

非饱和土壤溶质迁移转化模型参数优化估算

王超¹, 顾斌杰²

(1. 河海大学水文水资源及环境学院, 江苏 南京 210098; 2. 水利部农水司, 北京 100053)

摘要: 在分析非饱和土壤中水分和溶质迁移转化规律的基础上, 采用与坐标网格相适应的分块连续作用的水动力函数, 研究模型参数最优化估算技术。运用 Gauss-Newton 最小化计算的 Levenberg-Marquardt 修正法来实现反求模型的迭代问题。该方法被应用于估算一维土柱和二维土槽试验研究模型的参数, 探讨了参数给定与估算数量对参数的置信区间和预测效果的影响。经验证表明, 参数优化估算技术是可行的, 以此参数进行模型预测, 其结果是可信的。

关键词: 非饱和土壤; 溶质; 迁移转化; 参数估算

中图分类号: P 641.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-6791(2002)02-0184-07

参数估算是溶质在土壤及地下水中迁移转化规律模拟计算的关键问题。确定土壤水动力和溶质迁移特性参数的常见方法是依靠实验和实测资料直接产生, 或依靠实测资料通过简单的解析解和半解析解反求解来产生。但这些方法不能处理复杂的初始和边界条件下溶质迁移转化模型参数问题, 更无法处理土壤水分时空变化、孔隙介质非均匀和各向异性等问题^[1]。优化技术估算参数是应用数值模型的反复迭代方法使计算值与实测值之间的误差达到最小, 有效地解决了难处理的复杂问题。本文分析水分及溶质在非饱和土壤中迁移转化规律, 运用优化技术来估算水分和溶质迁移转化耦合模型参数, 采用 Gauss-Newton 最小化算法的 Levenberg-Marquardt 修正法来实现反求参数的迭代问题。

1 水分运动及溶质迁移转化的基本方程

1.1 水分运动方程

假设土壤孔隙结构不随水分运动的变化而变化, 即土壤孔隙结构为刚性的。此时, 土壤水分运动 Richards 方程为

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[K_s K_r \left(K_{ij}^A \frac{\partial h}{\partial x_j} + K_{ij}^A \right) \right] - S \quad (1)$$

式中 θ 为体积含水率; h 为压力水头; S 为源漏项; $x_i (i = 1, 2, 3)$ 和 $x_j (j = 1, 2, 3)$ 为空间坐标; t 为时间; K_r 为相对水力传导率; K_s 为饱和水力传导率; K_{ij}^A 为无因次各向异性张量的分量。如果土壤介质为各向同性, 当下角标 $i = j$ 时, $K_{ij}^A = 1$; 当下角标 $i \neq j$ 时, $K_{ij}^A = 0$ 。

收稿日期: 2001-03-12; 修订日期: 2001-05-18

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (59679024)

作者简介: 王超 (1958 -), 男, 江苏滨海人, 河海大学水文水资源及环境学院教授, 博士生导师, 主要从事污染物在地表及地下水环境中迁移转化规律等研究。

为了便于进行数值模拟计算，采用与坐标网格相适应的分块连续作用的水动力函数 Mohanty (1998)^[2]，其基本方程式为

$$h = \sum_p \theta_p(h) = \sum_p \left[\theta_{r,p} + \frac{\theta_{s,p} - \theta_{r,p}}{[1 + (\theta_p h)^{n_p}]^{m_p}} \right] \quad h < h^* \quad (2)$$

$$h = \theta_{s,p} \quad h > h^* \quad (3)$$

$$K_r(h) = \sum_p k_p K_{rp}(h) = \sum_p k_p \frac{(1 - (\theta_p h)^{n_p-1} [1 + (\theta_p h)^{n_p}]^{-m_p})^2}{[1 + (\theta_p h)^{n_p}]^{m_p/2}} \quad h < h^* \quad (4)$$

$$K_{rp}(h) = K^* + K^* [\exp(h - h^*) - 1] \quad h^* < h < 0 \quad (5)$$

$$K_{rp}(h) = K^* + K^* [\exp(-h^*) - 1] \quad h > 0 \quad (6)$$

式中 θ_p 为权重因子； p 为毛细管作用流动区单元编号； $\theta_{s,p}$ 、 $\theta_{r,p}$ 分别为饱和和剩余含水率； θ_p 、 n_p 分别为适合参数； $K_{r,p}$ 为水力传导率； K_{rp} 为非毛细管作用流动区饱和水力传导率； k_p 为饱和水力传导率； θ 为土壤宏观特性的适合系数； h 为压力水头； h_k^* 、 $h^* = h^*$ 为毛细管作用区与非毛细管作用区交界面的压力水头。

