



人工智能驱动的地下水数值模拟研究进展

魏亚强,陈依然,陈玉玲,占 籽,张 浇,梁 建,谢佳伦

(上海大学 环境与化学工程学院,上海 200444)

摘要 地下水是维系生态安全与可持续发展的关键资源,正面临水量波动与水质污染的双重挑战。基于行为过程的数值模型虽可刻画地下水渗流与污染物运移过程,但对参数精度依赖高、计算复杂,难以适应复杂异质环境下的动态模拟需求。人工智能(AI)技术在非线性建模、预测优化与高维特征提取方面展现出独特优势,为突破复杂系统建模瓶颈提供新手段。文章系统综述了AI在地下水模拟中的研究进展,涵盖水位预测、污染迁移模拟与修复优化等关键应用。结果表明,AI模型在动态预测、污染识别与修复方案优化等方面表现良好,混合模型方法在复杂变量交互建模中表现出较强鲁棒性,而深度学习框架在时空特征提取方面具有显著优势。然而,AI模型仍存在泛化能力弱、缺乏物理一致性问题。未来,应重点聚焦以下几方面的研究:①构建多尺度数据融合与尺度迁移机制,增强模型稳定性与适应性;②提升同尺度模型的可迁移性与复用性,降低对目标场地数据的依赖;③推动从“大数据”向“有效数据”范式转变,强化小样本条件下的建模能力;④通过嵌入物理约束提升替代模型的可信性与物理一致性;⑤构建集成物联网与边缘计算的智能系统,实现地下水的高效感知、模拟与实时决策,助力地下水管理迈向智能化新时代。

关键词 人工智能;地下水;数值模拟;污染物

中图分类号:P641 **DOI:**10.16152/j.cnki.xdxbzr.2025-03-012

Research progress of AI-driven groundwater numerical modeling

WEI Yaqiang, CHEN Yiran, CHEN Yuling, ZHAN Zi, ZHANG Jiao,
LIANG Jian, XIE Jialun

(School of Environmental and Chemical Engineering, Shanghai University, Shanghai 200444, China)

Abstract Groundwater is a critical resource for maintaining ecological security and sustainable development, yet it faces dual challenges of fluctuant quantity and deteriorating quality. While process-based models can describe groundwater flow and contaminant transport, they are highly dependent on precise parameter inputs and computationally intensive, making them less suited for dynamic simulations in complex, heterogeneous environments. Artificial Intelligence (AI) technologies, with their strengths in nonlinear modeling, predictive optimization, and high-dimensional feature extraction, offer novel solutions to overcome bottlenecks in complex system modeling. This article provides a comprehensive review of recent advancements in AI applications for groundwater modeling, covering key areas such as water level prediction, contaminant transport simulation,

收稿日期:2025-04-25

基金项目:国家自然科学基金(42477004,42330706)

第一作者:魏亚强,男,博士,副研究员,从事地下水污染物迁移转化模拟研究,weiyang0000@126.com。

and remediation optimization. The results indicate that AI models perform well in dynamic forecasting, pollutant identification, and optimization of remediation strategies. Hybrid modeling approaches demonstrate strong robustness in modeling complex variable interactions, while deep learning frameworks show significant advantages in spatiotemporal feature extraction. However, AI models still face challenges such as limited generalization capabilities and a lack of physical consistency. Future research should focus on the following aspects: ① developing multi-scale data fusion and scale-transfer mechanisms to enhance model stability and adaptability; ② Improving the transferability and reusability of same-scale models, with reduced reliance on data from the target site; ③ shifting the paradigm from "big data" to "effective data" to strengthen modeling capabilities under small-sample conditions; ④ embedding physical constraints to improve the reliability and physical consistency of surrogate models; ⑤ constructing intelligent systems that integrate the Internet of Things and edge computing to enable efficient groundwater sensing, modeling, and real-time decision-making, thereby advancing groundwater management into a new era of intelligent operation.

Keywords artificial intelligence; groundwater; numerical modeling; contaminants

地下水是维系生态健康和人类社会可持续发展的重要自然资源^[1-2]。然而,受人口膨胀、气候变化、城市化加剧及地下水过度开采等多重因素影响,地下水资源面临水量锐减与水质恶化的双重压力,安全形势日益严峻^[3-4]。最新数据显示,全球多个含水层的地下水位(groundwater level, GWL)普遍以超过 0.5 m/a 的速度持续下降^[5]。除地下水量损失外,地下水污染问题亦日趋严重,诸如砷、氟化物和硝酸盐等污染物广泛存在于多地地下水中^[6-8]。因此,缓解当前地下水危机迫在眉睫,亟需采取有效措施加以应对^[9]。然而,地下水系统的隐蔽性和复杂性决定了其精准表征高度依赖现场观测数据。受限于监测布点稀疏、成本高昂及周期较长等因素,获取高时空分辨率的现场数据仍存在较大挑战^[10]。因此,研究人员通常将有限的观测数据与数值模拟方法相融合,建立可量化地下水演变与污染迁移转化的技术体系,以支撑风险识别、评估及精准治理的全过程管理^[11-12]。

数值模拟作为刻画地下水渗流与溶质运移过程的核心手段,已成为定量分析地下水系统规律的重要工具^[13]。20 世纪 80 年代末期,地下水数值模拟方法已趋于成熟,各类模拟软件陆续在全球范围内得到推广与应用。由美国地质调查局 McDonald 和 Harbaugh 开发的基于三维有限差分法的专门用于孔隙介质中地下水流数值模拟的软件 MODFLOW 为典型代表,因其开放性、模块化结构和良好的适用性,广泛应用于科学研究、环境保护、城乡规划、水资源管理等多个领域^[14-15]。基于对流弥散方程开发的溶质运移模型

