

基于 PEST 的 RZWQM2 模型参数优化与验证*

孙美¹ 张晓琳¹ 冯绍元² 霍再林¹

(1. 中国农业大学水利与土木工程学院, 北京 100083; 2. 扬州大学水利科学与工程学院, 扬州 225009)

摘要: 根据糯玉米-冬小麦田间喷灌试验不同处理结果,利用独立的自动参数估计软件 PEST 对 RZWQM2 模型进行参数优化,并分析了 24 个模型参数的综合敏感度。通过控制不同观测变量(土壤含水率、土壤氮素含量、作物叶面积指数、产量)模拟差异函数值在目标函数中的比重,优化目标方程,确定模型参数,并用田间试验数据对模型进行验证。结果表明,在不同观测变量的模拟差异函数值最接近条件下,冬小麦出叶间隔特性参数、冬小麦春化作用敏感特性参数及糯玉米出叶间隔特性参数等 3 个参数对模型整体模拟效果影响最大。相比试错法而言,基于 PEST 优化的 RZWQM2 模型能够更准确地模拟糯玉米-冬小麦轮作系统中水分、氮素及作物生长情况。

关键词: 糯玉米-冬小麦轮作 RZWQM2 模型 PEST 敏感度分析 参数优化

中图分类号: S154.4 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-1298(2014)11-0146-08

引言

土壤水-氮-作物生产模型使用过程中,一般需要较多的输入参数,但这些参数由于土壤和作物参数本身的时空变异性再加上不同研究情况和不同背景下的测量值及率定后的模拟值有较多的随机性及差异,都给模型的模拟结果带来很大不确定性^[1-2]。RZWQM2 (Root zone water quality model) 模型已被广泛应用于刻画土壤水文循环过程,评价不同气候及土壤条件下农业管理实践对作物生产的影响^[3-6]。然而,传统的参数试错法依赖于模型使用者的专业知识及经验,需要花费较长时间才能达到满意的模拟效果,同时所估计的模型输入参数在系统性、可重复性方面也存在不足^[4]。近年来,参数自动率定方法,如 PEST 在地下水运动模型、水文模型等^[7-12]中的应用,提供了一种较为客观、系统、自动的参数估计方法^[13]。Iskra 等^[14]将 PEST 与 SCE-UA (Shuffled complex evolution method developed at the University of Arizona) 以及 RSM (Random multiple search method) 方法应用于流域水文模型 HSPF (Hydrological simulation program fortran) 的参数优化中,认为 PEST 软件采用的 Gauss - Marquardt - Levenberg 算法的优化速度很快,只要初始参数选择合适,且优化过程中剔除不敏感参数,其优化结果与 SCE-UA 算法一样良好。Nolan 等^[15]首次将自动参

数估计软件 PEST 应用于 RZWQM2 模型的率定,估计了非饱和带中土壤水分、氮素运移参数,并推导氮素质量平衡过程。Fang 等^[4]利用 PEST 与拉丁超立方体抽样法 (Latin hypercube sampling, LHS) 率定了 RZWQM2 模型中的土壤水利参数,并分析休耕条件下土壤水分动态情况。房全孝^[16]分析了 RZWQM2 模型参数优化不确定性的来源,并对模型中土壤参数和作物遗传参数进行了优化,结果表明 PEST 优化模拟结果较传统试错法更准确、高效。朱国威等^[17]、张芊等^[18]采用单参数灵敏度分析法对 RZWQM2 模型参数敏感性进行了分析,并对模型在新乡及禹城试验站的应用进行了参数标定。综上所述,PEST 用于优化 RZWQM2 模型中参数有着明显的优势和较高的效率,但同时优化 RZWQM2 模型中土壤水分、营养、作物遗传参数,并同时分析它们相对敏感性的研究则较少。本文利用自动优化程序 PEST 分析 3 类(土壤水分、营养、作物遗传)共计 24 个模型输入参数的相对综合敏感性,并估计它们的数值,验证模型参数优化结果的准确性。

1 材料与方法

1.1 田间试验

本文所用田间试验数据来源于糯玉米-冬小麦田间喷灌试验,该试验在北京市大兴区中国农业科学院农业环境与可持续发展研究所试验站(北纬

收稿日期: 2013-11-01 修回日期: 2013-12-31

* 国家自然科学基金优秀青年基金资助项目(51322902)和教育部新世纪优秀人才支持计划资助项目(NCET-13-0554)

作者简介: 孙美, 博士生, 主要从事农田水循环研究, E-mail: sunmei-0451@163.com

通讯作者: 霍再林, 副教授, 主要从事农田水循环与水土环境、作物水盐响应及高效用水研究, E-mail: huozl@cau.edu.cn

39°48', 东经 116°28', 海拔高度 31.3 m) 进行。糯玉米为“中糯 1 号”, 2003 年 6 月 18 日播种, 2003 年 9 月 12 日收获, 播种密度 5.55×10^4 株/hm², 行距 60 cm, 株距 30 cm; 冬小麦品种为“9508”, 2003 年 10 月 8 日播种, 2004 年 6 月 13 日收获, 播种密度为 2.50×10^6 株/hm², 行距 30 cm。本研究田间试验对糯玉米和冬小麦分别考虑了喷灌均匀系数(通过选择不同喷头工作压力获得)和喷灌施肥量(氮肥) 2 个试验因素, 设 3 个处理(以下记为东、中、西处理), 每个处理 36 个重复。糯玉米田间试验只涉及喷头工作压力变化, 东处理为 0.30 MPa, 喷灌均匀系数平均值为 82%; 中处理 0.20 MPa, 喷灌均匀系数平均值为 76%; 西处理为 0.15 MPa, 喷灌均匀系数平均值为 70%。冬小麦田间试验只涉及喷灌施