1.2 溶质迁移转化方程

如不考虑土壤中气相因素，并用等温吸附模式转换固相浓度，则溶质迁移转化方程^[2]

$$\frac{\partial R_D C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial v_i C}{\partial x_i} - K_1 C - K_2 C - S C_r \quad (7)$$

式中 $R_D = 1 + K_D$ 为迟滞系数； C 为污染物的浓度； v_i 为 i 方向土壤水流动速度； K_1 为污染物一阶衰减比例常数； K_2 为污染物相互转化的一阶反应比例常数； S 为土壤体积密度； C_r 为源漏项水体的污染物浓度； D_{ij} 为弥散系数。

2 求解反问题

2.1 基本公式

反问题就是利用实测资料来反求未知的参数。在实测值与模型预测值之间建立函数关系式，运用优化技术寻求两者之间的最小误差。假设实测资料的观测误差能被描述为多变量标准分布(观测误差均值为零，协方差矩阵为 V)，参数估算可表示为下列函数^[3]

$$L = -\frac{n}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \ln(\det V) - \frac{1}{2} (q^* - \bar{q})^T V^{-1} (q^* - \bar{q}) \quad (8)$$

式中 L 为参数估算函数； n 为总的观测次数； $q^* = q^*(X, t)$ 为观测值； $\bar{q} = \bar{q}(X, t, b)$ 为与设定一组未知模型参数 b 相对应的模型预测值。方程中使用了权重矩阵 $W = V^{-1}$ ；观测误差协方差矩阵表示为

$$V = E \{ (q^* - q) (q^* - q)^T \} \quad (9)$$

式中 E 表示数学期望； q 为独立变量的真值。当 V 已知时，函数式(8)的最大化是等同于求解权重最小二乘问题

$$\min_b = (q^* - \bar{q})^T V^{-1} (q^* - \bar{q}) \quad (10)$$

通常，误差协方差矩阵 V 先前是未知的，可设定它表示为某种形式。假设观测误差是不相关

的独立变量时, V 可用下列对角矩阵表示

$$V = \begin{bmatrix} V & & \\ & V_h & \\ & & V_c \end{bmatrix} \quad (11)$$

式中 V 、 V_h 和 V_c 分别表示与下角标相对应的含水率、压力水头和污染物浓度观测误差值。根据 Kool 和 Parker (1988)^[4]理论, 假设 $V_{ii} = \sigma_i^2$, $V_{hj} = \sigma_h^2$, $V_{ck} = \sigma_c^2$, 其中 i 、 j 和 k 表示含水率、压力水头和浓度的观测总数。

2.2 求解技术

由于基本方程(1)、(7)是非线性的, 反问题(10)求解只能采用反复迭代的方法。开始设定一组初始参数 b^0 , 通过计算产生一个校正因子 b^i 使

$$(b^i + b^j) \quad (b^j) \quad (12)$$

直至改变目标函数 或使校正变量 b 明显变小。Gauss-Newton 最小化算法的 Levenberg-Marquardt 修正法被用来计算^[1]。

2.3 参数不确定性估算

在参数估算中, 实测资料具有不确定性, 这种不确定性通过协方差矩阵来影响估算参数的可信程度。该矩阵的一阶近似形式为

$$H = S^2 (J_f^T W J_f)^{-1} \quad (13)$$

这里 J_f 为最终 Jacobian 矩阵; S^2 为估算误差变量

$$S^2 = (n - p) \quad (14)$$

式中 S^2 为最终最小二乘误差; p 为未知参数个数。协方差矩阵 H 的对角元素包含单个参数变量。从参数变化和 Student t 分布的近似值可确定参数的可信度, 用自由度 $= n - p$ 表示为

$$P_r[\bar{b}_i - t H_{ii}^{1/2} \leq b_i \leq \bar{b}_i + t H_{ii}^{1/2}] = 1 - \alpha \quad (15)$$

