

李得勤, 张述文, 段云霞, 等. 2013. SCE-UA 算法优化土壤湿度方程中参数的性能研究 [J]. 大气科学, 37 (5): 971–982, doi:10.3878/j.issn.1006-9895.2012.12089. Li Deqin, Zhang Shuwen, Duan Yunxia, et al. 2013. Calibration of parameters in soil moisture equation with shuffled complex evolution algorithm [J]. Chinese Journal of Atmospheric Sciences (in Chinese), 37 (5): 971–982.

# SCE-UA 算法优化土壤湿度方程中参数的性能研究

李得勤<sup>1,2</sup> 张述文<sup>2</sup> 段云霞<sup>3</sup> 崔锦<sup>1</sup>

1 中国气象局沈阳大气环境研究所, 沈阳 110016

2 兰州大学半干旱气候变化教育部重点实验室, 兰州 730000

3 沈阳市气象台, 沈阳 110168

**摘 要** 借助于一维土壤湿度模型, 分别将土壤成份和土壤性质相关参数作为待优化的参数, 通过观测系统模拟试验的方式, 评估 SCE-UA (Shuffled Complex Evolution Algorithm) 优化算法对这些参数的优化效果。结果表明: 优化的效果不仅依赖于参数的取值范围, 还依赖于参数的敏感性, 敏感的参数通过优化算法易得到最优值; 不敏感的参数存在“不敏感区间”, 在“不敏感区间”中易陷入次优, 通过缩小参数优化分布区间和增加优化的次数可以部分提高优化的效果。此外, 模型的超定性也可能导致参数次优值的出现, 而通过恰当地给出参数之间的约束条件和优化判据, 可以提高参数优化的效果。

**关键词** 土壤湿度 参数优化 SCE-UA 模式校准

文章编号 1006-9895(2013)05-0971-12

中图分类号 P404

文献标志码 A

doi:10.3878/j.issn.1006-9895.2012.12089

## Calibration of Parameters in Soil Moisture Equation with Shuffled Complex Evolution Algorithm

LI Deqin<sup>1,2</sup>, ZHANG Shuwen<sup>2</sup>, DUAN Yunxia<sup>3</sup>, and CUI Jin<sup>1</sup>

1 *Institute of Atmospheric Environment, China Meteorological Administration, Shenyang 110016*

2 *Key Laboratory for Semi-Arid Climate Change of the Ministry of Education, Lanzhou University, Lanzhou 730000*

3 *Shenyang Meteorological Service, Shenyang 110168*

**Abstract** In this study, by using an observing system simulation experiment, a shuffled complex evolution algorithm (SCE-UA) is evaluated in terms of the effectiveness and efficiency of calibrating parameters in one-dimensional Richards equation, including soil components and all physical parameters. The result shows that the ability of calibrating parameters with SCE-UA depends on not only the uncertainty ranges of parameters but also their sensitivity degrees. For sensitive parameters, unique optima parameter estimates can be easily obtained. However, for insensitive ones, there exists an “insensitive range”, and only suboptimal parameters are obtained in this range. By increasing training times and reducing the parameters’ range, the performance of parameter calibration in the insensitive range can be improved. Moreover, the overdetermination of the model parameters may result in suboptimal parameter estimates, and a good calibration effectiveness can be archived by appropriately setting parameters and adding constrains and criterions.

**Keywords** Soil moisture, Parameter calibration, SCE-UA, Optimal model

收稿日期 2012-06-10, 2012-10-31 收修定稿

资助项目 国家自然科学基金资助项目 41105064、41075074, 半干旱气候变化教育部重点实验室(兰州大学)开放基金, 公益性行业(气象)科研专项 GYHY201006016

作者简介 李得勤, 男, 1981 年出生, 博士, 主要从事陆面过程、数据同化方法、中尺度数值模拟研究。E-mail: lewen05@hotmail.com

## 1 引言

参数在陆面过程模拟中扮演着重要的角色, 陆面模式模拟的效果不仅取决于模型的物理参数化方案、初始场和驱动数据的质量, 也取决于参数的代表性和准确性(李新等, 2007; 林朝晖等, 2008), 对参数的合理校准可以改进陆面模式的模拟效果(Henderson-Sellers, 1996; Duan et al., 2006; 房云龙等, 2010; 梁晓和戴永久, 2010)。陆面模式中的参数一般分为两种, 一种是具有明确物理涵义的参数, 如地表反照率、植被覆盖度、地形坡度、叶面指数、植被高度等, 这些参数一般不取决于模式中所使用的参数化方案; 而另外一种是所谓的“功能性”参数, 如气孔阻力、空气动力粗糙度、土壤热容、土壤水扩散率和传导率等, 这些参数很难通过直接测量来获得(Gupta et al., 1999; Bastidas et al., 2006)。目前, 陆面模式对具有实际物理意义的参数一般用非均匀区域(网格)内取平均值的办法来估计, 由于不同陆面模式所使用的参数集(土壤和植被)分辨率不同, 加之受到植被和土壤分类方法不同的影响(Gupta et al., 1999), 即使是同一种土壤或植被类型, 具有相同物理意义的参数在不同模式中也存在差异, 所以, 参数的不确定是造成陆面模式模拟不准确的主要来源之一。

参数敏感性分析和优化方法, 可以先确定关键的敏感参数, 然后通过调整或订正这些敏感参数使模拟结果更接近于观测值(Gupta et al., 1999)。早期的参数优化方法通常一次只校正一个参数, 优化过程效率较低, 并且不考虑参数间的内在联系(Bastidas et al., 1999)。多判据方法的出现部分克服了前期参数校正中的困难, 优化方法也可以一次性优化多个参数, 大量优化算法已陆续运用在陆面模式的参数优化工作中(Chen et al., 2009); Bastidas et al. (1999)将多判据广义敏感性分析方法(Multi-Objective Generalized Sensitivity Analysis, 简称 MOGSA)应用在 BATS (Biosphere-Atmosphere Transfer Scheme)模式的参数敏感性分析和优化中, 该方法现为校正陆面模式参数常用方法之一(Demarty et al., 2004; Bastidas et al., 2006); Xia et al. (2005)使用贝叶斯随机反演(Bayesian Stochastic Inversion, 简称 BSI)算法探究模式的复杂度和参数值域对参数估计的影响, 发现模式越复杂改进越明显, 并且模式复杂度对参数校正的影响比参数值域

大; Santanello et al. (2007)使用了被动和主动微波遥感土壤湿度的资料, 借助于参数优化工具 PEST (Parameter ESTimation model)对 Noah 模式中土壤成份参数进行优化, 通过与站点观测的土壤湿度的对比发现, 参数优化后的 Noah 模式明显改进了对土壤湿度的模拟。梁晓和戴永久(2010)使用高斯误差传播原理分析 CoLM (Common Land Model)模式中参数的误差对土壤温度、土壤湿度、植被蒸散量模拟的误差贡献。

随着土壤湿度观测手段的提高, 通过参数优化方法获取具有空间一致性和代表性的土壤参数可能成为现实(李得勤等, 2012), 进而校准陆面模式中的相关数据集和静态参数(Chen et al., 2009; Hogue et al., 2005)。Santanello et al. (2007)认为模式中土壤分类大多没有考虑土壤质地的空间异质性, 经过优化可以得到具有空间“一致性”和明确“物理意义”的土壤参数。Scott et al. (2000)使用 SCE-UA (Shuffled Complex Evolution Algorithm)方法优化了土壤模型参数后发现土壤湿度的模拟得到了提高。Mattikalli et al. (1998)使用遥感反演的表层土壤湿度来识别流域尺度土壤质地和估计土壤水文参数, 指出微波亮温和土壤湿度的时间变化与土壤成份和饱和水传导率之间存在很好的相关性。除上述单独进行参数优化外, 还有的方法是把参数优化和数据同化结合起来提高状态量和参数的估算精度, 如 Tian et al. (2009, 2010)和 Yang et al. (2007)使用双通道同化系统, 第一个通道同化观测资料的同时进行参数优化, 优化后的参数在第二个通道中用来再次同化观测资料; Li and Ren (2011)借助集合卡曼滤波(Ensemble Kalman Filter, 简称 EnKF), 使用理想试验手段验证了 EnKF 在同化土壤水势后, 可以有效地改进土壤模型的参数。

