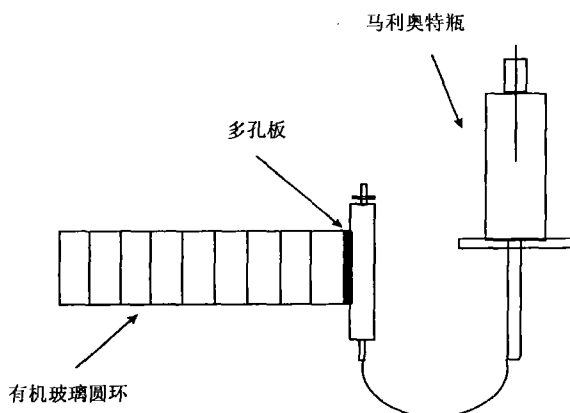


图 1 圭尔夫水平入渗实验装置示意图

Fig. 1 A schematic map of the infiltration system

表 1 供试土壤物理性质

Table 1 Physical properties of the soils tested in experiment

土壤类型	机械组成 (g/kg)			体积质量 (容重) (g/cm ³)	初始含水量 (cm ³ /cm ³)
	>0.05mm	0.05 ~ 0.002 mm	<0.002 mm		
砂土	45.60	406.7	137.3	1.42	0.034
砂质壤土	16.20	734.0	104.0	1.51	0.042

3 结果与讨论

土壤含水量分布用 $\lambda-\theta$ 曲线表示, 其中 λ 是 Boltzman 变量, θ 是土壤含水量。用三次样条插值法获得的砂土和砂质壤土的土壤含水量分布分别如

图 2 和图 3 所示。尽管通常假设注水口 ($x=0$) 处的土壤含水量等于土壤饱和含水量, 但本文没有作此假设。所以两条曲线的 λ 值都不等于 0。图 4 和图 5 分别表示在砂土和砂质壤土中用三次样条插值

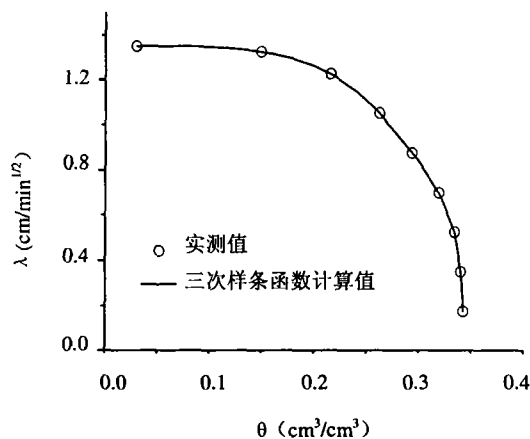


图 2 砂土土壤含水量分布

Fig. 2 Distribution of soil water contents in sandy soil

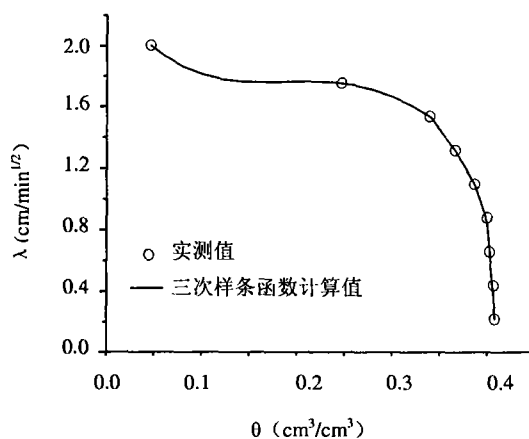


图 3 砂质壤土土壤含水量分布

Fig. 3 Distribution of soil water contents in sandy loam soil

函数计算的土壤水分扩散率与 Bruce 和 Klute 方法计算的土壤水分扩散率的比较。 D 为土壤水分扩散率。结果表明,当土壤接近饱和时,用三次样条函数计算的土壤水分扩散率都偏大,分别为 16.22 和 $19.13 \text{ cm}^2/\text{min}$ 。在砂土和砂质壤土中,用三次样条函数和 Bruce 和 Klute 方法计算的土壤水分扩散率的均方根误差(RMSE)分别为 3.60 和 $2.89 \text{ cm}^2/\text{min}$ 。而当土壤为非饱和时,两种土壤用三次样条函数获得的土壤水分扩散率与 Bruce 和 Klute 方法是比较接近的,此时两种方法计算的土壤水分扩散率的均方根误差(RMSE)分别降为 0.32 和 $0.45 \text{ cm}^2/\text{min}$ 。这可以用 $\lambda-\theta$ 曲线来解释。在图 2 和图 3 中我们注意到,当土壤接近饱和时 Boltzman 变量“ λ 变陡”,这表明公式(4)中 $d\lambda/d\theta$ 值很大,因而土壤水分扩散率变大。在实际水流过程中,当土壤接近饱和时,由于导水孔隙相互连通因而土壤水分扩散率高于非饱和时的土壤水分扩散率。但是,在三次样条函数