MT3DMS,能够有效描述污染物在地下水中的迁移过程,为地下水污染的风险评估与预测提供了坚实支撑^[16-18]。在此基础上,陆续发展出多种耦合模型,如 PHT3D、COMSOL、CPqPy 等,进一步增强了模拟复杂水文地球化学过程的能力^[19-22]。然而,地下水系统具有高度非线性结构,基于物理的模型在构建过程中通常需要大量参数化操作,如孔隙率、渗透系数和弥散系数等参数的精确获取。这一过程不仅依赖高密度的现场数据采集,还伴随着数据量增加所带来的计算成本上升、模型适应性下降等挑战^[23]。在此背景下,如何构建具有更高精度、良好泛化能力且计算效率更优的建模与优化方法,已成为当前地下水模拟研究的重要方向和亟待突破的关键问题。

人工智能(artificial intelligence, AI)具备从复杂系统中自动提取特征、构建预测模型并执行优化决策的能力,已在多个领域实现广泛应用^[24-28]。在地下水建模领域,AI 通过提升数据获取与处理效率、辅助模型参数调整、开展情景模拟与预测分析等方式,展现出巨大应用潜力^[29]。同时,其在变量间非线性关系建模与关键控制因子识别方面也提供了重要补充,有助于揭示地下水系统内部驱动机制^[29]。目前 AI 模型已逐步在地下水风险评估^[6-7]、GWL 预测^[23,30]以及地下水质量(groundwater quality, GWQ)预测^[31,10]等方面开展研究。然而,由于对 AI 建模流程、适用范围以及结果解释机制缺乏深入理解,导致其可信度不足,难以获得研究人员的广泛信任与应用^[32]。因此,系统梳理人工智能在地下水建模中的发展路径、典型应用及其优势与局限,对于推动 AI 与

水文地质建模的深度融合、拓展其工程适用性与可解释性具有重要意义。

人工智能技术为破解地下水系统表征难、建模难、预测难等关键瓶颈提供了新的技术路径。当前研究已在地下水量预测、水质预测与风险评估等方面取得一定成果,形成了多种 AI 模型与传统方法并行发展的研究格局。然而,模型选择、性能差异、可解释性、适用性及与物理模型的融合等问题仍亟待深入探讨。为此,本文系统综述了人工智能在地下水模拟研究中的最新进展,重点梳理其在地下水量与水质预测中的典型应用,比较不同技术路线的特点,总结当前面临的挑战,并展望未来的发展方向,以期为推动 AI 在地下水科学中的深化应用提供理论支撑与实践参考。

1 人工智能驱动的地下水精准应用

1.1 地下水量预测

1.1.1 地下水位

地下水位是衡量地下水资源动态变化的关键指标,对水资源管理与调配具有重要意义。长期以来准确模拟与预测 GWL 的时空变化都是地下水建模研究的核心问题之一。尽管传统的统计方法为 GWL 预测提供了基础框架,但其对高度异质性的地下水系统响应能力有限,预测精度受到显著制约^[33-34]。AI 模型凭借其强大的非线性建模能力,在预测复杂 GWL 波动方面展现出更高的准确性和鲁棒性^[23]。例如, Malakar 等^[35]采用长短期记忆网络(long-short term memory, LSTM)预测印度的 GWL,结果表明超过 84% 的观测井的决定系数(R^2)超过 0.6157。Yin 等^[36]采用同样的算法预测澳大利亚维多利亚州的 GWL,展现出良好的预测效果。此外,研究人员常将多个模型或算法耦合形成混合模型进一步提高预测性能^[37-39]。研究表明,相较于单一 LSTM 模型,编码器解码器结构的 LSTM 模型对华北平原地下水位的预测结果更贴合监测数据, R^2 提高了 14%^[40]。相比于循环神经网络(recurrent neural networks, RNN)系列模型,Transformer 与卷积神经网络(convolutional neural networks, CNN)的耦合模型预测结果整体均方根误差值(root mean square error, RMSE)从 0.25 m 降到 0.14 m^[41]。

1.1.2 地下水储量

由于地下水长期处于过度开采的状态,全球

30% 的含水层正面临地下水储量(groundwater storage, GWS)持续下降甚至枯竭的风险^[42,5]。目前重力恢复与气候实验(GRACE)卫星观测数据是评估地下水储量的主要手段,但其较低的空间分辨率难以满足区域精细化管理需求,已有研究尝试引入 AI 模型与 GRACE 数据融合提升 GWS 估算的空间分辨率与精度^[43-44]。研究人员通常采用基于树的模型预测地下水储量。例如, Khorrami 等^[45]采用随机森林(random forest, RF)模型将 GRACE 观测数据估计的安纳托利亚盆地西部地下水储量的分辨率从 50 km 细化至 10 km,有效增强了对局部地下水储量变化的刻画能力^[45]。Hasan 等^[46]采用相同的模型提供了全球因地层压实引发的含水层储量损失。此外,有研究人员提出基于贝叶斯平均的 AI 集成框架预测圣华金河流域的地下水储量变化,该集成方法在不确定性量化和预测稳定性方面显著优于单一模型^[47]。综上所述,GWL 与 GWS 作为反映地下水系统动态变化的核心指标,已成为 AI 模型在地下水领域应用研究的重点方向。然而,当前研究仍面临观测数据缺乏和模型精度不足等挑战,未来应进一步推动多模型融合及传感技术升级的集成应用,以实现地下水动态更为精准、稳定的智能预测。