陆面模式中的参数包括植被和土壤相关的参数, 植被参数大多具有季节性变化特征, 而土壤相关参数相对比较稳定。而在大多数针对陆面模式参数的优化工作中, 常使用地表热通量(感热通量、潜热通量、土壤热通量)和土壤湿度对模式中所有参数进行优化, 很少考虑到参数与观测变量之间的相关性。此外, 优化算法虽然已经被用来校正辐射传输模式中的部分参数来提高陆面数据同化系统对土壤湿度的模拟(Tian et al., 2009, 2010; Yang et al., 2007), 但是仍缺乏真正用来校正和分析陆面模型中土壤湿度相关参数的内容。加之由于可

以同化的物理量相对有限, 而陆面模式物理过程的复杂性和参数数量众多使得陆面模式参数优化工作仍然是一件比较复杂的工作。本研究将借助 SCE-UA 方法和观测系统模拟试验的手段, 探究不同土壤参数对土壤湿度求解的影响, 以及使用土壤湿度来优化土壤参数的可行性和不确定性, 进而对分析陆面模式误差来源和将优化算法用于改进陆面模式中土壤相关参数提供一些参考。

## 2 土壤湿度方程求解和 SCE-UA 方法

### 2.1 土壤水分特征曲线和参数

土壤含水量和水势之间关系又叫做土壤水分特征曲线, 不同的土壤类型水分传输过程不同, 土壤水分特征曲线存在明显的差别 (孙菽芬, 2005)。现有的描述土壤水分特征曲线的模型有 Brook-Corey 模型、Clapp-Hornberger 模型、van Genuchten 模型、Campbell 模型、Mualem 模型等。上述模型均为非线性模型, 其中 van Genuchten 模型被认为是当前描述土壤水分特征曲线最理想的模型, 但是由于其高度的非线性, 使得求解过程中离散化比较复杂。相对来说, Clapp-Hornberger 模型的应用则更广泛, 其具体形式为:

$$\theta = \theta_s (\psi_s / \psi)^{1/b}, \quad (1)$$

其中,  $b$  为与土壤类型有关的参数,  $\psi$  和  $\theta$  为土壤水势和含水量,  $\psi_s$  和  $\theta_s$  为饱和水势和饱和含水量。土壤水导率  $K$  为:

$$K = K_s (\theta / \theta_s)^{2b+3}, \quad (2)$$

其中  $K_s$  为饱和土壤水导率。土壤水扩散率  $D$  表示为:

$$D(\theta) = K(\theta)(\partial\psi / \partial\theta). \quad (3)$$

从上面的关系式可以看出, 土壤相关的参数主要有: 饱和含水量  $\theta_s$ 、饱和水势  $\psi_s$ 、 $b$  和饱和土壤水导率  $K_s$ 。

目前, 陆面模式对上述土壤参数 ( $b$ ,  $\theta_s$ ,  $\psi_s$ ,  $K_s$ ) 的给出一般采用以下两种方式: 一种是通过土壤成份间接求出, 如 CLM (Community Land Model) 模式中主要采用这种方法 (Oleson et al., 2004, 2010)。另一种方式直接指定每种土壤类型对应的土壤性质参数 (如  $b$ ,  $\theta_s$ ,  $\psi_s$ ,  $K_s$ ), 目前大多数陆面模式中的土壤参数以这种方式给出。土壤类型一般分表层和深层两种类型, 也有整层土壤采用同种土壤类型。但是受地形数据来源和分辨率的不同, 即使同一种土壤类型, 同一土壤参数在不同陆

面模式中也会出现取值不同现象。

### 2.2 土壤湿度方程和求解方法

现有陆面模式中对土壤湿度运动过程大多采用一维 Richards 方程来描述, 可以写为土壤含水量、土壤水势, 以及二者混合形式的三种形式。以土壤含水量为例, 土壤湿度方程可表示为:

$$\partial\theta / \partial t = \partial [D(\partial\theta / \partial z)] / \partial z + \partial K / \partial z, \quad (4)$$

其中,  $t$  为时间,  $z$  为垂直坐标。

土壤湿度方程是一个高度的非线性方程, 在一般初始和边界条件下很难得到解析解, 所以常寻求数值解 (Shao and Irannejad, 1999; Xie et al., 1999)。不同陆面模式对其进行离散化的方法不尽相同, CLM 模式使用增量法 (Oleson et al., 2004) 求解, 澳大利亚联邦科学与工业研究会 (Commonwealth Scientific and Industrial Research Organization, 简称 CSIRO) 的 CABLE (CSIRO Atmosphere Biosphere Land Exchange) 陆面模式用分裂算法 (Kowalczyk et al., 2006) 求解, 中尺度天气研究与预报 (Weather Research and Forecasting, WRF) 模式所采用的 Noah 陆面模式为全隐式差分格式 (Chen and Dudhia, 2001)。ECMWF (European Center for Medium range Weather Forecasting) 中采用了半隐式的方法求解 (Viterbo and Beljaars, 1995), 张述文等 (2009, 2010) 对不同的离散化方法求解土壤湿度方程的差别进行了对比。

这里采用和 Noah 陆面模式中相同的全隐式的离散化方法, 使用追赶法对一维 Richards 方程进行求解, 下边界条件采用静力平衡条件, 详细的离散化过程见 Chen and Dudhia (2001) 和张述文等 (2010)。

### 2.3 SCE-UA 方法

SCE-UA 方法使用种群竞争演变 (Competitive Complex Evolution, 简称 CCE) 算法 (Duan et al., 1992), 将取样样本分为若干个种群分区, 每一分区取样相互无关并各自搜索最优, 但是种群之间可以相互传递搜索得到的信息来更新搜索的分区样本, 使得所有的参数同时整体达到最优。大量的研究证实该方法可以同时优化模型中的若干个参数, 成为参数优化的一种有效方法 (Duan et al., 1992; Scott et al., 2000; Liu et al., 2005)。

在 SCE-UA 方法的具体使用中, 根据待优化模型的复杂程度和参数的个数, 需要设置控制概率和一些优化问题相关的参数。也可根据待优化参数的

个数,其他参数采用默认设置:  $m=(2n+1)$ ;  $q=(n+1)$ ;  $y=1$ ;  $Z=(2n+1)$ , 其中,  $n$  为参数的个数,  $m$  为种群中的样本数,  $q$  为子种群中的样本数,  $y$  为每个子种群产生后代的个数,  $Z$  为每个种群和参数演变的次数。关于 SCE-UA 使用中的具体步骤可以详细的参考 Duan et al. (1992) 文献。此外, 在使用 SCE-UA 算法的过程中, 还需要提到以下两个概念:

(1) 目标函数: 目标函数用来评价实际观测与模型模拟值之间的吻合度, 不同的目标函数用来评价模型的不同特征, 所以目标函数的选择也非常重要, Gupta et al. (1999) 列出的用于参数优化的目标函数接近 10 个, 在这里我们采用使用较多的土壤含水量的均方根偏差来定义目标函数  $F$ :

$$F(\theta) = \left[ \frac{1}{NI} \sum_{k=1}^N \sum_{i=1}^I (\theta_i^k - \theta_0^k)^2 \right]^{1/2}, \quad (5)$$

其中,  $I$  为总的土壤层数,  $N$  为总的积分次数,  $\theta_i^k$  为第  $i$  层、第  $k$  个积分时次土壤含水量的模拟值,  $\theta_0^k$  为在第  $k$  个积分时次的土壤含水量的“真值”(在实际模型参数优化过程中一般取观测值)。

(2) 迭代停止判据: 迭代停止判据被用来决定迭代过程是否终止, 满足如下三个条件之一:

1) 在连续的 5 次迭代中, 目标函数值的改进程度已经不能达到 0.01%, 认为参数已经收敛到一个很小且平滑区域上。

2) 搜寻算法已经不能通过合理的改变参数来使得目标函数值进一步减小。

3) 考虑到计算时间, 当迭代次数达到超出预先设置的次数以后, 迭代停止。在实际问题中, 按照模型的复杂程度, 迭代次数一般给出一个较大的值, 一般情况下在达到最大值前, 优化过程已经结束, 所以, 当迭代次数越多, 也就意味着参数已接近最优了, 即基本满足条件 1), 详细的介绍参考 Duan et al. (1992)。