肥量变化, 各处理喷头工作压力为 0.30 MPa, 东处理生育期内总施氮量为 292.5 kg/hm²; 中处理为 232.5 kg/hm²; 西处理为 112.5 kg/hm²。作物生育期内各处理的灌水日期、水氮施用量, 如表 1 所示。选用 LEGO 公司生产的喷头, 0.3 MPa 压力下出水量为 0.8 m³/h, 安装在处理小区四角, 每个处理的喷头布置、喷头类型均相同, 尺寸均为 15 m × 15 m。试验区域内的土壤主要为砂壤土和粉壤土。该处 0~100 cm 土壤基本物理性质(土壤容重、砂粒含量(粒径 0.05~2 mm)、粉粒含量(粒径 0.002~0.05 mm)、粘粒含量(粒径小于 0.002 mm))见表 2。具体糯玉米-冬小麦田间试验布置及设计方案参见文献[19]。

表 1 糯玉米、冬小麦生育期内不同处理灌水日期及水氮施用量

Tab. 1 Dates and depths of irrigation and nitrogen application rates for different treatments during the growth seasons of a rotation system of waxy maize and winter wheat

作物	灌水日期	东处理		中处理		西处理	
		灌水量/cm	施肥量/(kg·hm ⁻²)	灌水量/cm	施肥量/(kg·hm ⁻²)	灌水量/cm	施肥量/(kg·hm ⁻²)
糯玉米	2003-07-16	4.2	83	4.0	83	4.0	83
	2003-07-30	4.1	106	4.6	106	4.2	106
	2003-08-12	4.1		4.3		4.1	
	2003-08-26	5.1		5.6		5.1	
	2003-10-06(底肥)		112.5		112.5		112.5
冬小麦	2004-03-24	2.8	75	2.9	45	3.0	
	2004-04-03	1.9		1.9		2.0	
	2004-04-19	5.0	60	5.0	45	4.7	
	2004-05-13	6.0	45	5.8	30	6.6	
	2004-06-03	4.8		5.1		4.7	

表 2 试验区土壤物理性质

Tab. 2 Soil physical characteristics in test site

处理	深度/cm	质量分数/%			容重/(g·cm ⁻³)
		砂粒	粉粒	粘粒	
东	0~20	36.73	63.02	0.25	1.404
	20~40	39.91	60.02	0.07	1.661
	40~100	60.7	39.14	0.16	1.178
中	0~20	40.42	59.42	0.16	1.649
	20~40	34.15	65.7	0.15	1.527
	40~100	59.09	40.67	0.24	1.195
西	0~20	45.01	54.83	0.16	1.645
	20~40	35.36	64.47	0.17	1.564
	40~100	26.42	73.55	0.03	1.569

本文中田间试验东处理数据用于 RZWQM2 模型率定过程, 中、西处理数据用于 RZWQM2 模型验证过程。由于 RZWQM2 模型并不能直接设定喷灌均匀系数或喷头工作压力, 而喷头工作压力对喷头出水量有直接影响, 因此, 在模型模拟过程中仅能以田间喷灌实际平均灌水量简化处理来代替糯玉米田

间试验中不同处理变化情况。

本文中涉及的观测变量有土壤体积含水率、土壤硝态氮含量、作物叶面积指数、作物产量共 4 类。土壤体积含水率用 TDR 和中子仪监测, 正常情况下每周测一次, 灌水前后 1 d 左右各加测一次。土壤硝态氮含量在每次灌水后 2 d 左右, 以每 20 cm 为一层用土钻分层取 100 cm 土层内土壤, 取回土样风干后用流动分析仪 AA3 测定土壤中硝态氮含量。作物叶面积指数每 10 d 左右测一次, 糯玉米生育期内每个处理取 3 个点, 每点 5 株玉米分别测量后取平均值, 冬小麦生育期内每个处理沿一垄取 10 cm 冬小麦测叶面积指数后取平均值。作物收获时, 将试验处理 15 m × 15 m 的田块分成 2.5 m × 2.5 m 网格。糯玉米生育期内在每个网格中心取 6 株糯玉米进行考种测产, 冬小麦生育期内在每网格中心取 3 行 60 cm(取样面积 0.54 m²) 的冬小麦进行考种测产。

1.2 RZWQM2 模型

本文采用耦合了 DSSAT4.0 作物生长模块^[20]

的 RZWQM 模型 (RZWQM2)。RZWQM2 模型是一个基于过程的农业系统模拟模型,它包括的生物、物理、化学过程可用来预测水力及化学响应并评价农业管理对作物产量及土壤水质的影响^[21]。模型中需要气象、降雨、积雪层等气象条件来计算土壤温度、潜在蒸发,进而模拟土壤水分动态。RZWQM2 模型的基础为土壤水分平衡模型。模型中的物理模块用 Green - Ampt 方程^[22]描述土壤水分入渗过程; Brooks - Corey (BC) 方程^[23]描述土壤水分特征曲线; Richards 方程^[24]描述分层土壤间土壤水分重分布情况。模型用扩展的双层潜在蒸腾模型来模拟作物残茬和风影响下的作物蒸发。模型中营养模块所用的有机物/氮循环营养物子模型 (OMNI) 包括的 8 个营养库,可以模拟所有的主要氮去向 (矿化、硝化、氨蒸发、尿素水解、甲烷产生、二氧化碳产生、微生物生长及死亡)^[21]。在 RZWQM2 模型中,作物生长模型可选择 DSSAT4.0 模型中的 CERES-Maize^[25] 及 CERES-Wheat^[26] 来分别模拟玉米及小麦生长。CERES 系列模型以天为时间步长模拟作物产量、叶片数、作物物候期及形态生长,作物遗传参数个数及数值因作物品种不同而变化。