式中 \bar{b}_i 为参数 b_i 的估算值; H_{ii} 为参数协方差; $t = t_{v, 1-\alpha/2}$ 为可信水平 $(1 - \alpha)$, 一般取 $\alpha = 0.05$ 。

3 参数优化估算算例

为了检验前面描述的土壤水分运动和溶质迁移转化模型参数优化估算技术, 本文采用土柱装置和特大型变坡土槽装置的试验研究实测资料进行反问题求解参数应用验算。

3.1 土柱装置试验研究参数估算

试验在高 150 cm、内径为 37 cm 的 PV 塑料柱中进行, 柱内填入南京江心洲沉积性细砂土。土柱侧壁深度分别在 5、15、30、50、80 和 120 cm 的位置安装土壤测压头和取样头。试验在两座 (A 座、B 座) 相同的土柱中同时进行, 选用 KB_r 溶液作为示踪溶液, B_r^- 在土壤中初始值为零, 且仅作迁移运动不发生吸附和转化。试验配制的 B_r^- 输入浓度为 200 mg/L, 连续输入稳定后 4 h 开始第一次取样。土柱试验为期 30 d, 每天上午 8:00 和下午 5:00 为取样化验时间, 每次每测点取样 3 次, 以平均值作为此时此测点的实测值。A 土柱试验资料作为反求参数, B 土柱试验资料作为检验参数。详细试验过程参见文献 [5]。试验为一维垂直向下的水分运动和

保守性溶质迁移问题，需估算的模型参数为 (θ, n, r, K_s, L) ，其中 L 为纵向弥散度。

根据参数估算的要求，并参照类似成果，首先给定水分和溶质迁移模型的初始参数： $\theta = 0.04 \text{ cm}^{-1}$ ， $n = 1.60$ ， $r = 0.08 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ ， $s = 0.43 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ ， $K_s = 1.00 \text{ cm/h}$ ， $L = 1.0 \text{ cm}$ ， $D_m = 0.04 \text{ cm}^2/\text{h}$ ，然后进行正问题的数值模型迭代计算^[6]，满足精度要求 $|C_w - C_\mu| \leq 0.01$ (w 为迭代次数， C_μ 为实测值)。为了检验给定的初始值对最终迭代结果的影响和收敛性的稳定问题，参照类似研究方法确定^[4]。对初始值 θ 、 n 、 L 分别上、下浮动 20%，然后再进行迭代计算，其结果表明：在同一空间位置处，当实测资料(A 土柱试验)不变的情况下，给定不同的初始参数值进行迭代，不会影响最终结果的精度，但收敛速度有所不同。表 1 为土柱装置试验模拟参数估算及验证成果。由表 1 可知：将部分参数 (θ, n, L) 作为估算对象，而其余参数根据经验给定时，所估算参数的 95% 置信区间较小。运用估算的参数值代入到数值计算模型中，以 B 土柱试验装置的初始和边界条件及示踪溶液输入方式，进行正向迭代计算，其计算值与实测值(B 土柱试验资料，每测点的样本数为 59 个)的相关关系(r^2)较低。图 1(a) 计算值与实验值比较(图中 C_0 为输入的示踪溶液浓度)表明，预测预报效果并不理想。如果将所有的参数 (θ, n, r, K_s, L) 作为估算对象时，所估算参数的 95% 置信区间较大，同样将所估算参数代入数值模型进行模拟计算，其计算值与实测值的相关关系(r^2)较高。图 1(b) 表明，运用估算的参数值代入到数值计算模型中进行预测预报，效果较好。

表 1 土柱装置试验模拟参数优化估算及验证成果

Table 1 Parameter estimates of the soil column tests and verification of the simulation results