1.2 地下水水质预测

1.2.1 污染源溯

污染源的数量、位置及释放历史等关键信息在实际场地中普遍存在缺失,导致地下水中污染物的迁移与分布难以准确模拟与预测^[48-49]。为应对该挑战,有研究人员将超启发式同伦算法与极限学习机(ensemble learning machine, ELM)相结合用于识别污染源位置,结果显示该方法在识别精度方面表现优异, R^2 可达 0.99^[50]。另一项研究采用人工神经网络(artificial neural networks, ANN)预测污染源的释放历史,发现预测结果与 MODFLOW 和 MT3DMS 模拟之间的最小 RMSE 仅为 0.55 g/s^[51]。此外, AI 模型能够显著提升污染源溯源的计算效率^[52-56]。例如, Wu 等^[57]针对中国辽宁省浑河流域多源污染采用 AI 模型的集成框架确定污染源位置,结果显示与基于模型的反演框架相比,该方法计算效率显著提高了 88%。Xia 等^[58]将残差密集 CNN 与迭代局部更新集成平滑器耦合,减少了 27 500 次正向模型的运行。然而,目前大多数研究仍集中于假设案例,

AI 模型在实际场地条件下的适用性和推广性仍有待深入验证与拓展。

1.2.2 污染物分布预测

地下水污染物的迁移与转化过程具有显著的空间差异性和成因复杂性,对建模方法提出更高要求。AI 模型凭借对复杂关系的自学习能力,被广泛应用于多种 GWQ 指标的预测,包括 pH、盐度、无机污染物及持久性有机污染物等。在常规水质指标方面,Stackelberg 等^[59]开发增强回归树(boosted regression trees, BRT)模型预测美国邻近冰川含水层系统中的 pH 值,模型对后续观测数据中 pH 变化的解释度可达 60%。在滨海地区,海水入侵常导致地下水盐度升高,研究人员采用极限梯度提升(extreme gradient boosting, XGB)模型对里海南部沿海含水层地下水盐度进行建模,结果显示该方法具备出色的预测效果, R^2 达到 0.89^[60]。Sarkar 等^[61]通过 RF 模型以 1 km² 分辨率描绘了印度部分地区地下水盐度升高的概率分布,结果显示约有 3.3 亿人暴露于高盐度地下水的风险中。

除了对常规水质指标的预测,AI 模型也逐渐被应用于典型无机污染物(如砷、氟化物、硝酸盐)和新兴有机污染物(如全氟化合物)在地下水中的空间分布预测及迁移转化过程建模。这类污染物往往具有更强的成因复杂性、迁移路径不确定性和环境持久性。例如,地下水中砷和氟化物的分布受地球化学反应及水文过程等多因素控制,具有高度的空间异质性。根据美国与孟加拉国等地的研究表明,BRT 和 RF 模型在估算地下水中砷的存在概率及浓度水平时均表现出优异的预测性能,准确率普遍超过 90%,为高砷风险区的识别提供了有力工具^[62-63]。研究人员采用 RF 模型构建印度地下水氟污染的风险分布图,同时估算约有 1.2 亿人暴露于高氟风险中,有效提升了当地风险预警能力^[64]。此外,在农业活动频繁的地区,氮肥施用往往引发地下水严重的氮污染。有研究针对加利福尼亚中央山谷和伊朗 Sari-Neka 含水层,应用多种 AI 模型对地下水硝酸盐浓度进行预测,结果表明 BRT 模型在各类模型中表现最优,具有较高的预测精度^[65-66]。然而,单一模型在时空分布预测时往往难以同步考虑地下水水质的时空关联,导致预测精度较低。黄燕鹏^[67]构建了一种整合自注意力机制的 LSTM 和 RNN 串联堆叠神经网络模型能够有效捕捉研究区地下

水硝酸盐的季节性模式。此外,研究人员采用基于树的模型对加利福尼亚州地下水中全氟化合物浓度进行预测,识别高风险井的准确率达 91%^[68]。目前 AI 模型凭借其在高维数据挖掘与非线性关系捕捉上的优势,已成为地下水污染识别与水质预测的重要补充工具。未来,通过融合 AI 与基于过程的模型有望进一步提升模型的精度与适应性。

1.2.3 污染修复策略优化

地层的隐蔽性和地质结构的高度非均质性,制约了修复方案的精准制定,现有场地修复技术在实际应用中效率较低、成本偏高。近年来,AI 技术在污染场地修复中的应用显著提升了方案设计的科学性与经济性。AI 模型耦合优化算法已被用于优化修复井的布局与运行参数。例如,有研究人员采用 CNN 预测华盛顿福德场地的高性能井位,准确率超 80%^[69]。Rogers 等^[70]采用 ANN 与遗传算法(genetic algorithm, GA)优化美国加州某超级基金场地抽提方案,在不同抽水模式下识别最优井位与抽水速率,节省数千万美元成本。此外,AI 模型结合主成分分析与敏感性分析常被用于识别影响修复效率的关键因素。Shi 等^[71]采用 XGB 和 ANN 评估植物修复最重要的特征是植物科。Yu 等^[72]采用基因规划模型揭示了电动修复中系统电流与 pH 是控制 Cr 迁移的关键参数。Lee 等^[73]采用分类与回归树算法发现 NO_3^- 、 NO_2^- 与 Fe^{2+} 在还原脱氯反应中最具指示意义。综上,AI 技术已在井网设计优化和多因素修复机制建模展现出良好的工程实用潜力,但其在多过程耦合机制的建模与动态修复策略的制定仍有待深入挖掘。

2 技术比对特点

AI 技术在地下水建模、污染识别与风险评估等任务中表现出良好的适应性与灵活性。不同类型的 AI 方法在建模原理、数据要求、泛化能力与可解释性等方面具有显著差异,因此在具体应用时需根据研究目标与数据特征加以选择与组合。目前,以回归为主的监督学习算法已成为地下水水量和水质预测模型构建的主流方法^[74]。选取 ANN、集成树模型(如 RF、BRT 和 XGB)以及深度学习模型(如 LSTM 和 CNN)等常见方法,围绕其定义、核心特点、典型应用场景与潜在不足进行系