1.3 PEST 软件参数优化算法及敏感性

1.3.1 PEST 软件参数优化算法

PEST (Parameter ESTimation software)^[27] 是与模型相互独立的不确定性分析和参数估计的综合软件,不需要对模型本身进行任何修改。PEST 通过多次不断调整模型参数使模型输出与相应实测值差异达到最小。PEST 模型采用梯度下降法与高斯牛顿法结合的非线性 Gauss - Marquardt - Levenberg 算法,同时具备高斯牛顿法的快速收敛性,又具备梯度下降法的全局搜索性^[28-29]。它能够朝着目标函数有效而更快的收敛,估计参数时所用模型运行次数比其他算法更少^[30]。PEST 算法核心是对目标函数求解最小值,目标方程为基于模型参数某一输出变量的计算值与实际观测值的带权重最小二乘差异函数 $\psi(F)$, 其公式为

$$\psi(F) = \psi_{sm} + \psi_{sn} + \psi_{LAI} + \psi_Y = \sum_{i=1}^{m_1} w_{sm,i}^2 (O_{sm,i} - P_{sm,i})^2 + \sum_{i=1}^{m_2} w_{sn,i}^2 (O_{sn,i} - P_{sn,i})^2 + \sum_{i=1}^{m_3} w_{LAI,i}^2 (O_{LAI,i} - P_{LAI,i})^2 + \sum_{i=1}^{m_4} w_{Y,i}^2 (O_{Y,i} - P_{Y,i})^2 \quad (1)$$

式中 $\psi(F)$ ——基于参数组 F 的目标函数

O ——观测值 P ——模拟值

w ——观测值的权重系数 i ——时刻

m_1, m_2, m_3, m_4 ——观测个数

Y ——作物产量

下标 sm 表示土壤体积含水率, sn 表示土壤硝态氮含量, LAI 表示作物叶面积指数。

1.3.2 参数敏感分析

PEST 参数敏感分析中,本文采用参数相对综合敏感度^[27]来分析参数的敏感性及其优化难易程度,计算公式为

$$I_j = |s_j p_j| \quad (2)$$

式中 s_j ——第 j 个参数的综合敏感度

p_j ——第 j 个参数值

s_j 计算方法为^[27]

$$s_j = (J^T Q J)_{jj}^{-1/2} / m \quad (3)$$

式中 J —— m 行 n 列的雅可比矩阵

m ——权重值非零的观测值个数

n ——待估计参数的个数

Q ——基于观测值权重的协因子对角矩阵

在参数估计过程中,综合敏感度是由所有观测数据得到的。若某一参数的综合敏感度较大,说明此参数在整个优化过程中比较容易被优化,且对输出结果有较大影响;综合敏感度较小时,说明对于现有的观测数据,该参数比较难或者不可能被正确优化。若某一参数小于 1 且参数估计时经过对数变换,综合敏感度按照参数的对数值进行相关计算,则综合敏感度可能为负值,参数相对综合敏感度始终为正值,且与该参数变化幅度正相关。因此,参数相对综合敏感性更有利于不同类型、不同数量级参数间的敏感性对比,可用于表征基于某一参数值变化时引起的模型预测结果的综合变化^[27]。

1.3.3 RZWQM2 参数估计方案

应用 PEST 软件对 RZWQM2 模型参数估计的主要步骤如下:

(1) 确定 RZWQM2 模型要估计的输入参数、各参数的取值范围、初始值,以及与实际观测值对应的模型输出响应变量,如表 3 所示。

(2) 本文中待优化参数的选择及其取值范围参考实测数据及 RZWQM2 模型、CERES-Maize/Wheat 模型的相关文献研究结果。由于土壤水分特征曲线实测数据的缺乏,对本次试验水分运动参数进行优化时,采用 RZWQM2 模型提供的最少水分运动参数输入选项,即各层土壤的饱和导水率和 0.01 MPa 吸力下的土壤含水率 (田间持水量 Q_f)。PEST 模型优化的初始值使用作者采用试错法确定的模型参数。输入变量的选择与实际观测组对应。

(3) 建立 PEST 软件运行所需的临时文件 (* . TPL: 标识模型输入参数)、指令文件 (* . INS: 标识观测数据)、控制文件 (* . PST: 控制并调用临时文件和指令文件)。

(4) 根据 PEST 软件包中 PAR2PAR 模块应用要求, 建立该模块与 RZWQM2 模型输入文件对应的临时文件 (* . TPL)、输入文件 (* . IN), 以实现 PEST 软件与 RZWQM2 模型之间的数据交换。

(5) 在 DOS 窗口下, 执行控制文件 (* . PST), 计算机根据控制文件中使用者给定的路径地址自动调用 RZWQM2 模型程序。PEST 优化时, 先设定优化 1 次, 根据不同类型观测变量的 ψ 值大小, 通过调整权重系数 w , 使 4 类观测变量模拟差异函数值 ψ_{sm} 、 ψ_{sn} 、 ψ_{LAI} 、 ψ_Y 最接近, 以同时获得较好的土壤水分、土壤氮素和作物叶面积、产量模拟结果。不同变