### 3 试验设计

土壤湿度方程的求解需要给出初始和边界条件, 本研究采用和张述文等 (2009) 验证土壤湿度方程求解方法时所使用相同的初始和边界条件, 考虑深度为 3 m 的土壤层, 将其划分为 11 层, 表 1 给出了土壤层信息和求解过程中需要的初始和边界条件信息, 这里没有对所有的土壤类型一一验证, 而只选取了比较典型的壤土 (loam) 土壤类型作为参考。

表 1 土壤层信息、初始条件和边界条件

参数名	参数设置
土壤类型	壤土 (loam)
土壤分层厚度	0.01, 0.03, 0.09, 0.18, 0.3, 0.48, 0.75, 1.05, 1.47, 2.13, 3.0 m
上边界条件 (蒸发)	0.5 cm/d
下边界条件	静力平衡
初始条件	0.3 cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup>

在 2.1 节中给出了土壤湿度方程求解中需要的参数, 以及陆面模式中参数的确定方法, 根据土壤参数的确定方法, 这里待优化模型参数和对应“真值”的给出也分为两种情况: ①以土壤成份的形式: 将土壤中粘粒的百分比 ( $P_{\text{clay}}$ )、粉粒的百分比 ( $P_{\text{silt}}$ ) 和沙粒的百分比 ( $P_{\text{sand}}$ ) 作为待优化的参数, 相关参数根据百分比求得 (Oleson et al., 2004, 2010), 由于在土壤质地三角图中每一种土壤类型对应的成份存在一定分布区间, 这里随机选取壤土土壤区间中某一固定点对应的土壤成份百分比作为“真值”; ②以参数的形式给出: 包括土壤性质相关的参数  $b$ ,  $\theta_s$ ,  $\psi_s$ ,  $K_s$ , 直接根据 Noah 模式中壤土土壤对应的参数值作为“真值”。在具体优化过程中, 不同参数的分区区间见表 2, 这里没有将土壤层深度和初始条件作为待优化的参数, 具体参数的给出和优化过程见第 4 节。

表 2 土壤参数分布区间

参数	最小值	最大值
$P_{\text{clay}}$	0	100
$P_{\text{silt}}$	0	100
$b$	2.0	10.0
$\theta_s$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> )	0.1	0.6
$\psi_s$ (cm)	-750.0	-30.0
$K_s$ (cm/s)	0.00001	0.01

根据理想实验的设置方法, 根据上面提到的参数“真值”的确定方法, 将土壤湿度方程在蒸发的上边界条件下求解, 时间步长为 300 s, 总共积分 20 d, 计算得到“真实”的土壤湿度廓线。而在优化过程中, 根据各个参数可能的分布区间, 给出初始值, 在整个区间中寻找参数的最优设置, SCE-UA 方法可以同时优化若干个参数。

## 4 结果分析和讨论

4.1 将土壤成份 ( $P_{\text{clay}}$ ,  $P_{\text{silt}}$ ,  $P_{\text{sand}}$ ) 作为待优化参数  
联合国粮食和农业组织 (Food and Agriculture

Organization, 简称 FAO) 和美国国家土壤地理 (State Soil Geographic, 简称 STATSGO) 根据土壤中沙粒 (sand), 粘粒 (clay) 和粉粒 (silt) 物质含量的不同, 将土壤分为 12 种类型, 每一种土壤的成份均固定。而根据美国农业部 (United States Department of Agriculture, 简称 USDA) 建立的土壤分类标准, 土壤类型同样分为 12 种, 而每一种土壤成份则规定在一定的区间上, 12 种土壤类型最终可以在土壤质地三角图中表示出来。

为了验证 SCE-UA 算法在土壤湿度求解中对参数优化的效果, 根据 FAO 和 STATSGO 中土壤分类标准, 壤土的成份组成为  $P_{\text{clay}}=18\%$ ,  $P_{\text{silt}}=39\%$ ,  $P_{\text{sand}}=43\%$ , 假设整个土壤柱的成份不随深度变化, 则在优化过程中只有两个参数 ( $P_{\text{clay}}$  和  $P_{\text{silt}}$ ,  $P_{\text{sand}}=1-P_{\text{clay}}-P_{\text{silt}}$ )。根据土壤湿度方程的求解, 结合初始条件和边界条件可以得到土壤湿度廓线, 将此作为土壤湿度的“真实”廓线。在优化过程中,  $P_{\text{clay}}$  和  $P_{\text{silt}}$  的分布区间均在  $0\sim 100\%$  之间 (表 1), 使用 SCE-UA 方法在整个区间上寻找粘粒和粉粒的百分比。

图 1 是经 SCE-UA 优化 100 次后  $P_{\text{clay}}$  和  $P_{\text{silt}}$  分

别与目标函数值和迭代次数的点聚图, 这里只给出了每次迭代中最优的种群样本参数分布。优化中参数满足  $P_{\text{clay}}+P_{\text{silt}}\leq 100\%$ , 所以设置了当不满足该条件时, 目标函数值取 1.0。首先, 从参数的分布和目标函数值间的关系来看, 土壤湿度对  $P_{\text{clay}}$  很敏感, 随着优化的进行, 迅速地将参数  $P_{\text{clay}}$  的区间缩小, 达到  $0\sim 40\%$ , 而粉粒则没有粘粒敏感, 但是随着优化的进行, 主要分布范围为  $0\sim 90\%$ 。其次, 图中看出迭代次数可以作为参数优化程度的一个判断标准, 当迭代次数越多, 参数的收敛范围越小, 即更接近于“真值” (黑实线)。

为了定量地衡量优化后参数相对于“真值”的靠近程度, 这里引进了参数偏差绝对百分比 ( $E$ ), 即优化后参数与“真值”的误差相对于“真值”的绝对百分比, 具体定义如下:

$$E = \frac{|x_e - x_{\text{true}}|}{|x_{\text{true}}|}, \quad (6)$$

式中,  $x_e$  为优化后得到的参数值,  $x_{\text{true}}$  为参数的“真值”。

$P_{\text{clay}}$  和  $P_{\text{silt}}$  作为待优化的参数, 当迭代次数达到 272 次后, 得到的参数估计值分别为  $P_{\text{clay}}=17.9629\%$  和  $P_{\text{silt}}=39.1074\%$ , 目标函数值为 0.0018。