统对比。ANN 通过多层神经元连接,模拟人脑处理信息的机制,可有效学习非线性输入与输出之间的映射关系,广泛用于地下水水位、污染物浓度分布预测等任务^[75]。其优点在于无需对数据分布做出过多的假设,能适应复杂多维输入,但也面临结构设计不确定、易过拟合、结果可解释性较差等问题,特别是在预测机制需明确解释的场景中表现受限。

以 RF、XGB 及 BRT 为代表的集成树模型,基于多个弱学习器组合提升预测性能,具有鲁棒性强、易于调参、可处理变量交互关系等优势^[74]。尤其在面对高维输入、多源驱动因子及缺失数据时表现稳定。其内置变量重要性排序功能也为地下水建模提供了解释性支持。然而,此类方法本质上以分类回归树为基础,对时空连续性描述能力有限,且在长序列建模中表现不如深度学习模型。深度学习模型如 LSTM 与 CNN 近年来在地下水建模中应用日益广泛。LSTM 擅长挖掘时间序列中的长依赖结构,适用于地下水水位或污染变化的长期预测^[36],而 CNN 则在空间特征提取方面表现出色^[76]。但此类模型依赖大量数据以发挥性能优势,训练过程耗时长、调参复杂,同时其“黑箱”结构在高要求的监管或风险场景中存在一定争议^[77-78]。此外,AI 模型常与自然启发式优化算法(如 GA、粒子群优化等)耦合,用于污染源识别、抽提修复方案优化等复杂决策问题^[79-80]。此类方法通过优化 AI 模型的结构或参数(如网络权重、超参数),或以 AI 模型作为目标函数与约束条件的估算器,有效提升模型全局搜索能力与工程实用性。总体而言,不同 AI 方法在地下水领域的应用优势互补,其结合自然算法的协同优化策略也不断拓展 AI 技术在污染识别与风险管理中的工程适用性与决策价值。

3 问题和难点

尽管前述章节展示了人工智能模型在地下水水量预测、污染识别与修复优化中的广泛应用及技术特点,但目前 AI 方法仍面临两方面的关键挑战,即泛化能力不足与可解释性欠缺。这两方面的问题直接影响模型的迁移应用能力与工程可信度,因此,是当前研究关注的重点方向。在泛化能力方面,许多 AI 模型对训练数据分布高度敏感,难以适应新区域或变化条件下的预测任务。在实

际地下水建模中,受限于地质构造、水文条件的空间异质性以及数据获取的困难,模型在不同区域或长期时序下的表现往往显著下降。有研究表明通过迁移学习可以提升模型的泛化能力,并在具有相似水文地质背景的区域间取得了一定效果^[81]。但目前在缺乏足够训练样本或跨场地迁移应用时,模型仍存在性能退化问题。同时 AI 算法本身缺乏物理约束,常忽略地下水系统中控制性机制的表达,使得其在外推场景或极端情形下预测结果缺乏可信性。

在可解释性方面,AI 模型“黑箱”特征限制了其在地下水管理与污染风险监管中的应用价值。仅通过高精度预测结果并不足以支撑科学决策,还需理解模型输出背后的驱动因子与过程机制。目前物理信息神经网络(physics-informed neural networks, PINN)、局部可解释模型无关解释(local interpretable model-agnostic explanations, LIME)与夏普解释法(SHapley Additive exPlanations, SHAP)等方法已被用于提升 AI 模型的可解释性,但也不可避免地引入了额外计算成本或解释机制上的局限性^[82-83]。例如, PINN 训练过程中需同时满足数据与物理约束,导致训练复杂度显著上升,而 LIME 与 SHAP 虽然适用于各种 AI 模型,但在高维输入与大规模应用场景下,解释过程本身也可能成为新的计算瓶颈。综上所述, AI 模型在地下水领域展现出强大的建模与预测能力,但其泛化能力与可解释性仍是制约其工程化与规模化应用的核心瓶颈。未来研究需从融合物理机制、改进网络结构、引入轻量化可解释模块等方面入手,在提升模型可信度的同时兼顾计算效率,从而更好地服务于复杂多变的地下水环境系统。

4 结论和展望

人工智能技术在地下水建模中的应用正在逐步突破传统建模的边界,成为提升模拟效率与预测精度的重要工具。当前, AI 模型已在地下水位预测、水质风险评估及污染物迁移模拟等方面展现出广泛适应性,尤其在应对高维输入、非线性耦合与数据稀缺等挑战中表现出独特优势。然而,地下水系统具有高度的异质性与时空变异性,不同区域、不同尺度下模型迁移能力有限, AI 模型在解释性、泛化性与可验证性方面仍存在明显不足。通过对目前已有研究的应用开展分析,认为