土柱 深度 /cm	给定 θ, K_s 估算的参数				估算所有的参数					
	θ / cm^{-1}	n	L /cm	r^2	θ / cm^{-1}	n	r / $(\text{cm}^3 \text{ cm}^{-3})$	K_s / (cm h^{-1})	L /cm	r^2
5	0.0 398	1.6 002	1.0 010	0.743	0.0 385	1.5 821	0.0 702	1.0 018	1.0 014	0.904
	< ± 0.0 001 >	< ± 0.0 007 >	< ± 0.0 042 >		< ± 0.0 002 >	< ± 0.0 026 >	< ± 0.0 001 >	< ± 0.0 028 >	< ± 0.0 092 >	
15	0.0 401	1.6 005	1.0 008	0.737	0.0 390	1.5 774	0.0 711	1.0 015	1.0 010	0.941
	< ± 0.0 002 >	< ± 0.0 008 >	< ± 0.0 049 >		< ± 0.0 002 >	< ± 0.0 038 >	< ± 0.0 002 >	< ± 0.0 016 >	< ± 0.0 088 >	
30	0.0 403	1.6 008	1.0 003	0.744	0.0 396	1.5 898	0.0 735	1.0 014	1.0 002	0.985
	< ± 0.0 002 >	< ± 0.0 008 >	< ± 0.0 033 >		< ± 0.0 003 >	< ± 0.0 046 >	< ± 0.0 002 >	< ± 0.0 031 >	< ± 0.0 080 >	
50	0.0 404	1.6 011	0.9 922	0.768	0.0 402	1.5 912	0.0 739	1.0 010	0.9 983	0.990
	< ± 0.0 001 >	< ± 0.0 009 >	< ± 0.0 028 >		< ± 0.0 003 >	< ± 0.0 062 >	< ± 0.0 003 >	< ± 0.0 029 >	< ± 0.0 073 >	
80	0.0 404	1.6 012	0.9 842	0.846	0.0 407	1.6 001	0.0 742	1.0 008	0.9 952	0.977
	< ± 0.0 001 >	< ± 0.0 008 >	< ± 0.0 016 >		< ± 0.0 004 >	< ± 0.0 049 >	< ± 0.0 003 >	< ± 0.0 025 >	< ± 0.0 077 >	
120	0.0 402	1.6 010	0.9 831	0.889	0.0 401	1.5 902	0.0 726	1.0 004	0.9 941	0.883
	< ± 0.0 001 >	< ± 0.0 007 >	< ± 0.0 029 >		< ± 0.0 003 >	< ± 0.0 053 >	< ± 0.0 002 >	< ± 0.0 034 >	< ± 0.0 090 >	
平均值	0.0 401	1.6 008	0.9 936		0.0 397	1.5 885	0.0 726	1.0 012	0.9 984	

< > 为估算参数 95% 的置信区间。

3.2 特大型变坡土槽试验研究参数优化估算

利用文献[7]介绍的特大型变坡土槽装置进行水分和污染物在土壤及地下水中迁移转化整体模型参数估算的试验研究。试验在长 12.0 m、宽 1.5 m、高 1.5 m 的两个特大型变坡土槽(A