量模拟差异比例失衡, 可能引起部分参数的过度优化, 造成某一观测组模拟误差增加, 模型整体模拟效果变低^[16], 因此, 本文所指的模型整体模拟效果指各变量差异函数值最接近时的模拟效果。

(6) 优化过程中设优化次数为 10 次, 运行 PEST 软件, 共调用 RZWQM2 模型 2 091 次, 得到最终模型率定结果。根据参数率定结果, 分别用田间试验的中、西处理对模型进行验证。

1.4 模型参数优化结果评价

本研究通过计算模型模拟结果与实测值间的标准方差、偏差两个指标, 来评价参数优化结果。

表 3 PEST 优化的 RZWQM2 模型输入参数及其校正范围

Tab.3 Input parameters of RZWQM2 model and their calibration ranges used in PEST method

输入参数类型	参数	定义	取值范围	初始值	优化结果
水利参数	$K_1 / (\text{cm} \cdot \text{h}^{-1})$	0 ~ 20 cm 饱和导水率	0.1 ~ 10	1.650	0.998 5
	$K_2 / (\text{cm} \cdot \text{h}^{-1})$	20 ~ 40 cm 饱和导水率	0.1 ~ 10	1.220	1.596 9
	$K_3 / (\text{cm} \cdot \text{h}^{-1})$	40 ~ 100 cm 饱和导水率	0.1 ~ 10	0.750	0.100 0
	$Q_1 / (\text{cm}^3 \cdot \text{cm}^{-3})$	0 ~ 20 cm 田间含水率	0.15 ~ 0.4	0.255	0.298 3
	$Q_2 / (\text{cm}^3 \cdot \text{cm}^{-3})$	20 ~ 40 cm 田间含水率	0.15 ~ 0.4	0.280	0.337 1
	$Q_3 / (\text{cm}^3 \cdot \text{cm}^{-3})$	40 ~ 100 cm 田间含水率	0.15 ~ 0.4	0.290	0.400 0
营养参数	$A_{\text{NIT}} / (\text{s} \cdot \text{d})$	硝化系数	$1.0 \times 10^{-10} \sim 1.0 \times 10^{-8}$	3.00×10^{-8}	1.73×10^{-8}
	$A_{\text{DEN}} / (\text{s} \cdot \text{d})$	反硝化系数	$1.0 \times 10^{-14} \sim 1.0 \times 10^{-12}$	1.00×10^{-13}	4.49×10^{-13}
	$A_{\text{HYD}} / (\text{s} \cdot \text{d})$	尿素水解系数	$2.5 \times 10^{-5} \sim 2.5 \times 10^{-3}$	2.64×10^{-3}	2.64×10^{-3}
	$K_{\text{dnet}} / (\text{s} \cdot \text{d})$	异养生物死亡率系数	$5.0 \times 10^{-36} \sim 5.0 \times 10^{-34}$	2.76×10^{-34}	5.00×10^{-35}
	$K_{\text{dden}} / (\text{s} \cdot \text{d})$	异养生物死亡率系数(反硝化菌)	$3.4 \times 10^{-34} \sim 3.4 \times 10^{-32}$	2.52×10^{-32}	3.40×10^{-32}
糯玉米遗传参数	$P_{1M} / (^\circ\text{C} \cdot \text{d})$	玉米幼苗生长期内 8℃ 以上积温	150 ~ 290	183	150
	$P_{2M} / (\text{d} \cdot \text{hr}^{-1})$	玉米光周期敏感特性参数	0.2 ~ 0.8	0.55	0.20
	$P_{5M} / (^\circ\text{C} \cdot \text{d})$	玉米灌浆期内 8℃ 以上积温	600 ~ 900	620	900
	$G_{2M} / \text{粒}$	玉米单株最大穗粒数	500 ~ 800	680.0	507.4
	$G_{3M} / (\text{mg} \cdot \text{d})$	玉米潜在灌浆速率	6 ~ 12	9.95	12.00
	$P_{HM} / (^\circ\text{C} \cdot \text{d})$	玉米出叶间隔特性参数	35 ~ 60	45	48
	冬小麦遗传参数	P_{1VW} / d	小麦春化作用敏感特性参数	20 ~ 60	40
$P_{1DW} / \%$		小麦光周期敏感特性参数	30 ~ 90	45.00	45.13
$P_{5W} / (^\circ\text{C} \cdot \text{d})$		小麦灌浆期特性参数	310 ~ 670	530.0	611.7
$G_{1W} / (\text{粒} \cdot \text{g}^{-1})$		小麦单位质量籽粒数	15 ~ 42	26.5	15.0
G_{2W} / mg		小麦适宜条件下标准籽粒质量	20 ~ 55	27	55
G_{3W} / mg		小麦无胁迫条件下成熟期单茎穗质量	0.7 ~ 2	1.500 0	0.782 3
$P_{HW} / (^\circ\text{C} \cdot \text{d})$		小麦出叶间隔特性参数	65 ~ 95	95.00	88.78

2 结果与分析

2.1 RZWQM2 模型输入参数敏感性分析

图 1 为 PEST 软件计算各输入参数的相对综合敏感度 I , 参数敏感分析结果表明作物遗传参数的 I 值总体远大于水分运动参数, 土壤的营养模块参数 I 数量级较小, 认为在各观测组间模拟差异函数值最接近时不容易得到正确优化。对于土壤水分运动参数, 田间持水量对整体模拟结果的影响大于饱和导水率, 这与朱国威等^[17]、张芊等^[18]的研究结果相吻合。糯玉米遗传参数中出叶间隔特性参数与灌