人工智能在地下水模拟研究中未来主要呈现以下发展趋势(见图 1)。

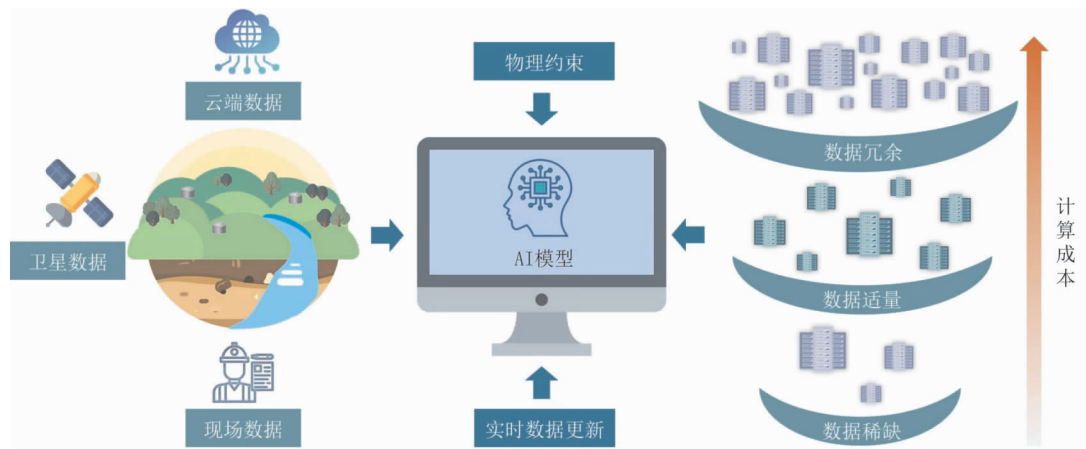


图 1 人工智能在地下水模拟与管理中的应用趋势

Fig. 1 Trends in the application of AI for groundwater modeling and management

1) 多尺度建模与迁移机制研究。针对地下水系统的空间异质性特征,需构建跨尺度数据融合框架,集成遥感观测、场地监测及孔隙尺度的多源数据,通过层级化神经网络架构实现不同分辨率数据的特征传递,探索参数升/降尺度中的信息保持机制,推动 AI 模型在尺度迁移中的稳定性与可靠性提升。

2) 提升同尺度模型的可迁移性与复用性。现有 AI 替代模型多针对特定场地构建,模型结构、输入参数及训练策略高度依赖特定数据条件,难以直接应用于同尺度的其他区域。虽然具备高可迁移性的通用模型可显著提升 AI 方法的实用性与开发效率,但其训练通常依赖大规模、多样化的数据,构建成本高昂,其必要性及性价比尚需进一步论证。同时,水流与溶质运移等复杂物理过程是否能够被 AI 模型可靠替代,仍有待深入研究与实证验证,如何在保障物理一致性的前提下降低计算资源消耗,是实现通用型替代模型的关键挑战。

3) 从“大数据”转向“有效数据”范式。当前 AI 模型多依赖大规模样本数据以提升预测精度,然而在地下水领域,数据获取代价高、异质性强,盲目追求大数据不仅效率低下,且难以保证数据质量^[84]。未来研究应更加重视“小样本”条件下的模型鲁棒性与泛化能力,探索主动学习、迁移学习和物理引导等策略,提升模型在有限数据支撑下的准确性与可靠性,从而实现“以少胜多”的智能建模范式转变。

4) AI 替代模型的构建与可信性提升。通过集成物理知识(如达西定律、对流弥散方程等物

理约束)、强化学习机制与不确定性量化等手段,在保持 AI 非线性建模优势的同时增强物理一致性,开发注意力机制引导的时空特征提取模块,提升模型对非均质含水层中污染物迁移路径的表征能力,逐步实现对传统数值模型的可靠替代,拓展其在复杂地下水系统中的应用深度。

5) 面向高效实时计算的智能系统集成。结合物联网与云计算技术/边缘计算技术建立地下水智能感知模拟决策闭环系统,在地下水监测中实现数据的实时采集与初步分析,通过深度学习与自适应算法实现实时数据自动更新。同时,采用智能感知技术实现对污染物的实时监测与预警,提供及时的决策支持。这种集成系统将在地下水监测、建模和修复过程中实现更高效、智能化的自动化管理,推动地下水管理进入智能化新时代。

参考文献

- [1] ROHDE M M, ALBANO C M, HUGGINS X, et al. Groundwater-dependent ecosystem map exposes global dryland protection needs [J]. Nature, 2024, 632 (8023): 101-107.
- [2] KUANG X X, LIU J G, SCANLON R, et al. The changing nature of groundwater in the global water cycle [J]. Science, 2024, 383(6686): eadff0630.
- [3] PODGORSKI J, KRACHT O, ARAGUAS-ARAGUAS L, et al. Groundwater vulnerability to pollution in Africa's Sahel region [J]. Nature Sustainability, 2024, 7: 558-567.
- [4] 肖燚, 郭亚会, 李明蔚, 等. 基于机器学习的地下水水质预测研究 [J]. 北京师范大学学报(自然科