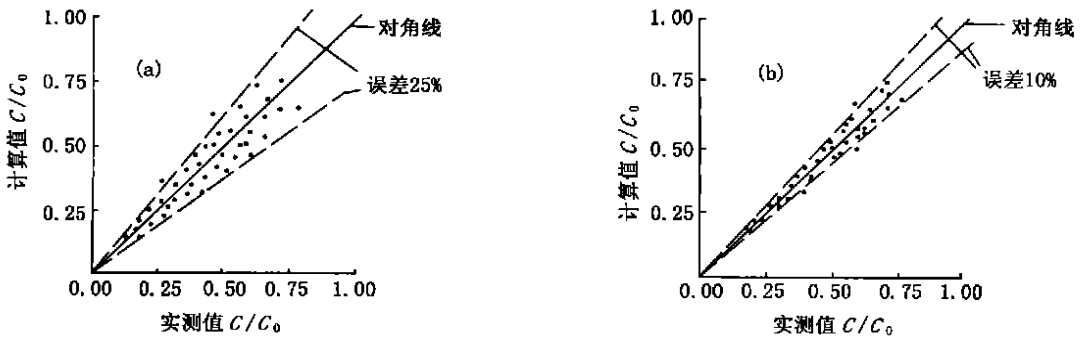


图1 土柱装置的模型计算值与试验实测值比较：(a) 部分参数为估算对象；(b) 所有参数为估算对象

Fig.1 Comparison of computed and measured relativistic concentration in the soil column

槽、B槽)中进行,试验为期45d,连续输入稳定后24h开始第一次取样,每天上午9:00取样化验,每次每测点取样3次,以3次的均值作为此时此测点的实测值。A土槽实测资料用来反求参数,B土槽实测资料用来检验模型参数。以非保守性物质 $\text{NH}_4^+\text{-N}$ 作为示踪污染物,集中置于土壤表面, $\text{NH}_4^+\text{-N}$ 随入渗水体进入土壤非饱和带和地下含水层。在非饱和带主要测定土壤含水率、压力水头和 $\text{NH}_4^+\text{-N}$ 浓度,以便反求非饱和带的模型参数;在饱和含水层主要测定压力水头和 $\text{NH}_4^+\text{-N}$ 浓度,以便反求饱和带的模型参数。考虑到土槽侧壁对污染带影响较弱,故按二维问题进行模拟。 $\text{NH}_4^+\text{-N}$ 在土壤水中运移具有迟滞、衰减和转化特性,因此,水分运动模型参数为 (θ, n, r, K_s) ; $\text{NH}_4^+\text{-N}$ 迁移转化模型参数为 (K_D, L, T, K_1, K_2) ,其中, L 为纵向弥散度; T 为横向弥散度; K_D 为迟滞因子; K_1 为衰减率; K_2 为转化率。给定初始参数 $K_D = 0.25 \text{ cm}^3/\text{g}$, $L = 1.0 \text{ cm}$, $T = 0.025 \text{ cm}$, $K_1 = 0.1 \text{ h}^{-1}$, $K_2 = 0.005$,其余同前,分析实测资料得到 $h = 2.0 \text{ cm}$, $\theta = c = 0.02$ 。将这些参数代入二维数值模型进行迭代计算,精度要求同前,参数成果见表2、3。由表2可知:将部分参数 $(\theta, n, L, T, K_1, K_2)$ 作为估算对象,其余参数根据经验给定时,估算参数的95%置信区间较小。以此估算参数代入数值模型进行模拟计算,其计算值与实测值(B土柱试验资料,每测点的样本数为44个)的相关关系(r^2)较低。图2

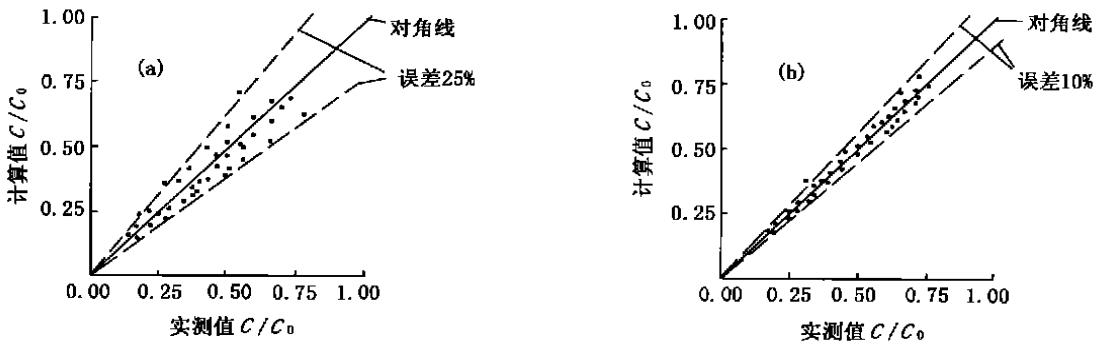


图2 土槽装置的模型计算值与试验实测值验证比较：(a) 部分参数为估算对象；(b) 所有参数为估算对象

Fig.2 Comparison of computed and measured relativistic concentration in the soil tank