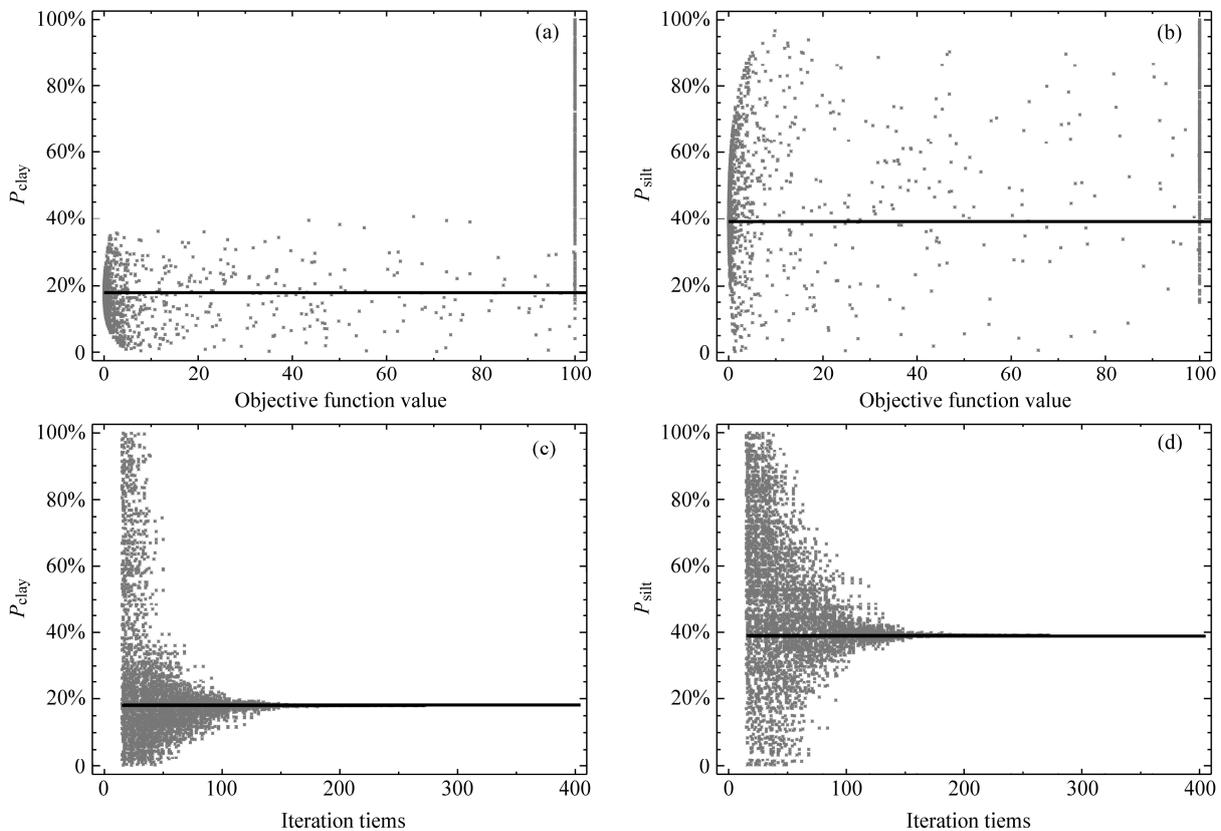


图 1 参数 ( $P_{\text{clay}}$  和  $P_{\text{silt}}$ ) 与 (a, b) 目标函数值和 (c, d) 迭代次数的点聚图, 黑色直线为“真值”

Fig. 1 The scatter diagrams of parameters  $P_{\text{clay}}$  and  $P_{\text{silt}}$  vs. (a, b) the objective function value and (c, d) iteration times, black straight line is “true”

根据式 6 得到参数  $P_{\text{clay}}$  和  $P_{\text{silt}}$  的偏差绝对百分比依次为 0.21% 和 0.28%。所以, 将土壤成份作为待优化的参数时, 借助于土壤含水量, SCE-UA 方法很容易使得参数达到最优, 优化效果非常明显。

根据 FAO 和 STATSGO 的全球土壤成份数据集, 认为表层土壤 (30 cm 以内) 和深层土壤 (30 cm 以下) 成份不同。在这里分别使用  $P_{\text{clay}}^{\text{upper}}$  和  $P_{\text{clay}}^{\text{below}}$  表示土壤成份在 0~31 cm 和 31~300 cm 的粘粒百分比, 与之类似, 沙粒和粉粒采用同样的表达方法。根据土壤质地三角图, 在壤土的区间内随机选取两点, 其成份为  $P_{\text{clay}}^{\text{upper}}=18\%$ ,  $P_{\text{clay}}^{\text{below}}=25\%$ ,  $P_{\text{silt}}^{\text{upper}}=39\%$ ,  $P_{\text{silt}}^{\text{below}}=45\%$ ,  $P_{\text{sand}}^{\text{upper}}=43\%$  和  $P_{\text{sand}}^{\text{below}}=30\%$ 。所以, 选取待优化的参数为 4 个:  $P_{\text{clay}}^{\text{upper}}$ ,  $P_{\text{clay}}^{\text{below}}$ ,  $P_{\text{silt}}^{\text{upper}}$  和  $P_{\text{silt}}^{\text{below}}$ 。在优化过程中, 同样设置当  $P_{\text{clay}}^{\text{upper}} + P_{\text{clay}}^{\text{below}} \geq 100\%$  或  $P_{\text{silt}}^{\text{upper}} + P_{\text{silt}}^{\text{below}} \geq 100\%$  时, 目标函数值为 1.0。图 2 给出了 SCE-UA 优化以后, 总的优化次数为 100 次, 四个参数的分布与目标函数值和迭代次数的分布特征。可以看到类似于直接将  $P_{\text{clay}}$  和  $P_{\text{silt}}$  作为待优化的参数, 使用 SCE-UA 优化后的参数非常接近于“真值”, 当迭代次数达到 727 次后,  $P_{\text{clay}}^{\text{upper}}$ ,  $P_{\text{clay}}^{\text{below}}$ ,  $P_{\text{silt}}^{\text{upper}}$  和  $P_{\text{silt}}^{\text{below}}$  的优化结果为 17.5476%, 24.9736%, 40.8750% 和 45.0584%, 目标函数值为 0.001828, 根据式 (6) 得到优化后  $P_{\text{clay}}^{\text{upper}}$ ,  $P_{\text{clay}}^{\text{below}}$ ,  $P_{\text{silt}}^{\text{upper}}$  和  $P_{\text{silt}}^{\text{below}}$  的偏差绝对百分比依次为 2.51%, 4.81%, 0.11% 和 0.13%。可以看出, 参数增多后, 保持相同的优化次数的前提下, 优化后参数的误差略有增大, 但优化效果依然较好。

综合上面的结果可以看出, 当将土壤成份作为待优化的参数时, 由于参数分布区间比较相近, 使用土壤湿度作为判据, 可以得到参数的最优值, 且参数增多的情况下, 优化效果仍然较好, 优化后参数的偏差百分比普遍在 5% 以下, 结果说明 SCE-UA 方法能够达到优化参数的目的。同时可以看出 SCE-UA 也可以作为参数敏感性判断的方法, 土壤参数粘粒较粉粒更为敏感, 收敛速度更快。

#### 4.2 将 $b$ , $\theta_s$ , $\psi_s$ , $K_s$ 作为待优化参数

相对于不同于使用土壤成份计算相关参数的方法, 一些陆面模型中则是借助于静态参数集来给出不同土壤类型的相关参数。现有的大量关于优化陆面模型参数的工作也大都对土壤相关的四个变量进行了优化, 但优化过程中不考虑观测物理量 (感热通量, 潜热通量或土壤湿度) 与这些参数之间的关系, 而使用所有的观测物理量对模型中几乎

所有的参数同时进行优化。由于土壤相关参数对土壤湿度廓线的模拟影响较大, 与已往工作不同, 本文就使用土壤湿度廓线观测对描述土壤性质的四个参数 ( $b$ ,  $\theta_s$ ,  $\psi_s$  和  $K_s$ ) 进行优化, 考察 SCE-UA 对参数订正的效果和准确度。

土壤含水量“真值”同样用 loam 对应的参数设置模拟得到 ( $b=5.25$ ,  $\theta_s=0.439 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ ,  $\psi_s=-355.0 \text{ cm}$ ,  $K_s=0.000338 \text{ cm/s}$ ), 初始和边界条件见表 1, 时间步长同样选取 300 s, 共积分 20 d。

表 2 给出参数  $b$ ,  $\theta_s$ ,  $\psi_s$  和  $K_s$  的范围, 可以看出四个参数值的分布区间差异较大, 尤其是土壤水传导率  $K_s$  的分布区间跨度较大, 最小值和最大值相差 3 个量级, 且其值本身较小, 由于其直接控制着土壤中水分的传导和扩散过程, 不同土壤类型对应的土壤水传导率  $K_s$  的差别较大 (根据 USGS 的参数集, 如沙壤土 (loamy sand) 和粘土 (clay) 的水传导率相差两个量级, 所以对该参数的优化难度较大, 当同时对所有的参数进行优化时, 对其他参数能否达到最优的影响究竟如何也需要进一步验证。

在 4.1 节中土壤成份作为参数时, 经过优化 100 次以后参数基本接近“真值”, 而在这里优化 100 次后, 优化效果并不明显, 因此将优化次数增加到 300 次。同时, 从图 1 和图 2 可以发现, 参数的最优值更容易从迭代次数上明显地看出, 因此在图 3 中给出了参数  $b$ ,  $\theta_s$ ,  $\psi_s$  和  $K_s$  与迭代次数的分布图。可以看出, 与对土壤成份优化结果不同, 只有参数  $b$  能快速并最终与“真值”吻合, 其他个参数则出现多个次优点, 最终结果也并不能和“真值”完全一致。

当总的优化次数为 300 次时, 迭代次数超出 500 次的次优点出现了 9 个, 只选择迭代次数多且保证目标函数值最小的次优点作为最终优化的结果。当迭代次数为 830 次以后, 目标函数值达到 0.000003, 而当迭代次数为 749 次以后, 目标函数值达到 0.000002, 所以, 将后者的参数作为最终结果。最终, 优化得到  $b$ ,  $\theta_s$ ,  $\psi_s$  和  $K_s$  的值分别为 5.2499, 0.4166, -467.2969 和 0.000167, 对应的偏差绝对百分比为 0, 5.1%, 31.63% 和 50.59%。可以看出, 当参数的不确定分布区间较大时, 优化以后的结果略差, 并且不同的参数优化效果不同。

SCE-UA 也可以对参数进行敏感性分析: 当参数敏感时容易得到该参数的最优值, 而参数不敏感时, 则易陷入次优值, 难找到最优值。Bastidas et al.