- 学版), 2022, 58(2): 261-268.
- XIAO Y, GUO Y H, LI M W, et al. Machine learning to predict groundwater quality[J]. Journal of Beijing Normal University (Natural Science) 2022, 58(2): 261-268.
- [5] JASECHKO S, SEYBOLD H, PERRONE D, et al. Rapid groundwater decline and some cases of recovery in aquifers globally[J]. Nature, 2024, 625(7996): 715-721.
- [6] PODGORSKI J, BERG M. Global threat of arsenic in groundwater[J]. Science, 2020, 368(6493): 845-850.
- [7] PODGORSKI J, BERG M. Global analysis and prediction of fluoride in groundwater[J]. Nature Communications, 2022, 13(1): 42-32.
- [8] LIU X C, BEUSEN A H W, VAN GRINSVEN H J M, et al. Impact of groundwater nitrogen legacy on water quality[J]. Nature Sustainability, 2024, 7: 891-900.
- [9] FAMIGLIETTI J S. The global groundwater crisis[J]. Nature Climate Change, 2014, 4(11): 945-948.
- [10] ZHI W, APPLING A P, GOLDEN H E, et al. Deep learning for water quality[J]. Nature Water, 2024, 2: 228-241.
- [11] ZIPKIN E F, ZYLSTRA E R, WRIGHT A D, et al. Addressing data integration challenges to link ecological processes across scales[J]. Frontiers in Ecology and the Environment, 2021, 19(1): 30-38.
- [12] 殷乐宜, 魏亚强, 陈坚, 等. 土壤和地下水耦合数值模拟研究进展[J]. 环境保护科学, 2020, 46(3): 127-131.
- YIN L Y, WEI Y Q, CHEN J, et al Research progress of coupled numerical simulation of soil and groundwater[J]. Environmental Protection Science, 2020, 46(3): 127-131.
- [13] 魏亚强, 陈坚, 张铎, 等. 基于Python的地下水模拟研究进展与应用[J]. 计算机技术与发展, 2021, 31(5): 150-156.
- WEI Y Q, CHEN J, ZHANG D, et al. Application and research progress of Python in groundwater numerical simulation[J]. Computer Technology and Development, 2021, 31(5): 150-156
- [14] MCDONALD M G, HARBAUGH A W. A modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model[M]. Reston: US Geological Survey, 1988.
- [15] LONG D, YANG W T, SCANLON B R, et al. South-to-North Water Diversion stabilizing Beijing's groundwater levels[J]. Nature Communications, 2020, 11(1): 3665
- [16] RADLOFF K A, ZHENG Y, MICHAEL H A, et al. Arsenic migration to deep groundwater in Bangladesh influenced by adsorption and water demand[J]. Nature Geoscience, 2011, 4(11): 793-798.
- [17] CONNELL L D, VAN DEN DAELE G. A quantitative approach to aquifer vulnerability mapping[J]. Journal of Hydrology, 2003, 276(1/2/3/4): 71-88.
- [18] MIRZA I A, AKRAM M S, SHAH N A, et al. Analytical solutions to the advection-diffusion equation with Atangana-Baleanu time-fractional derivative and a concentrated loading[J]. Alexandria Engineering Journal, 2021, 60(1): 1199-1208.
- [19] WEI Y Q, YUAN C P, XU X Y, et al. Colloid formation and facilitated chromium transport in the coastal area soil induced by freshwater and seawater alternating fluctuations[J]. Water Research, 2022, 218: 118456.
- [20] WEI Y Q, XU X Y, ZHAO L, et al. Numerical modeling investigations of colloid facilitated chromium migration considering variable-density flow during the coastal groundwater table fluctuation[J]. Journal of Hazardous Materials, 2023, 443: 130282.
- [21] WEI Y Q, CAO X D. A COMSOL-PHREEQC coupled Python framework for reactive transport modeling in soil and groundwater[J]. Ground Water, 2022, 60(2): 284294.
- [22] APPELO C A J, ROLLE M. PHT3D: A reactive multicomponent transport model for saturated porous media[J]. Ground Water, 2010, 48(5): 627-632.
- [23] BOO K B W, EL-SHAFIE A, OTHMAN F, et al. Groundwater level forecasting with machine learning models: A review[J]. Water Research, 2024, 252: 121249.
- [24] KRENN M, POLLICE R, GUO S Y, et al. On scientific understanding with artificial intelligence[J]. Nature Reviews Physics, 2022, 4(12): 761-769.
- [25] REICHSTEIN M, CAMPS-VALLS G, STEVENS B, et al. Deep learning and process understanding for data-driven Earth system science[J]. Nature, 2019, 566(7743): 195-204.
- [26] BUTLER K T, DAVIES D W, CARTWRIGHT H, et al. Machine learning for molecular and materials science[J]. Nature, 2018, 559: 547-555.
- [27] KEITH J A, VASSILEV-GALINDO V, CHENG B Q, et al. Combining machine learning and computational chemistry for predictive insights into chemical systems[J]. Chemical Reviews, 2021, 121(16): 9816-9872.

- [28] LIU X, LU D W, ZHANG A Q, et al. Data-driven machine learning in environmental pollution: Gains and problems[J]. *Environmental Science & Technology*, 2022, 56(4): 2124-2133.
- [29] Advancing geoscience with AI[J]. *Nature Geoscience*, 2024, 17(10): 947.
- [30] WUNSCH A, LIESCH T, BRODA S. Deep learning shows declining groundwater levels in Germany until 2100 due to climate change[J]. *Nature Communications*, 2022, 13(1): 1221.
- [31] HAGGERTY R, SUN J X, YU H F, et al. Application of machine learning in groundwater quality modeling: A comprehensive review[J]. *Water Research*, 2023, 233: 119745.
- [32] HANSON B, STALL S, CUTCHER-GERSHENFELD J, et al. Garbage in, garbage out: Mitigating risks and maximizing benefits of AI in research[J]. *Nature*, 2023, 623(7985): 28-31.
- [33] TAORMINA R, CHAU K W, SETHI R. Artificial neural network simulation of hourly groundwater levels in a coastal aquifer system of the Venice lagoon[J]. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 2012, 25(8): 1670-1676.
- [34] REZAIE-BALF M, NAGANNA S R, GHAEMI A, et al. Wavelet coupled MARS and M5 Model Tree approaches for groundwater level forecasting[J]. *Journal of Hydrology*, 2017, 553: 356-373.
- [35] MALAKAR P, MUKHERJEE A, BHANJA S N, et al. Deep learning-based forecasting of groundwater level trends in India: Implications for crop production and drinking water supply[J]. *ACS ES&T Engineering*, 2021, 1(6): 965-977.
- [36] YIN W J, FAN Z W, TANGDAMRONGSUB N, et al. Comparison of physical and data-driven models to forecast groundwater level changes with the inclusion of GRACE: A case study over the state of Victoria, Australia[J]. *Journal of Hydrology*, 2021, 602: 126735.
- [37] CAI H J, LIU S N, SHI H Y, et al. Toward improved lumped groundwater level predictions at catchment scale: Mutual integration of water balance mechanism and deep learning method[J]. *Journal of Hydrology*, 2022, 613: 128495.
- [38] SHEIKH KHOZANI Z, BARZEGARI BANADKOOKI F, EHTERAM M, et al. Combining autoregressive integrated moving average with Long Short-Term Memory neural network and optimisation algorithms for predicting ground water level[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2022, 348: 131224.
- [39] AKBARIFARD S, MADADI M R, ZOUNEMAT-KERMANI M. An artificial intelligence-based model for optimal conjunctive operation of surface and groundwater resources[J]. *Nature Communications*, 2024, 15: 553.
- [40] JING H, HE X, TIAN Y, et al. Comparison and interpretation of data-driven models for simulating site-specific human-impacted groundwater dynamics in the North China Plain[J]. *Journal of Hydrology*, 2023, 616: 128751.
- [41] 冯鹏宇, 金韬, 沈一选, 等. 基于 CNN-Transformer 的城区地下水位预测[J]. *计算机仿真*, 2023, 40(4): 492-498.
- FENG P Y, JIN T, SHEN Y X, et al. Prediction of urban groundwater level based on CNN-transformer[J]. *Computer Simulation*, 2023, 40(4): 492-498.
- [42] DE GRAAF I E M, GLEESON T, RENS VAN BEEK L H, et al. Environmental flow limits to global groundwater pumping[J]. *Nature*, 2019, 574(7776): 90-94.
- [43] LI X Y, LONG D, SCANLON B R, et al. Climate change threatens terrestrial water storage over the Tibetan Plateau[J]. *Nature Climate Change*, 2022, 12: 801-807.
- [44] SATIZÁBAL-ALARCÓN D A, SUHOGUSOFF A, FERRARI L C. Characterization of groundwater storage changes in the Amazon River Basin based on downscaling of GRACE/GRACE-FO data with machine learning models[J]. *Science of the Total Environment*, 2024, 912: 168958.
- [45] KHORRAMI B, ALI S, GÜNDÜZ O. Investigating the local-scale fluctuations of groundwater storage by using downscaled GRACE/GRACE-FO JPL mascon product based on machine learning (ML) algorithm[J]. *Water Resources Management*, 2023, 37(9): 3439-3456.
- [46] HASAN M F, SMITH R, VAJEDIAN S, et al. Global land subsidence mapping reveals widespread loss of aquifer storage capacity[J]. *Nature Communications*, 2023, 14(1): 6180.
- [47] YIN J N, MEDELLÍN-AZUARA J, ESCRIVA-BOU A, et al. Bayesian machine learning ensemble approach to quantify model uncertainty in predicting groundwater storage change[J]. *Science of the Total Environment*, 2021, 769: 144715.
- [48] 郑闯, 董军, 张伟红, 等. 基于过程模拟的地下水污染源识别研究进展[J]. *中国环境科学*, 2024, 44(9): 4999-5006.
- ZHENG C, DONG J, ZHANG W H, et al. Research