(a) 计算值与实验值比较表明,预测预报效果并不理想。如果将所有参数 $(\theta, n, r, K_s, K_D,$

L , T , K_1 , K_2) 均作为估算对象时(表 3), 估算参数的 95 % 置信区间较大, 同样将所估算参数代入数值模型进行模拟计算, 其计算值与实测值的相关关系(r^2) 较高。图 2(b) 表明, 运用所估算的参数值代入到数值计算模型中进行预测预报, 效果较好。

表 2 特大型变坡土槽装置试验模拟(部分参数) 参数优化估算及验证成果

Table 2 Partial parameter estimates of the soil tank tests and verification of the simulation results

z 方向的坐标 距离/cm	给定 r_s , K_s , K_D 的估算						r^2
	n	L /cm	r /cm	K_1/h^{-1}	K_2/h^{-1}		
125	0.0 381 < ± 0.0 016 >	1.6 130 < ± 0.0 157 >	1.1 445 < ± 0.0 998 >	0.0 286 < ± 0.2 066 >	0.1 028 < ± 0.0 032 >	0.0 062 < ± 0.0 096 >	0.782
115	0.0 387 < ± 0.0 011 >	1.6 133 < ± 0.0 163 >	1.1 327 < ± 0.1 172 >	0.0 272 < ± 0.1 997 >	0.1 008 < ± 0.0 027 >	0.0 057 < ± 0.0 107 >	0.726
105	0.0 399 < ± 0.0 012 >	1.6 024 < ± 0.0 142 >	1.1 332 < ± 0.1 200 >	0.0 263 < ± 0.2 132 >	0.0 997 < ± 0.0 017 >	0.0 046 < ± 0.0 115 >	0.760
85	0.0 394 < ± 0.0 020 >	1.6 019 < ± 0.0 132 >	1.1 293 < ± 0.1 206 >	0.0 255 < ± 0.2 237 >	0.0 994 < ± 0.0 026 >	0.0 041 < ± 0.0 126 >	0.886
平均值	0.0 390	1.6 077	1.1 349	0.0 269	0.1 007	0.0 052	

< > 为估算参数 95 % 的置信区间。

表 3 特大型变坡土槽装置试验模拟(所有参数) 参数优化估算及验证成果

Table 3 All of parameter estimates of the soil tank tests and verification of the simulation results

z 方向 的距离 /cm	所有参数 (n , r_s , K_s , K_D , L , T , K_1 , K_2)									r^2
	n	r	K_s	K_D	L	T	K_1	K_2		
125	0.0 377 < \pm > 0.0 020	1.6 003 < \pm > 0.0 567	0.0 697 < \pm > 0.0 644	0.9 739 < \pm > 0.0 330	0.2 607 < \pm > 0.0 110	1.1 261 < \pm > 0.1 365	0.0 263 < \pm > 0.2 670	0.1 013 < \pm > 0.0 091	0.0 057 < \pm > 0.0 237	0.990
115	0.0 381 < \pm > 0.0 021	1.6 011 < \pm > 0.0 522	0.0 713 < \pm > 0.0 677	0.9 942 < \pm > 0.0 298	0.2 556 < \pm > 0.0 104	1.1 188 < \pm > 0.1 384	0.0 257 < \pm > 0.2 253	0.1 000 < \pm > 0.0 103	0.0 050 < \pm > 0.0 192	0.914
105	0.0 389 < \pm > 0.0 018	1.6 019 < \pm > 0.0 547	0.0 722 < \pm > 0.0 668	0.9 993 < \pm > 0.0 290	0.2 494 < \pm > 0.0 100	1.1 093 < \pm > 0.1 266	0.0 255 < \pm > 0.2 424	0.0 995 < \pm > 0.0 112	0.0 041 < \pm > 0.0 212	0.906
85	0.0 382 < \pm > 0.0 022	1.6 004 < \pm > 0.0 576	0.0 718 < \pm > 0.0 721	1.0 006 < \pm > 0.0 314	0.2 433 < \pm > 0.0 092	1.1 004 < \pm > 0.1 447	0.0 242 < \pm > 0.2 565	0.0 892 < \pm > 0.0 192	0.0 052 < \pm > 0.0 163	0.893
平均值	0.0 382	1.6 009	0.0 713	0.9 920	0.2 523	1.1 137	0.0 254	0.0 975	0.0 050	