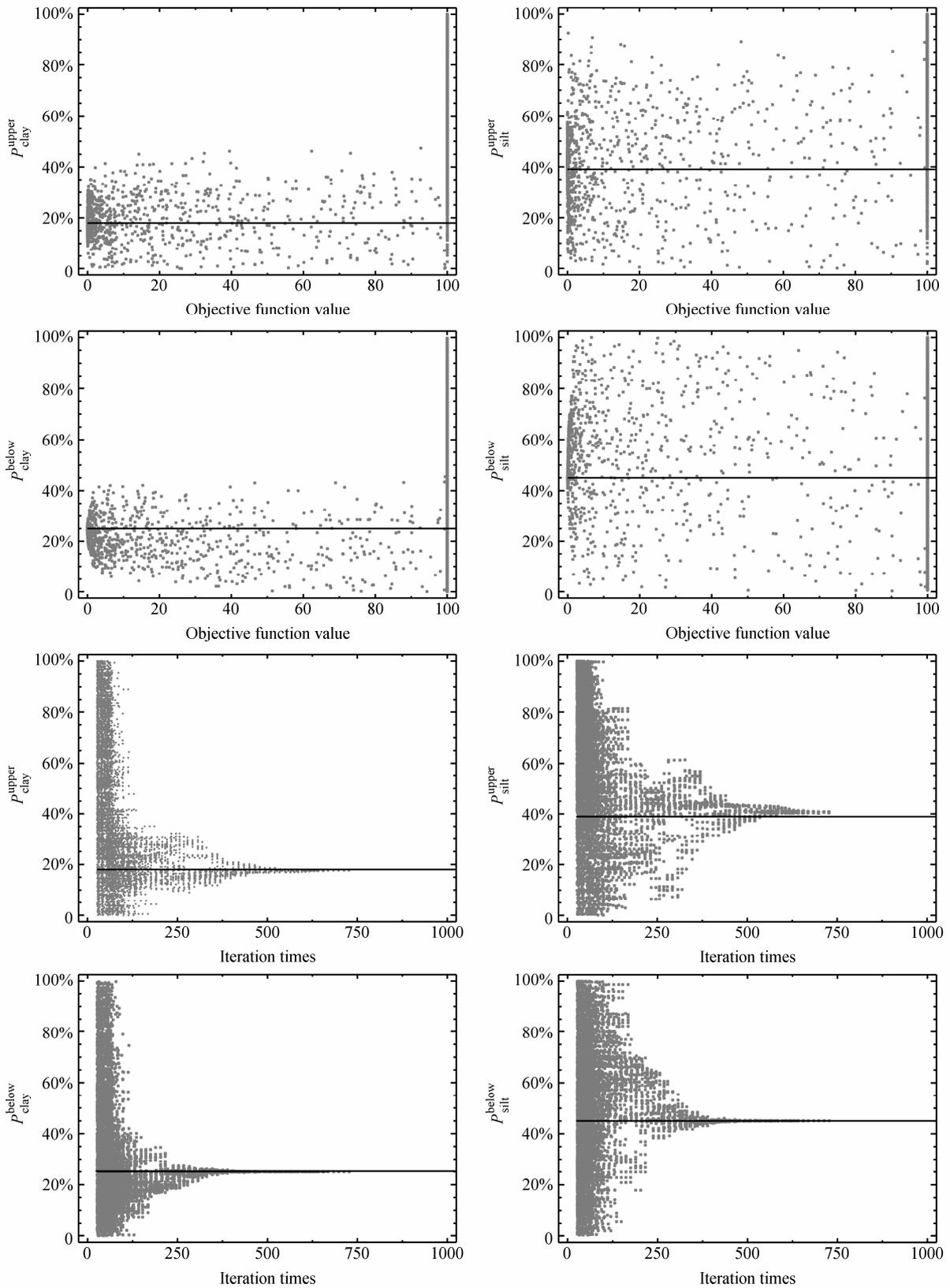


图2 参数 ( $p_{clay}^{upper}$ ,  $p_{silt}^{upper}$ ,  $p_{clay}^{below}$  和  $p_{silt}^{below}$ ) 与目标函数值 (上) 和迭代次数 (下) 的点聚图, 黑色直线为“真值”

Fig. 2 The scatter diagrams of parameters  $p_{clay}^{upper}$ ,  $p_{silt}^{upper}$ ,  $p_{clay}^{below}$ , and  $p_{silt}^{below}$  vs. the objective function value (top) and iteration times (bottom), black straight line is “true”

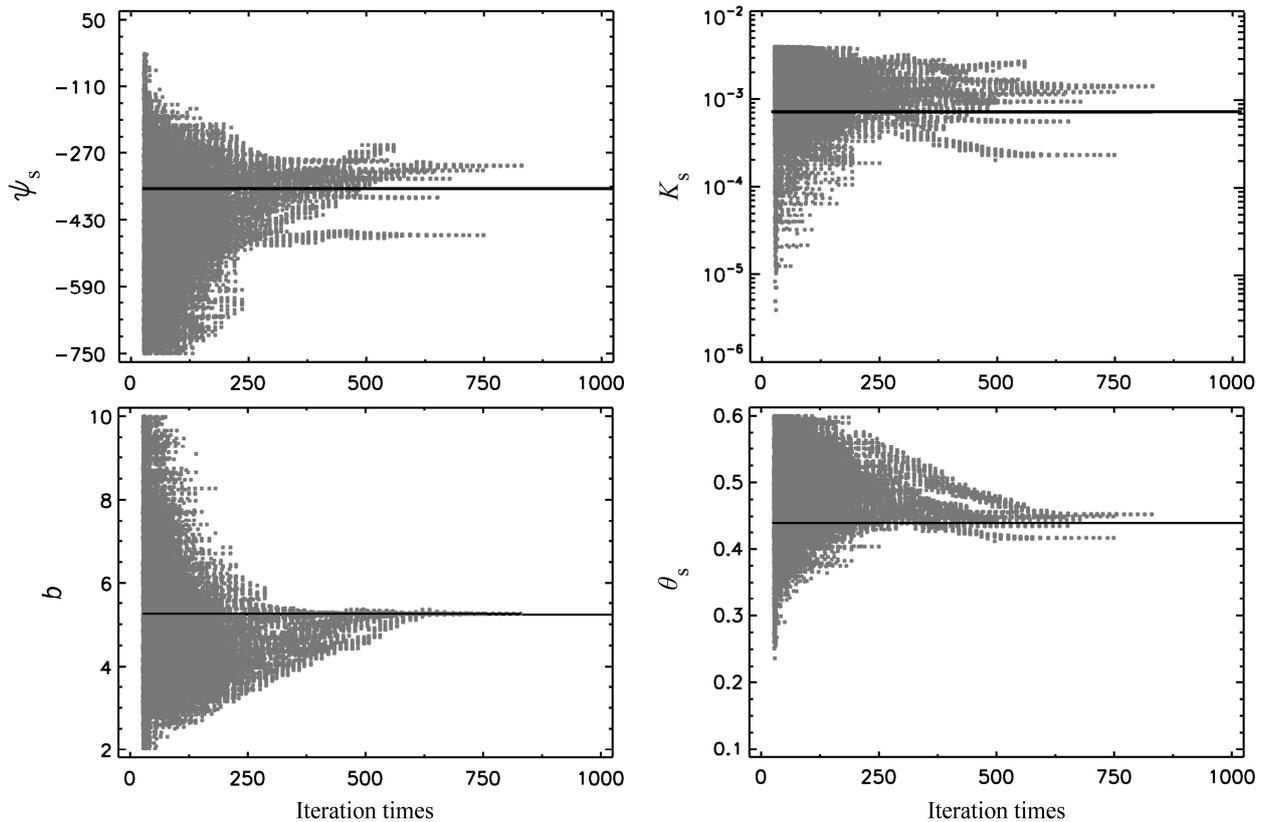


图3 参数  $b$ ,  $\theta_s$ ,  $\psi_s$  和  $K_s$  与迭代次数的点聚图, 黑色直线为“真值”  
Fig. 3 The scatter diagrams of parameters  $b$ ,  $\theta_s$ ,  $\psi_s$ , and  $K_s$  vs. iteration times, black straight line is “true”