- progress of groundwater pollution source identification based on process simulation[J]. *China Environmental Science*, 2024, 44(9): 4999-5006.
- [49] 王晓红, 魏加华, 成志能, 等. 地下水有机污染源识别技术体系研究与示范[J]. *环境科学*, 2013, 34(2): 662-667.
- WANG X H, WEI J H, CHENG Z N, et al. Groundwater organic pollution source identification technology system research and application[J]. *Environmental Science*, 2013, 34(2): 662-667.
- [50] HOU Z Y, LAO W M, WANG Y, et al. Homotopy-based hyper-heuristic searching approach for reciprocal feedback inversion of groundwater contamination source and aquifer parameters[J]. *Applied Soft Computing*, 2021, 104: 107191.
- [51] SECCI D, MOLINO L, ZANINI A. Contaminant source identification in groundwater by means of artificial neural network[J]. *Journal of Hydrology*, 2022, 611: 128003.
- [52] BIAN J M, RUAN D M, WANG Y, et al. Bayesian ensemble machine learning-assisted deterministic and stochastic groundwater DNAPL source inversion with a homotopy-based progressive search mechanism[J]. *Journal of Hydrology*, 2023, 624: 129925.
- [53] LI J H, LU W X, WANG H, et al. Groundwater contamination source identification based on a hybrid particle swarm optimization-extreme learning machine[J]. *Journal of Hydrology*, 2020, 584: 124657.
- [54] MO S X, ZABARAS N, SHI X Q, et al. Deep autoregressive neural networks for high-dimensional inverse problems in groundwater contaminant source identification[J]. *Water Resources Research*, 2019, 55(5): 3856-3881.
- [55] XING Z X, QU R Z, ZHAO Y, et al. Identifying the release history of a groundwater contaminant source based on an ensemble surrogate model[J]. *Journal of Hydrology*, 2019, 572: 501-516.
- [56] ZHENG N, LI Z, XIA X M, et al. Estimating line contaminant sources in non-Gaussian groundwater conductivity fields using deep learning-based framework[J]. *Journal of Hydrology*, 2024, 630: 130727.
- [57] WU Y H, LI M, XIE H J, et al. Characterizing multi-source heavy metal contaminated sites at the Hun River basin: An integrated deep learning and data assimilation approach[J]. *Journal of Hydrology*, 2025, 648: 132349.
- [58] XIA X M, JIANG S M, ZHOU N Q, et al. Groundwater contamination source identification and high-dimensional parameter inversion using residual dense convolutional neural network[J]. *Journal of Hydrology*, 2023, 617: 129013.
- [59] STACKELBERG P E, BELITZ K, BROWN C J, et al. Machine learning predictions of pH in the glacial aquifer system, northern USA[J]. *Ground Water*, 2021, 59(3): 352-368.
- [60] SAHOUR H, GHOLAMI V, VAZIFEDAN M. A comparative analysis of statistical and machine learning techniques for mapping the spatial distribution of groundwater salinity in a coastal aquifer[J]. *Journal of Hydrology*, 2020, 591: 125321.
- [61] SARKAR S, DAS K, MUKHERJEE A. Groundwater salinity across India: Predicting occurrences and controls by field-observations and machine learning modeling[J]. *Environmental Science & Technology*, 2024, 58(8): 3953-3965.
- [62] TAN Z, YANG Q, ZHENG Y. Machine learning models of groundwater arsenic spatial distribution in Bangladesh: Influence of Holocene sediment depositional history[J]. *Environmental Science & Technology*, 2020, 54(15): 9454-9463.
- [63] LOMBARD M A, BRYAN M S, JONES D K, et al. Machine learning models of arsenic in private wells throughout the conterminous United States as a tool for exposure assessment in human health studies[J]. *Environmental Science & Technology*, 2021, 55(8): 5012-5023.
- [64] PODGORSKI J E, LABHASETWAR P, SAHA D, et al. Prediction modeling and mapping of groundwater fluoride contamination throughout India[J]. *Environmental Science & Technology*, 2018, 52(17): 9889-9898.
- [65] NOLAN B T, FIENEN M N, LORENZ D L. A statistical learning framework for groundwater nitrate models of the Central Valley, California, USA[J]. *Journal of Hydrology*, 2015, 531: 902-911.
- [66] MOTEVALLI A, NAGHIBI S A, HASHEMI H, et al. Inverse method using boosted regression tree and k-nearest neighbor to quantify effects of point and non-point source nitrate pollution in groundwater[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2019, 228: 1248-1263.
- [67] 黄燕鹏. 基于机器学习的区域地下水水质时空预测方法研究[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2024.
- [68] GEORGE S, DIXIT A. A machine learning approach for prioritizing groundwater testing for per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS)[J]. *Journal of Environmental Management*, 2021, 295: 113359.
- [69] SONG X H, REN H Y, HOU Z S, et al. Predicting