< > 为估算参数 95 % 的置信区间。

4 结 论

本文研究了水分及溶质在非饱和土壤中迁移转化模型参数的优化估算技术, 运用数值方法求解正问题, 并用非线性最优化技术求解未知参数。经土柱和土槽装置试验研究验证表明: 参数优化估算技术是可行的, 结果是可信的。在参数估算中, 部分参数给定, 部分参数估算, 估算参数的自信区间小于所有参数均为估算的自信区间。同时, 所有参数均估算后代入数值模型进行预测预报, 其结果比部分参数估算后代入模型进行预测预报的效果好。因此, 在进行水分和污染物在非饱和土壤中迁移转化模拟计算中, 模型参数一般均应根据实际情况进行参数估算, 而不宜轻易照搬经验数值或简单的设定为固定值, 以免造成预测预报结果的较大误差。

参考文献:

- [1] Mishra S, Parker J C. Parameter estimation for coupled unsaturated flow and transport[J]. *Water Resources Research*, 1989, 25 (3) : 385 - 396.
- [2] Mohanty B P, Bowman R S, Hendrickx J M H, *et al.* Preferential transport nitrate to a tile drain in an intermittent-flood irrigated field: Model development and experimental evaluation[J]. *Water Resources Research*, 1998, 34 (5) : 1 061 - 1 076.
- [3] Bard Y. Non-linear parameter estimation[M]. Academic, San Diego, Calif, 1974: 341.
- [4] Kool J B, Parker J C. Analysis of the inverse problem for transient unsaturated flow[J]. *Water Resources Research*, 1988, 24 (6) : 817 - 830.
- [5] 王 超, 阮晓红, 朱 亮. 污染物在非饱和土壤中迁移规律的试验研究[J]. *河海大学学报*, 1996, 24(2) : 7 - 13.
- [6] 王 超, 阮晓红, 朱 亮. 水分及非保守性污染物在土壤中运移数值模拟[J]. *河海大学学报*, 1996, 24 (3) : 5 - 11.
- [7] 王 超. 特大型变坡土壤槽纵向垂向弥散系数试验研究[J]. *水利学报*, 1997, (8) : 61 - 66.

Parameter estimation for the model of contamination transport and transformation in unsaturated soil^{*}

WANG Chao¹, GU Bin-jie²

(1. College of Water Resources and Environment, Hohai University, Nanjing 210098, China;

2. MWR, Beijing 100053, China)

Abstract : Parameter estimation is the key job of mathematics simulation and calculation, and its most complex problem is the simulation of water movement and contamination transferring in unsaturated soil. On the basis of analyzing movement and transference, the hydrodynamic functions of piecewise-continuous which is suitable for coordinate grid is adopted, and a contamination distributing equation about soluting concentrations in the liquid, solid, and gaseous phases in variably saturated soil is established. The inverse problem mode is adopted to discuss the optimization estimation technique of the model parameters. The Levenberg-Marguardt modification of the Gauss-Newton minimization algorithm is used to calculate iterative problem of the model parameters. The experiment model parameters of one-dimensional soil column and two-dimensional large tilting soil tank are estimated by the method, and the effect of the given parameter and estimation amount on parameter's confidence intervals and forecast result are discussed. The identified and analyzed results shows that the parameter estimation technique is feasible and the forecast result is dependable. The parameter estimation technique is used to simulate the transferring and transforming of pollutants in unsaturated soil.

Key words : unsaturated soil ; contamination transport and transformation ; parameter estimation

* The project is supported by National Natural Science Fund of China (No.59679024).