浆期特性参数的相对综合敏感度较高; 冬小麦遗传参数中出叶间隔特性参数、春化作用特性、灌浆期特性及光周期敏感系数对模型整体模拟效果(各观测变量模拟差异函数值最接近时目标方程的 ψ 值)影响较大。

2.2 模型的率定及验证

2.2.1 土壤含水率、硝态氮含量

模型率定后, 糯玉米、冬小麦全生育期内土壤含水率、硝态氮含量的模拟结果如表 4 所示, 其中土壤含水率和硝态氮含量的标准差、偏差均是根据多次观测结果计算而得, 每次观测结果为一次观测中各重复的平均值。与试错法模拟结果比较可以看出,

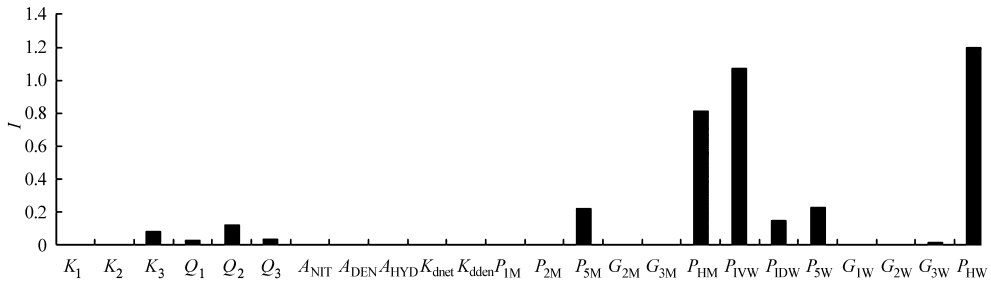


图1 RZWQM2模型各输入参数相对综合敏感度

Fig.1 I of each input parameter of the RZWQM2 model

PEST 率定后东处理的土壤含水率及土壤硝态氮含量的模拟值与实测值误差均小于试错法,模拟精度更高,优化所得的参数可靠。PEST 优化的土壤含水率在 0~100 cm 间模拟结果较好,偏差均小于 10%。标准差最大值为 0.05,发生在 40~60 cm 处;最小值为

0.03,发生在 20~40 cm 及 80~100 cm 处。PEST 优化的土壤硝态氮含量在 20~40 cm、60~100 cm 模拟结果较其他层好,偏差均小于 10%,精度好于试错法结果。偏差最小值仅为 0.04%,发生在 60~80 cm 处。

表4 RZWQM2模拟糯玉米-冬小麦轮作条件下全生育期内土壤各层含水率、硝态氮含量的率定和验证结果

Tab.4 Results of calibration and validation of RZWQM2 model for its simulation of soil water content (SWC) and soil nitrate content (NIT) during the growth seasons of a rotation system of waxy maize and winter wheat

观测变量	深度	东处理(率定)				中处理(验证)		西处理(验证)	
		试错法		PEST 优化		PEST 优化		PEST 优化	
		标准差	偏差/%	标准差	偏差/%	标准差	偏差/%	标准差	偏差/%
土壤含水率	0~20 cm	0.06 cm ³ /cm ³	-3.51	0.04 cm ³ /cm ³	-1.51	0.07 cm ³ /cm ³	-1.81	0.14 cm ³ /cm ³	-0.01
	20~40 cm	0.05 cm ³ /cm ³	1.89	0.03 cm ³ /cm ³	0.87	0.11 cm ³ /cm ³	-10.44	0.08 cm ³ /cm ³	-11.66
	40~60 cm	0.07 cm ³ /cm ³	16.94	0.05 cm ³ /cm ³	8.95	0.14 cm ³ /cm ³	11.77	0.07 cm ³ /cm ³	14.46
	60~80 cm	0.06 cm ³ /cm ³	18.04	0.04 cm ³ /cm ³	8.10	0.15 cm ³ /cm ³	14.43	0.05 cm ³ /cm ³	13.45
	80~100 cm	0.05 cm ³ /cm ³	15.49	0.03 cm ³ /cm ³	7.51	0.14 cm ³ /cm ³	13.89	0.02 cm ³ /cm ³	1.92
	平均值	0.06 cm ³ /cm ³	9.77	0.04 cm ³ /cm ³	4.78	0.12 cm ³ /cm ³	6.37	0.07 cm ³ /cm ³	3.63
硝态氮含量	0~20 cm	25.03 mg/kg	23.28	20.57 mg/kg	13.47	13.93 mg/kg	11.88	13.47 mg/kg	10.31
	20~40 cm	25.77 mg/kg	15.62	25.26 mg/kg	7.81	11.49 mg/kg	-4.00	9.42 mg/kg	-10.70
	40~60 cm	22.60 mg/kg	-24.32	20.98 mg/kg	-20.48	15.52 mg/kg	0.90	16.29 mg/kg	-21.50
	60~80 cm	15.55 mg/kg	-1.22	15.08 mg/kg	0.04	7.31 mg/kg	4.23	16.74 mg/kg	-28.41
	80~100 cm	15.51 mg/kg	3.29	15.01 mg/kg	2.56	7.79 mg/kg	-1.91	19.43 mg/kg	-24.24
	平均值	20.89 mg/kg	3.33	19.38 mg/kg	0.68	11.21 mg/kg	2.22	15.07 mg/kg	-14.91