(2006) 和 Roundy (2009) 分别使用不同站点观测资料 and 不同参数优化算法对 Noah 模式中不同参数的敏感性进行了检验, 检验结果发现四个参数敏感性的次序依次为  $K_s > b > \theta_s > \psi_s$ 。而在本文试验中, 由于  $K_s$  的取值范围较大, 取值比较小, 达到“真值”比较困难, 而  $b$  易得到最优值, 从四个参数偏差绝对百分比上来看, 参数敏感性的顺序依次为  $b > \theta_s > \psi_s > K_s$ , 这和 Roundy (2009) 的结果不完全相同。 $\theta_s$ ,  $\psi_s$ ,  $K_s$  三个参数具有一个明显的“敏感区间”, 如果将迭代次数和目标函数值依然作为敏感区间的判据依据, 则 loam 土壤  $\theta_s$  的敏感区间为  $[0.4166, 0.4569]$ ,  $\psi_s$  的敏感区间为  $[-467.2969, -287.7977]$ ,  $K_s$  的敏感区间为  $[0.000167, 0.000580]$ 。值得注意的是, 参数的优化不仅得到了参数的敏感性区间, 同时得到了参数的组合信息, 只有合适的组合才能得到最小的目标函数值 (详见 4.3 节)。

为了验证参数的优化区间对优化效果的影响, 缩小参数优化区间, 将四个参数  $b$ ,  $\theta_s$ ,  $\psi_s$  和  $K_s$  优化的区间依次定义为  $[4.0, 7.0]$ ,  $[0.4, 0.5]$ ,  $[-500, -200]$  和  $[0.0001, 0.001]$ , 优化次数同样选取了 300

次。迭代次数超过 500 次的次优点共出现 29 个, 且目标函数值均为 0.000002。图 4 给出四个参数的最优值对应的迭代次数, 类似于图 3, 只有参数  $b$  能达到最优并接近于真值, 而其它三个参数则出现更多的次优点。和上面的试验一样, 选取迭代次数最多的点作为最终优化结果, 迭代次数最多达到 735 次, 优化后的参数  $b$ ,  $\theta_s$ ,  $\psi_s$  和  $K_s$  值分别为 5.2500, 0.4324, -384.3251 和 0.000276, 偏差绝对百分比依次为 0, 1.5%, 8.26% 和 18.34%。所以, 通过缩小参数的搜索区域, 可以在一定程度上提高参数优化的程度。

为了看出次优点与真实土壤含水量廓线的差别, 图 5 分别给出用次优点参数和“真值”进行模拟得出的第一天 (黑色)、第 10 天 (红色) 和第 20 天 (蓝色) 土壤含水量廓线, 作为对比也给出由未订正参数模拟得出的廓线。可以看出, 虽然次优点的参数值和“真值”存在一定的差别, 但是计算得到的土壤含水量廓线和使用“真值”的土壤含水量廓线基本吻合。这说明基于土壤含水量的均方根误差来定义目标泛函 (5) 式很难在众多的次优点

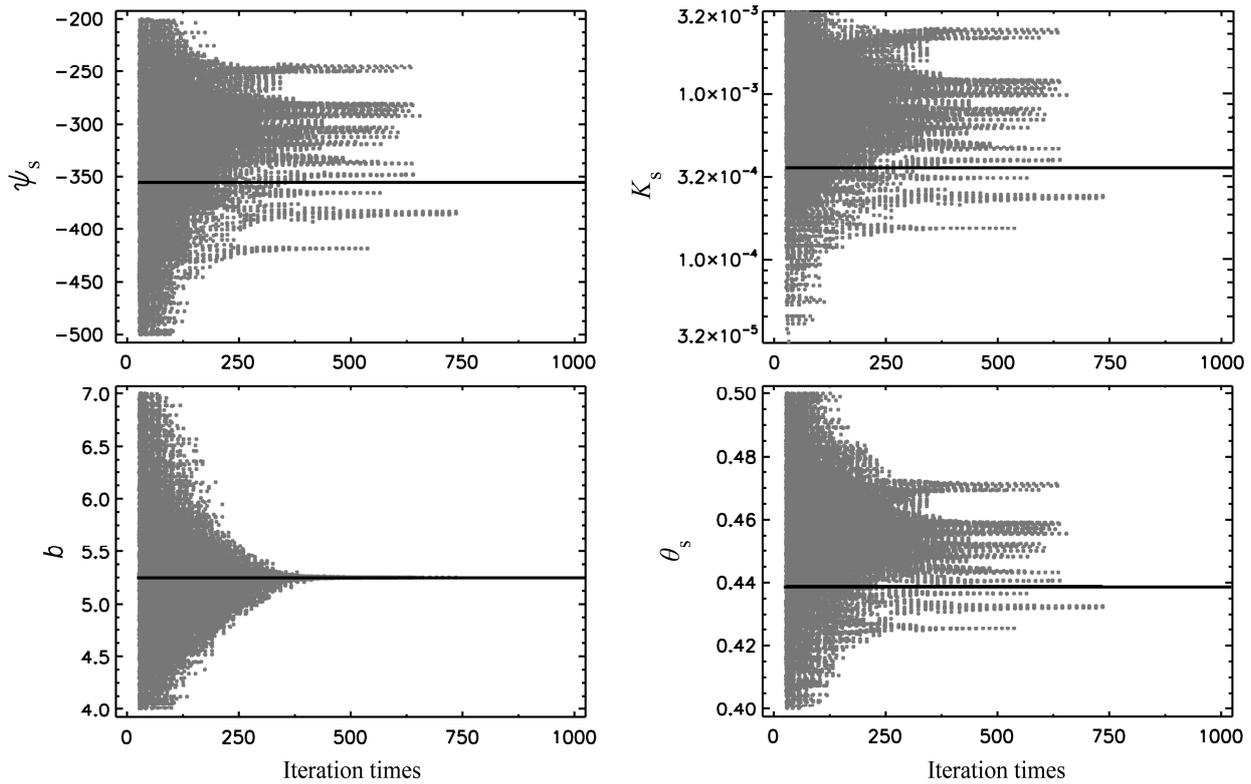


图4 同图3, 但缩小了参数范围

Fig. 4 Same as Fig. 3, but with reduced parameter ranges

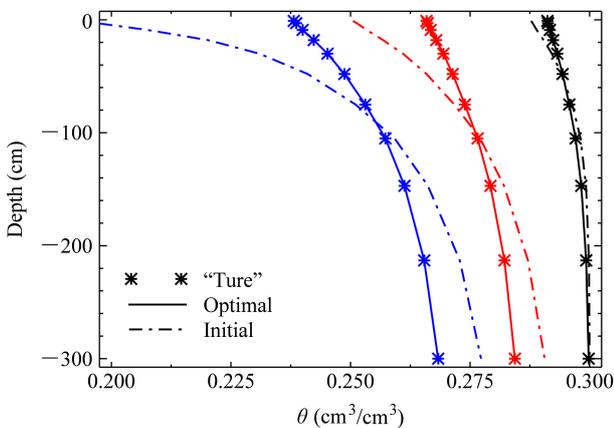


图5 分别使用参数“真值”、优化参数和初始参数设置模拟的第1天(黑色)、第10天(红色)和第20天(蓝色)土壤含水量廓线

Fig. 5 Soil moisture profiles simulated respectively with the inputs of true parameters, optimal parameters, and priori parameters with no calibration on the first day (black), tenth day (red), twentieth day (blue)