的求导过程中,由于含水量的微小变化引起 $d\lambda/d\theta$ 巨大变化,使得计算结果远高于实际结果。这说明当土壤接近饱和时用三次样条函数计算出的土壤水分扩散率是不准确的。我们还注意到图 4 和图 5 中,两种土壤的土壤水分扩散率是非单调的,即波动的。这可能也是由公式(4)中的 $d\lambda/d\theta$ 引起的。砂土和砂质壤土在不同水分含量时 Boltzman 变量的导数 $d\lambda/d\theta$ 分别如图 6、图 7 所示。可以看出导数呈非单调变化,这可能是因为三次样条函数的计算中插值点(实测值)的数目和步长引起的。由图 2 和图 3 可以看出,在较低的含水量时插值点数目减少,步长变大。由于三次样条函数实际上是分段 3 次多项式插值,其计算过程与插值点的步长有关。如果插值点步长较大,在这些点中作插值,误差会增大;若增加插值点的个数,则步长减小,在分段多次插值时误差也将减小^[15]。此外,实测值的实验误差和观测误差,也可能导致插值时的波动或者非单调性。

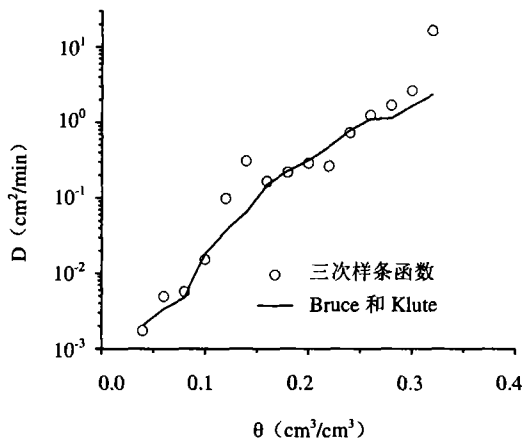


图 4 砂土土壤水分扩散率

Fig. 4 Soil water diffusivity in sandy soil

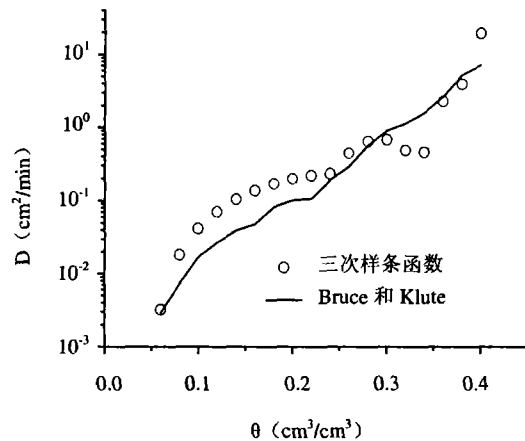


图 5 砂质壤土土壤水分扩散率

Fig. 5 Soil water diffusivity in sandy loam soil

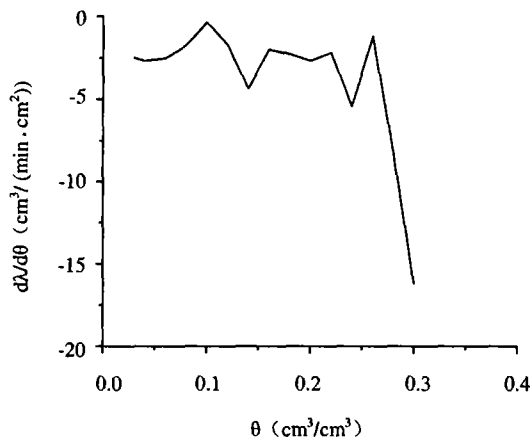


图 6 砂土土壤水分扩散率

Fig. 6 Derivatives of λ for sandy soil

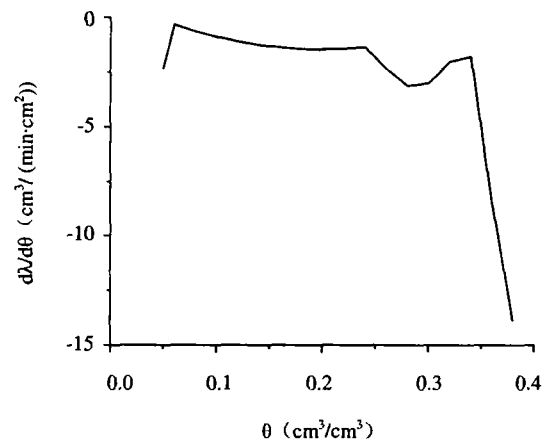


图 7 砂质壤土土壤水分扩散率

Fig. 7 Derivatives of λ for sandy loam soil

4 结论

(1) 当土壤接近饱和时,用三次样条函数获得的土壤水分扩散率高于 Bruce 和 Klute 方法求得的土壤水分扩散率,而当土壤为非饱和时,两种方法结果接近。

(2) 在低含水量时增加插值点的数目可以减少土壤水分扩散率的波动。

(3) 减少实验误差可以提高三次样条函数插值的准确性,进而可以准确计算土壤水分扩散率。

总体来说,用三次样条函数来计算土壤水分扩散率是可行的。该方法的整个过程可以由计算程序直接完成,从而避免了徒手作图和繁琐计算,因此三次样条函数法是计算土壤水分扩散率的一种简便可行的方法。

参考文献:

- [1] Zhang JB, Roth K. Field-scale contaminant transport through soil: Current understanding and open questions. *Pedosphere*, 1999, 9 (4): 339-350
- [2] 徐力刚, 杨劲松, 张妙仙. 种植作物条件下粉砂壤质土壤水盐运移的数值模拟研究. *土壤学报*, 2004, 41 (1): 50-55
- [3] 张俊, 徐绍辉. 数值反演方法在确定土壤水力性质中的研究进展. *土壤*, 2003, 35 (3): 211-215
- [4] Bruce RR, Klute A. The measurement of soil moisture diffusivity. *Soil Sci. Soc. Am. Proc.*, 1956, 20: 458-462
- [5] Kirkham D, Powers WL. *Advanced Soil Physics*. New York: Wiley-Interscience, 1972: 256-264
- [6] Cassel DK, Warrick AW, Nielsen DR, Bigger JW. Soil-water diffusivity values based upon time dependent soil-water content distributions. *Soil Sci. Soc. Am. Proc.*, 1968, 32: 774-777
- [7] Clothier BE, Scotter DR, Green AE. Diffusivity and one-dimensional absorption experiments. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 1983, 47: 641-644