在模型验证中,中、西处理土壤含水率的模拟结果较东处理略差,中处理标准差最大值为 0.15,西处理标准差最大值为 0.14,土壤含水率的偏差与东处理水平相当。中处理 0~100 cm 深度内土壤含水率模拟结果的标准差、偏差的平均值均大于西处理。中、西处理土壤硝态氮含量较东处理标准差小,但偏差略大。这可能是由于个别点的模拟值与实测值偏差较大,模型未能精确地模拟实测值中的峰值。西处理硝态氮含量在 20~100 cm 内偏差均小于 -10%,说明模型对于西处理硝态氮含量可能产生过高估计。中处理 0~100 cm 深度内土壤硝态氮含量模拟结果的标准差、偏差的平均值均小于西处理。

2.2.2 0~100 cm 土壤贮水量动态变化

图2为0~100 cm 土壤贮水量动态变化的东处理率定结果及中、西处理验证结果比较。从图中可

以看出,对于东处理的率定结果,试错法与 PEST 优化的模拟结果均反映了实测值的变化趋势,糯玉米种植期间两种方法土壤贮水量模拟结果相近。PEST 优化对冬小麦种植期间土壤贮水量估计过低,与试错法相比更接近实测值。中处理的土壤贮水量验证结果较西处理较差,但仍反映了土壤贮水量的动态变化,中、西处理的标准差分别为 3.87、2.61 cm,偏差分别为 22.06%、3.22%。

2.2.3 0~100 cm 土壤硝态氮累积量动态变化

东处理,用试错法和 PEST 优化后模型模拟的作物生育期内土壤硝态氮累积量的变化规律及大小基本相同(图3)。试错法与 PEST 优化模拟的东处理偏差分别为 8.57%、9.89%。模拟验证结果,RZWQM2 模型对作物生育期内土壤硝态氮总量的超高值及超低值的模拟与实测值差异较大。这可能

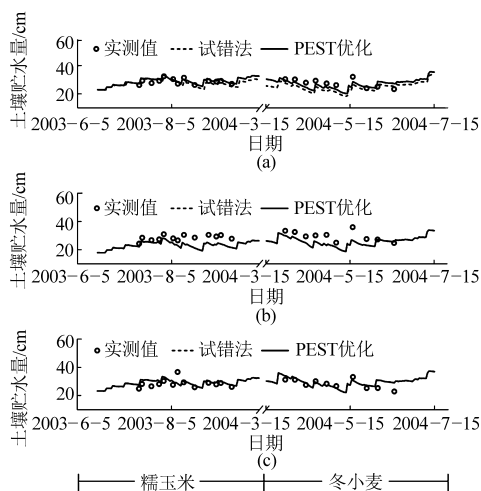


图 2 RZWQM2 模拟 0~100 cm 土壤贮水量的率定和验证结果

Fig. 2 Results of calibration and validation of RZWQM2 model for its simulations of total soil water content in 0~100 cm soil profile

(a) 东处理 (b) 中处理 (c) 西处理

是由于土壤营养参数相对综合敏感性较低,在 PEST 优化过程中未能被准确优化。中、西处理的标准差分别为 112.23、137.46 mg/kg,偏差分别为 1.68%、-25.09%。总体而言,冬小麦生育期内总硝态氮含量模拟结果较糯玉米好;中处理验证结果优于西处理。

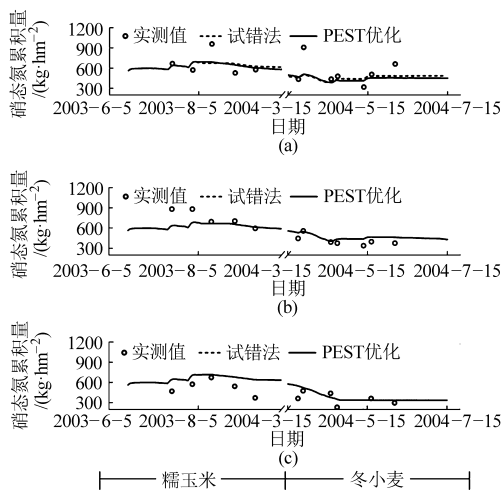


图 3 RZWQM2 模拟 0~100 cm 土壤硝态氮累积量的率定和验证结果

Fig. 3 Results of calibration and validation of RZWQM2 model for its simulations of total soil nitrate nitrogen content in 0~100 cm soil profile

(a) 东处理 (b) 中处理 (c) 西处理

2.2.4 作物生长

由图 4 可见,东处理率定结果中,对糯玉米叶面积指数的模拟,试错法与 PEST 优化的结果差异不大;而对冬小麦叶面积指数变化,试错法模拟的标准差、偏差分别为 2.84、41.85%,PEST 优化模拟的标

准差、偏差分别为 1.97、11.52%,PEST 优化的模拟结果更接近实测值。对中处理和西处理叶面积指数模拟值与实测值的标准差分别为 1.26、1.80,偏差分别为 14.55%、-3.4%。PEST 优化对西处理冬小麦叶面积指数的模拟结果出现过高估计,这可能是因为西处理为低肥处理,实际田间试验中出现的氮素胁迫降低了中叶面积的扩展,而模型模拟的氮素胁迫情况与实际田间情况有一定的差距。尽管东、西处理的叶面积指数模拟误差较大,模型仍能较好地估计作物的产量(图 5)。PEST 对中、西处理的作物产量的相对误差平均值为 -2.94%,最大偏差达 -15.4%,出现在糯玉米西处理,说明模型经 PEST 优化后对西处理糯玉米产量出现偏高估计。这可能是由于本研究中 RZWQM2 模型对喷灌均匀系数变化以实际灌水量代替的简化处理,使模型未能准确反映均匀系数偏低时造成作物减产的影响。