中准确找到参数的“真值”, 隐含着问题的超定性, 需要添加其他附加约束条件。

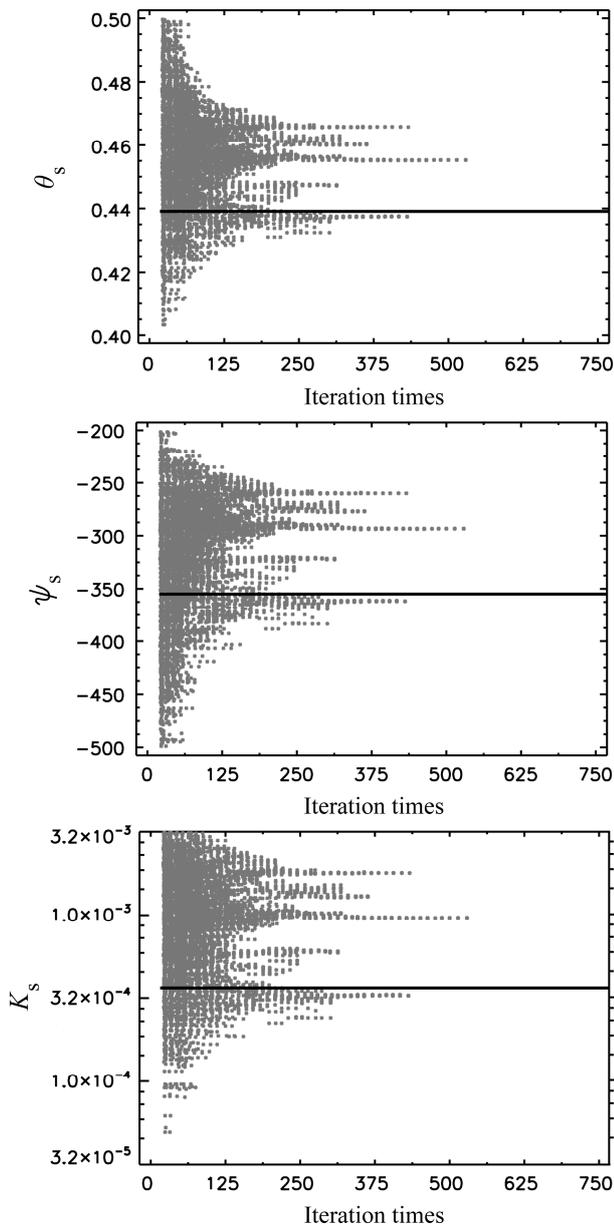
从上面结果看出, SCE-UA 方法可以用于对土壤湿度模型中的参数优化和参数敏感性检验, 优化程度依赖于模型、待优化参数的性质和优化次数。当待优化参数分布区间较大且不敏感时, 很难搜索

到参数的“真值”。通过增加优化次数在一定程度上改善了优化的效果。总体而言, 参数优化算法对土壤参数的优化效果较明显。

#### 4.3 参数个数和参数组合对参数优化的影响

从4.2节中的优化结果来看, 同时对  $b$ ,  $\theta_s$ ,  $\psi_s$  和  $K_s$  四个参数优化时, 部分参数无法完全与“真值”吻合, 出现超定情况。考虑到优化参数的个数和参数之间的相关性对优化效果的影响, 这里通过减少优化参数的个数和使用不同的参数组合来对模型参数进行优化。试验发现: 在  $b$ ,  $\theta_s$ ,  $\psi_s$  和  $K_s$  四个参数中, 选取其中三个组合进行优化, 只要每个组合包含  $b$  均能收敛到“真值”(图略); 当把参数个数进一步减少到2个后, 不论何种参数组合, 优化效果均较好(图略)。

从4.2节结果中可知  $b$  是一个较敏感的参数, 在不同的试验中优化效果均较好。在下面优化试验不包含  $b$ , 只选  $\theta_s$ ,  $\psi_s$  和  $K_s$  作为待优化参数, 试验结果见图6。迭代超过300次的次优点竟出现19个, 其中有9个次优点目标函数值达到最小。按照上面确定最优点的判断方法, 最大迭代次数529且目标函数值最小时, 参数  $\theta_s$ ,  $\psi_s$  和  $K_s$  的值分别为0.4552, -293.3358和0.000552, 对应的偏差绝对

图6 同图4, 但是不包括参数  $b$ Fig. 6 Same as Fig.4, but not including  $b$ 

百分比依次为 3.69%, 17.37%和 63.31%。对比发现上述结果类似于 4.2 节中将  $b$ ,  $\theta_s$ ,  $\psi_s$  和  $K_s$  同时作为待优化参数的试验, 并且优化参数后对应的土壤含水量廓线和“真实”廓线吻合得很好(图略), 这也与 4.2 节中结果类似。同时发现迭代次数为 431 次的次优点更接近于真值,  $\theta_s$ ,  $\psi_s$  和  $K_s$  取值分别为 0.4374, -362.0123 和 0.000321, 对应的偏差绝对百分比依次为 0.36%, 1.98%和 5.03%。以上结果说明, 随意减少参数个数不一定提高参数的优化结果, 同时说明最优点的最终选择还与参数敏感性和最优判据有关。

## 5 结论和讨论

陆面模式中包含大量土壤和植被性质的参数, 参数的不确定性是陆面模式误差的主要来源之一。地表通量(感热通量和潜热通量)和土壤湿度被广泛用来对模式参数进行敏感性分析和校准。本文使用参数优化算法 SCE-UA 结合一维土壤湿度方程的求解来检验参数优化算法对土壤湿度方程中相关参数的优化效果, 初步得到以下结论:

(1) 类似于 CLM 模式中, 土壤湿度方程相关的参数可以通过土壤成份计算得到, 当将土壤成份作为模式待优化的参数时, SCE-UA 算法的优化效果很好, 并且土壤分层增多时参数个数增多对优化效果的影响并不大。

(2) 当把土壤湿度方程中参数直接作为待优化参数时, 由于不同参数的分布区间差别较大, 特别是水导率  $K_s$  的值比较小, 且分布区间跨度较大, 使用 SCE-UA 方法优化以后, 除  $b$  外其余参数均存在次优点, 优化过程无法与“真值”吻合, 但可通过缩小参数分布范围提高优化效果。

(3) SCE-UA 算法也可以作为参数敏感性分析的工具, 对于较敏感的参数, 较容易找到最接近“真值”的最优点。而对于不敏感的参数和分布区间跨度较大的参数容易陷入局部最优。但是从土壤含水量廓线上难于分辨, 说明问题可能存在超定性。

(4) 最后, 考察减少参数个数和改变参数组合对参数优化的影响, 发现随意减少参数个数不一定提高优化效果, 参数组合反应了不同参数之间某种内在联系, 通过减少不敏感参数个数以及合理的参数设置可以提高参数优化的效果。

本研究用观测系统模拟试验手段, 目的是消除未知的模式误差来源, 达到对 SCE-UA 算法公正合理评价的目的。实际陆面模型参数个数可能更多, 具体的判据也可能不止一个, 也会涉及到不同判据的归一化问题, 不确定来源较多, 难于分辨和量化, 更需要更多高质量的观测数据, 所有这些都值得进一步研究。

**致谢** 感谢北京师范大学全球变化与地球系统科学研究院段青云教授提供 SCE-UA 方法代码。感谢两位审稿专家提出的宝贵意见。

## 参考文献 (References)

Bastidas L A, Gupta H V, Sorooshian S, et al. 1999. Sensitivity analysis of a land surface scheme using multicriteria methods [J]. J. Geophys. Res.,