future well performance for environmental remediation design using deep learning[J]. *Journal of Hydrology*, 2023, 617: 129110.

[70] ROGERS L L, DOWLA F U, JOHNSON V M. Optimal field-scale groundwater remediation using neural networks and the genetic algorithm[J]. *Environmental Science & Technology*, 1995, 29(5): 1145-1155.

[71] SHI L, LI J, PALANSOORIYA K N, et al. Modeling phytoremediation of heavy metal contaminated soils through machine learning [J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2023, 441: 129904.

[72] YU Q, ZHENG Y, ZHANG P P, et al. Genetic programming-based predictive model for the Cr removal effect of in-situ electrokinetic remediation in contaminated soil[J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2023, 460: 132430.

[73] LEE J, IM J, KIM U, et al. A data mining approach to predict in situ detoxification potential of chlorinated ethenes [J]. *Environmental Science & Technology*, 2016, 50(10): 5181-5188.

[74] 曹文庚, 付宇, 南天, 等. 机器学习在地下水环境背景值与污染风险评估的应用和展望[J]. *地质学报*, 2023, 97(7): 2408-2424.

CAO W G, FU Y, NAN T, et al Machine learning model in groundwater background value and pollution risk assessment: Application and prospects[J]. *Acta Geologica Sinica*, 2023, 97(7): 2408-2424.

[75] HANOON M S, AHMED A N, FAI C M, et al. Application of artificial intelligence models for modeling water quality in groundwater: Comprehensive review, evaluation and future trends[J]. *Water, Air, & Soil Pollution*, 2021, 232(10): 411.

[76] LI P, ZHA Y, ZHANG Y, et al. Deep learning integrating scale conversion and pedo-transfer function to avoid potential errors in cross-scale transfer[J]. *Water Resources Research*, 2024, 60(3): 1-21.

[77] GUNNING D, STEFIK M, CHOI J, et al. XAI-Explainable artificial intelligence[J]. *Science Robotics*, 2019, 4(37): eaay7120.

[78] ZHONG S F, ZHANG K, BAGHERI M, et al. Machine learning: New ideas and tools in environmental science and engineering[J]. *Environmental Science & Technology*, 2021, 55(19): 12741-12754.

[79] LI J H, LU W X, LUO J N. Groundwater contamination sources identification based on the Long-Short Term Memory network [J]. *Journal of Hydrology*, 2021, 601: 126670.

[80] YADAV B, CH S, MATHUR S, et al. Estimation of in-situ bioremediation system cost using a hybrid Extreme Learning Machine (ELM)-particle swarm optimization approach [J]. *Journal of Hydrology*, 2016, 543: 373-385.

[81] CAO H L, XIE X J, SHI J B, et al. Siamese network-based transfer learning model to predict geogenic contaminated groundwaters[J]. *Environmental Science & Technology*, 2022, 56(15): 11071-11079.

[82] TOKRANOV A K, RANSOM K M, BEXFIELDL M, et al. Predictions of groundwater PFAS occurrence at drinking water supply depths in the United States[J]. *Science*, 2024, 386(6723): 748-755.

[83] TARTAKOVSKY A M, MARRERO C O, PERDIKARIS P, et al. Physics-informed deep neural networks for learning parameters and constitutive relationships in subsurface flow problems[J]. *Water Resources Research*, 2020, 56(5): 1-16.

[84] ZHAN Z, WEI Y, YEH T C J, et al. Small data insights for groundwater management[J]. *Environmental Science & Technology*, 2025, 59(7): 3339-3343.

(编辑 邵煜)

作者简介



魏亚强,上海大学副研究员、上海交通大学博士后,中国科学院大学和美国亚利桑那大学联合培养博士。主要从事土壤和地下水多介质污染物迁移转化与模拟研究,在 *Environmental Science & Technology*、*Water research*、*Journal of Hazardous Materials* 等期刊发表论文 40 余篇,其中第一或通讯作者 20 余篇。获得发明专利授权 5 项,软件著作权 6 项。主持国家自然科学基金面上基金、重点基金课题、自然科学基金青年基金、国家重点研发计划“场地土壤污染成因与治理技术”子课题等。参与完成国家 973 项目、基金委联合重点项目、国防科工局高放废物地质处置研究开发项目、中国科学院战略性先导科技专项等多项国家级研究课题。现任上海市科委评审专家、上海市

生态环境局科研项目专家库专家, *Earth Critical Zone* 期刊编委、*Eco-Environment & Health*、*Agriculture Communications*、《西北大学学报(自然科学版)》《生态与农村环境学报》《华东地质》等期刊青年编委。负责生态环境部《地下水污染模拟预测评估工作指南》修订,参与《全国地下水污染防治实施方案》《污染地块地下水修复和风险管控技术导则》编制。