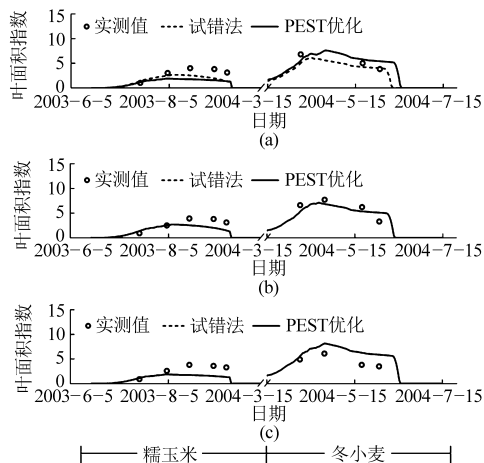


图 4 RZWQM2 模拟糯玉米、冬小麦叶面积指数的率定和验证结果

Fig. 4 Results of calibration and validation of RZWQM2 model for its simulations of leaf area index

for waxy maize and winter wheat

(a) 东处理 (b) 中处理 (c) 西处理

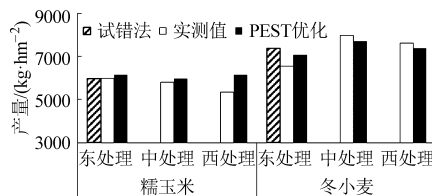


图 5 RZWQM2 模拟糯玉米、冬小麦产量的率定、验证结果

Fig. 5 Results of calibration and validation of RZWQM2 model for its simulations of yields for waxy maize and winter wheat

3 结束语

本研究采用了 PEST 参数自动优化程序,根据

糯玉米-冬小麦田间试验资料,对6个土壤水分运动参数、5个营养参数、6个糯玉米遗传参数和7个冬小麦遗传参数进行了估计,并分析了它们的相对综合敏感性,对比了试错法及PEST对RZWQM2模型模拟结果的影响,并以PEST优化所得的参数结果对模型进行验证。

敏感性分析表明,相比土壤营养模块参数和土壤水力学参数,PEST对作物遗传参数的优化更容易。其中以冬小麦出叶间隔特性参数、冬小麦春化作用敏感特性参数及糯玉米出叶间隔特性参数3个参数相对综合敏感性最大。与试错法相比,PEST优

化算法可以更准确、更省时地对RZWQM2模型的参数进行优化,参数优化后RZWQM2模型在率定及验证过程中,都能较好地模拟糯玉米-冬小麦轮作体系中生育期内土壤水分的动态、土壤贮水量、作物叶面积指数及产量,平均相对误差分别为4.78%、12.64%、16.34%、-2.94%。RZWQM2模型对于0~100 cm以内土壤硝态氮累积量的峰值模拟误差较大。建议采用多次迭代所得的优化结果,以解决由于参数间的相互作用而造成的一个观测组模拟结果的改善而引起另一个观测组模拟效果下降的问题^[16, 31]。

参 考 文 献

- 1 Beven K, Binley A. The future of distributed models: model calibration and uncertainty prediction[J]. *Hydrological Processes*, 1992, 6(3): 279-298.
- 2 Wagener T, Gupta H V. Model identification for hydrological forecasting under uncertainty[J]. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, 2005, 19(6): 378-387.
- 3 Fang Q, Ma L, Yu Q, et al. Irrigation strategies to improve the water use efficiency of wheat-maize double cropping systems in North China Plain[J]. *Agricultural Water Management*, 2010, 97(8): 1165-1174.
- 4 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.
- 5 Ma L, Hoogenboom G, Ahuja L R, et al. Evaluation of the RZWQM-CERES-Maize hybrid model for maize production[J]. *Agricultural Systems*, 2006, 87(3): 274-295.
- 6 Ma L, Trout T J, Ahuja L R, et al. Calibrating RZWQM2 model for maize responses to deficit irrigation[J]. *Agricultural Water Management*, 2012, 103: 140-149.
- 7 Goegebeur M, Pauwels V. Improvement of the PEST parameter estimation algorithm through extended Kalman filtering[J]. *Journal of Hydrology*, 2007, 337(3-4): 436-451.
- 8 Bahremand A, De Smedt F. Predictive analysis and simulation uncertainty of a distributed hydrological model[J]. *Water Resources Management*, 2010, 24(12): 2869-2880.
- 9 董艳辉,李国敏,徐海珍.应用PEST及GIS的北山区域地下水流动模型校正[C]//第二届废物地下处置学术研讨会论文集,2008.
- 10 Al-Abed N, Whiteley H. Calibration of the hydrological simulation program fortran (HSPF) model using automatic calibration and geographical information systems[J]. *Hydrological Processes*, 2002, 16(16): 3169-3188.
- 11 Govender M, Everson C. Modelling streamflow from two small South African experimental catchments using the SWAT model[J]. *Hydrological Processes*, 2005, 19(3): 683-692.
- 12 Wang X, Melesse A. Evaluation of the SWAT model's snowmelt hydrology in a northwestern Minnesota watershed[J]. *Transactions of the ASAE*, 2005, 48(4): 1359-1376.
- 13 Rose K A, Megrey B A, Werner F E, et al. Calibration of the NEMURO nutrient-phytoplankton-zooplankton food web model to a coastal ecosystem: evaluation of an automated calibration approach[J]. *Ecological Modelling*, 2007, 202(1): 38-51.
- 14 Iskra I, Droste R. Application of non-linear automatic optimization techniques for calibration of HSPF[J]. *Water Environment Research*, 2007, 79(6): 647-659.
- 15 Nolan B T, Puckett L J, Ma L, et al. Predicting unsaturated zone nitrogen mass balances in agricultural settings of the United States[J]. *Journal of Environmental Quality*, 2010, 39(3): 1051-1065.
- 16 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 CSAE*, 2012, 28(10): 118-123. (in Chinese)
- 17 朱国威,任理.根系带水质量模型灵敏度分析与标定的研究[J].*灌溉排水学报*,2011,30(2):5-9.
Zhu Guowei, Ren Li. Parameters sensitivity analysis and scaling of RZWQM[J]. *Journal of Irrigation and Drainage*, 2011, 30(2): 5-9. (in Chinese)
- 18 张芊,任理.应用根系层水质模型分析冬小麦-夏玉米轮作体系的农田水氮利用效率 I:模型参数的灵敏度分析与标定[J].*水利学报*,2012,43(1):84-90.
Zhang Qian, Ren Li. Applying application of root zone water quality model to simulate water and nitrogen use efficiency of winter wheat-summer maize double cropping system I. Model calibration and sensitivity analysis[J]. *Journal of Hydraulic Engineering*,