- [8] Warrick AW. Soil water diffusivity estimates from one-dimensional absorption experiments. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 1994, 58: 72-77
- [9] Brooks RH, Corey AJ. *Hydraulic properties of porous media*. Hydrol. Paper 3. Colorado, Fort Collins: Colo. State Univ., 1964
- [10] Shao M, Horton R. Soil water diffusivity determination by general similarity theory. *Soil Sci.*, 1996, 161: 727-734
- [11] Wang Q, Shao M, Horton R. A simple method for estimating water diffusivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 2004, 68: 713-718
- [12] Klute A, Dirksen C. *Methods of soil analysis*. 2nd ed. Madison: Wiley-Interscience, 1986: 687-734
- [13] Erh KT. Application of spline function to soil science. *Soil Sci.*, 1972, 114: 333-338
- [14] Ferdinand JK, Donald RN. Description of soil water characteristics using cubic spline interpolation. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 2001, 65: 279-283
- [15] 孙志忠, 袁慰平, 闻震初. *数值分析*. 2版. 南京: 东南大学出版社, 2002: 134-147
- [16] 华孟, 王坚. *土壤物理学*. 北京: 北京农业大学出版社, 1993: 302-308

Application of Cubic Spline Function to Calculation of Soil Water Diffusivity

ZHANG Jun^{1,3}, XU Shao-hui², LIU Jian-li¹, ZHANG Jia-bao¹

(¹ Institute of Soil Science, Chinese Academy of Sciences, Nanjing 210008, China; ² Department of Environmental Science and Engineering, Qingdao University, Qingdao, Shandong 266071, China; ³ Graduate School of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: Cubic spline function was used to assess soil water distribution, and then further to calculate soil water diffusivity. From the experiments, it was found that the soil water diffusivity estimated with the method mentioned above was close to that obtained with the classic Bruce and Klute method except when soil water content was near saturation. The whole process could be done quickly with the aid of a computer program without the trouble of freehand drawing. Therefore, the method is a simple workable one for calculation of soil water diffusivity.

Key words: Cubic spline function, Horizontal infiltration experiment, Soil water diffusivity