- 104 (D16): 19481–19490.
- Bastidas L A, Hogue T S, Sorooshian S, et al. 2006. Parameter sensitivity analysis for different complexity land surface models using multicriteria methods [J]. *J. Geophys. Res.*, 111: D20101.
- Chen F, Dudhia J. 2001. Coupling an advanced land surface–hydrology model with the Penn State–NCAR MM5 Modeling System [J]. *Mon. Wea. Rev.*, 129 (4): 569–585.
- Chen Wen, Zhu Deqin, Liu Huizhi, et al. 2009. Land-air interaction over arid/semi-arid areas in China and its impact on the East Asian summer monsoon. Part I: Calibration of the land surface model (BATS) using multicriteria methods [J]. *Advances in Atmospheric Sciences*, 26 (6): 1088–1098.
- Demarty J, Otlé C, Braud I, et al. 2004. Using a multiobjective approach to retrieve information on surface properties used in a SVAT model [J]. *J. Hydrol.*, 287 (1–4): 214–236.
- Duan Q Y, Sorooshian S, Gupta V K. 1992. Effective and efficient global optimization for conceptual rainfall-runoff models [J]. *Water Resour. Res.*, 28 (4): 1015–1031.
- Duan Q, Schaake J, Andréassian V, et al. 2006. Model parameter estimation experiment (MOPEX): An overview of science strategy and major results from the second and third workshops [J]. *J. Hydrol.*, 320 (1–2): 3–17.
- 房云龙, 孙菽芬, 李倩, 等. 2010. 干旱区陆面过程模型参数优化和地气相互作用特征的模拟研究 [J]. *大气科学*, 34 (2): 290–306. Fang Yunlong, Sun Shufen, Li Qian, et al. 2010. The optimization of parameters of land surface model in arid region and the simulation of land–atmosphere interaction [J]. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences (in Chinese)*, 34 (2): 290–306.
- Gupta V K, Bastidas L A, Sorooshian S, et al. 1999. Parameter estimation of a land surface scheme using multicriteria methods [J]. *J. Geophys. Res.*, 104 (D16): 19491–19503.
- Henderson-Sellers A. 1996. Soil moisture: A critical focus for global change studies [J]. *Global and Planetary Change*, 13 (1–4): 3–9.
- Hogue T S, Bastidas L, Gupta H, et al. 2005. Evaluation and transferability of the Noah land surface model in semiarid environments [J]. *Journal of Hydrometeorology*, 6 (1): 68–84.
- Kowalczyk E A, Shao Y P, Law R M, et al. 2006. The CSIRO atmosphere biosphere land exchange (CABLE) model for use in climate models and as an offline model [R]. CRIRO marine and atmospheric research paper 013, 20–24.
- Li Chao, Ren Li. 2011. Estimation of unsaturated soil hydraulic parameters using the ensemble Kalman filter [J]. *Vadose Zone Journal*, 10 (4): 1205–1227.
- 李得勤, 段云霞, 张述文. 2012. 土壤湿度观测、模拟和估算研究 [J]. *地球科学进展*, 27 (4): 424–434. Li Deqin, Duan Yunxia, Zhang Shuwen. 2012. Soil moisture measurement and simulation: A review [J]. *Advances in Earth Science (in Chinese)*, 27 (4): 424–434.
- 李新, 黄春林, 车涛, 等. 2007. 中国陆面数据同化系统研究的进展与前瞻 [J]. *自然科学进展*, 17 (2): 163–173. Li Xin, Huang Chunlin, Che Tao, et al. 2007. Development of a Chinese land data assimilation system: Its process and prospects [J]. *Process in Natural Science (in Chinese)*, 17 (2): 881–892.
- 林朝晖, 刘辉志, 谢正辉, 等. 2008. 陆面水文过程研究进展 [J]. *大气科学*, 32 (4): 935–949. Lin Zhaohui, Liu Huizhi, Xie Zhenghui, et al. 2008. Recent progress in the land-surface and hydrological process studies [J]. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences (in Chinese)*, 32(4): 935–949.
- 梁晓, 戴永久. 2010. 陆面模式中土壤和植被经验参数随机误差的传播研究 [J]. *大气科学*, 34 (2): 457–470. Liang Xiao, Dai Yongjiu. 2010. Soil and plant parameters-related stochastic uncertainty propagation in the common land model [J]. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences (in Chinese)*, 34 (2): 457–470.
- Liu Y Q, Gupta H V, Sorooshian S, et al. 2005. Constraining land surface and atmospheric parameters of a locally coupled model using observational data [J]. *Journal of Hydrometeorology*, 6 (2): 156–172.
- Mattikalli N M, Engman E T, Jackson T J, et al. 1998. Microwave remote sensing of temporal variations of brightness temperature and near-surface soil water content during a watershed-scale field experiment, and its application to the estimation of soil physical properties [J]. *Water Resour. Res.*, 34 (9): 2289–2299.
- Oleson K W, Dai Y J, Bonan G, et al. 2004. Technical description of the Community Land Model (CLM) [R]. NCAR Tech. Note NCAR/TN-461\_STR, 113–123.
- Oleson K W, David M L, Bonan G B, et al. 2010. Technical description of Version 4.0 of the Community Land Model (CLM) [R]. NCAR Tech. Note NCAR/TN-461\_STR, 136–160.
- Roundy J K. 2009. Uncertainty Analysis for Land Surface Model Predictions: Application to the Simple Biosphere 3 and Noah Models at Tropical and Semiarid Locations [M]. USA: Utah State University, 28–54.
- Santanello J A Jr, Peters-Lidard C D, Garcia M E, et al. 2007. Using remotely-sensed estimates of soil moisture to infer soil texture and hydraulic properties across a semi-arid watershed [J]. *Remote Sens. Environ.*, 110 (1): 79–97.
- Scott R L, Shuttleworth W J, Keefer T O, et al. 2000. Modeling multiyear observations of soil moisture recharge in the semiarid American Southwest [J]. *Water Resour. Res.*, 36 (8): 2233–2247.
- Shao Y P, Irannejad P. 1999. On the choice of soil hydraulic models in land-surface schemes [J]. *Boundary-Layer Meteorol.*, 90 (1): 83–115.
- 孙菽芬. 2005. 陆面过程的物理、生化机理和参数化模型 [M]. 北京: 气象出版社, 29–46. Sun Shufen. 2005. Physics, Biochemistry and Parameterization of Land Surface Model [M]. Beijing: China Meteorological Press (in Chinese), 29–46.
- Tian X D, Xie Z H, Dai A G, et al. 2009. A dual-pass variational data assimilation framework for estimating soil moisture profiles from AMSR-E microwave brightness temperature [J]. *J. Geophys. Res.*, 114: D16102.
- Tian X D, Xie Z H, Dai A G, et al. 2010. A microwave land data assimilation system: Scheme and preliminary evaluation over China [J]. *J. Geophys. Res.*, 115: D21113.
- Viterbo P, Beljaars A C M. 1995. An improved land surface parameterization scheme in the ECMWF model and its validation [J]. *J. Climate*, 8 (11): 2716–2748.
- Xia Y L, Yang Z L, Stoffa P L, et al. 2005. Optimal parameter and

- uncertainty estimation of a land surface model: Sensitivity to parameter ranges and model complexities [J]. *Advances in Atmospheric Sciences*, 22 (1): 142–157.
- Xie Z H, Luo Z D, Zeng Q C, et al. 1999. Numerical simulation of moisture content and flux for the unsaturated soil water flow problem [J]. *Progress in Natural Science*, 9 (9): 679–686.
- Yang K, Watanabe T, Koike T, et al. 2007. Auto-calibration system developed to assimilate AMSR-E data into a land surface model for estimating soil moisture and the surface energy budget [J]. *J. Meteor. Soc. Japan*, 85A: 229–242.
- 张述文, 李得勤, 邱崇践. 2009. 三类陆面模式模拟土壤湿度廓线的对比研究 [J]. *高原气象*, 28 (5): 988–996. Zhang Shuwen, Li Deqin, Qiu Chongjian. 2009. A comparative study of the three land surface models in simulating the soil moisture profile [J]. *Plateau Meteorology (in Chinese)*, 28 (5): 988–996.
- 张述文, 李得勤, 刘彦华, 等. 2010. 土壤湿度方程求解方法的比较 [J]. *兰州大学学报 (自然科学版)*, 46(4): 46–53. Zhang Shuwen, Li Deqin, Liu Yanhua, et al. 2010. A comparative study of the difference schemes for solving soil moisture equation [J]. *Journal of Lanzhou University (Natural Sciences) (in Chinese)*, 46 (4): 46–53.