- 2012, 43(1): 84–90. (in Chinese)
- 19 宿梅双. 喷灌均匀系数对土壤水氮淋失及作物生长影响的田间试验研究[D]. 北京: 中国农业大学, 2005.
- 20 Jones J W, Hoogenboom G, Porter C, et al. The DSSAT cropping system model[J]. *European Journal of Agronomy*, 2003, 18(3): 235–265.
- 21 Ahuja L R, Rojas K W, Hanson J D, et al. Root zone water quality model; modelling management effects on water quality and crop production[M]. Highlands Ranch, CO.: Water Resources Publication LLC, 2000.
- 22 Green W H, Ampt G. Studies on soil physics, 1. The flow of air and water through soils[J]. *Journal of Agricultural Science*, 1911, 4(1): 1–24.
- 23 Brooks R H, Corey A T: Hydraulic properties of porous media[M]. Colorado: Colorado State University, 1964: 3–27.
- 24 Richards L A. Capillary conduction of liquids through porous mediums[J]. *Journal of Applied Physics*, 1931, 1(5): 318–333.
- 25 Jones C A, Kiniry J R. CERES-maize: a simulation model of maize growth and development[M]. Texas: Texas A&M University Press, 1986.
- 26 Ritchie J, Otter S. Description and performance of CERES-wheat: a user-oriented wheat yield model[M] // Willis W O. ARS Wheat Yield Project, ARS-38, USDA. Agricu27 Doherty J. PEST-ASP user's manual[M]. Brisbane, Australia; Watermark Numerical Computing, 2004.
- 28 王建梅, 覃文忠. 基于 LM 算法的 BP 神经网络分类器[J]. 武汉大学学报: 信息科学版, 2005, 30(10): 928–931.
Wang Jianmei, Qin Wenzhong. BP neural network classifier based on Levenberg-Marquardt algorithm[J]. *Geomatics and Information Science of Wuhan University*, 2005, 30(10): 928–931. (in Chinese)
- 29 伏燕军, 杨坤涛, 邹文栋, 等. 基于 Levenberg-Marquardt 算法的图像拼接[J]. 激光杂志, 2007, 28(5): 46–48.
Fu Yanjun, Yang Kuntao, Zou Wendong, et al. Image mosaic based on Levenberg-Marquardt algorithm[J]. *Laser Journal*, 2007, 28(5): 46–48. (in Chinese)
- 30 Bahremand A, De Smedt F. Distributed hydrological modeling and sensitivity analysis in Torysa Watershed, Slovakia[J]. *Water Resources Management*, 2008, 22(3): 393–408.
- 31 于利鹏. 华北平原典型种植区农业面源污染风险评价[D]. 北京: 中国农业大学, 2012.

Parameter Optimization and Validation for RZWQM2 Model Using PEST Method

Sun Mei¹ Zhang Xiaolin¹ Feng Shaoyuan² Huo Zailin¹

(1. College for Water Conservancy and Civil Engineering, China Agricultural University, Beijing 100083, China

2. College of Hydraulic Science and Engineering, Yangzhou University, Yangzhou 225009, China)

Abstract: A software for automatic parameter estimation (PEST) was used to estimate 24 parameters in the root zone water quality model (RZWQM2) and analyze the sensitivity of each parameter by controlling the proportion of function values of simulation difference from various observation variables in the objective function, including soil moisture, soil nitrate, leaf area index and yield of crop. The results show that parameters of P_{HW} , P_{IVW} and P_{HM} were the three most influential parameters to the overall simulation performance of the RZWQM2 model when the proportion of simulation difference for each observation variable was closest. In contrast to the trial and error method, RZWQM2 model after calibrated with PEST could accurately simulate the moisture and nitrogen transport in soil profile and crop growth in a rotation system of waxy maize and winter wheat. This study could help estimate RZWQM2 parameters in different agricultural management practices and could also provide a reference for the application of PEST in other models for parameter optimization.

Key words: Rotation system of waxy maize and winter wheat RZWQM2 model PEST Sensitivity analysis Parameter optimization