

基于Transformer-CNN混合架构的地下水流预测替代模型研究

彭朝阳^{1,2}, 夏学敏^{1,2*}

¹中国地质大学(北京)地下水循环与环境演化教育部重点实验室, 北京

²上海理工大学环境与建筑学院土木工程系, 上海

收稿日期: 2025年9月28日; 录用日期: 2026年5月19日; 发布日期: 2026年5月28日

摘要

地下水数值模拟是水资源管理的重要工具, 但传统物理模型存在计算成本高、参数化复杂等局限性。本文提出一种新型的Transformer-CNN混合替代模型, 通过引入相对位置编码机制增强Transformer对序列长期依赖关系的捕捉能力, 并结合卷积神经网络(CNN)提取空间特征, 以高效预测地下水头场的时空演化。模型采用多尺度特征融合与跨模态注意力机制, 整合渗透系数场、抽水量等物理先验知识, 提升预测精度与泛化能力。基于澳大利亚东南部典型含水层的数值算例验证表明, 该模型在测试集上的决定系数(R^2)达0.993, 均方误差(MSE)为0.0011, 结构相似性指数(SSIM)为0.989, 且训练效率较基准模型(DSCNN-GRU)提升25.5%。实验结果表明, 该模型在复杂水文地质条件下显著优于现有方法, 尤其擅长捕捉长期时空依赖关系与局部异质性特征, 为地下水动态预测提供了一种高精度、高效率的解决方案。

关键词

地下水模拟, 替代模型, Transformer, 卷积神经网络, 时空预测

A Surrogate Model for Groundwater Flow Prediction Based on a Transformer-CNN Hybrid Architecture

Chaoyang Peng^{1,2}, Xuemin Xia^{1,2*}

¹MOE Key Laboratory of Groundwater Circulation and Environmental Evolution, China University of Geosciences (Beijing), Beijing

²Department of Civil Engineering, School of Environment and Architecture, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai

Received: September 28, 2025; accepted: May 19, 2026; published: May 28, 2026

*通讯作者。

文章引用: 彭朝阳, 夏学敏. 基于 Transformer-CNN 混合架构的地下水流预测替代模型研究[J]. 地球科学前沿, 2026, 16(5): 717-731. DOI: 10.12677/ag.2026.165066

Abstract

Groundwater numerical simulation is a vital tool for water resources management; however, conventional physics-based models face limitations such as high computational costs and complex parameterization. This paper proposes a novel Transformer-CNN hybrid surrogate model for efficiently predicting the spatiotemporal evolution of hydraulic head fields. The model enhances the Transformer's ability to capture long-term dependencies in sequences by introducing a relative position encoding mechanism and leveraging Convolutional Neural Networks (CNN) to extract spatial features. It incorporates multi-scale feature fusion and cross-modal attention mechanisms to integrate physical prior knowledge, such as hydraulic conductivity fields and pumping rates, thereby improving prediction accuracy and generalization capability. Validation based on a numerical case study of a typical aquifer in southeastern Australia demonstrates that the model achieves a coefficient of determination (R^2) of 0.993, a Mean Squared Error (MSE) of 0.0011, and a Structural Similarity Index (SSIM) of 0.989 on the test set. Furthermore, the training efficiency is improved by 25.5% compared to the baseline model (DSCNN-GRU). Experimental results indicate that the proposed model significantly outperforms existing methods under complex hydrogeological conditions, particularly excelling in capturing long-term spatiotemporal dependencies and local heterogeneous features. It provides a high-accuracy and efficient solution for dynamic groundwater prediction.

Keywords

Groundwater Simulation, Surrogate Model, Transformer, Convolutional Neural Network (CNN), Spatiotemporal Prediction

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

地下水作为全球水资源系统的重要组成部分,在维系生态系统平衡、保障农业灌溉和居民饮水安全方面发挥着不可替代的作用。准确模拟和预测地下水动态变化,是科学管理地下水资源、应对日益严峻的水资源短缺与污染问题的关键。传统的地下水管理依赖于基于物理过程的数值模型(如MODFLOW等),这些模型通过求解控制方程(如达西定律和质量守恒方程)来模拟地下水流和溶质运移过程。虽然物理模型在理论上具有较高的精度,但其实际应用面临构建数据需求量大、计算成本高昂、以及参数化困难等挑战[1]-[3]。

近年来,随着大数据和人工智能技术的飞速发展,机器学习(ML)方法为克服基于物理模型的局限性提供了新的解决方法。水文学家越来越多地利用机器学习方法来应对与基于物理的模型相关的挑战[4]-[6]。数据驱动的建模方法具有独特优势,它无需明确定义描述物理环境所需的全部物理关系和参数,能够通过迭代学习过程直接从观测数据中挖掘并近似模型输入与输出之间的复杂非线性关系[7],从而显著提高了模型运算的效率。在各种机器学习算法中,神经网络(NN)在建模和预测非线性时间序列数据方面已被证明尤为有效,并在某些应用场景下展现出与基于物理意义的模型相当的性能[8]。

计算能力的持续提升与多源监测数据的日益丰富,进一步推动了机器学习在地下水模拟领域的深入应用。特别是卷积神经网络(CNN)和长短期记忆网络(LSTM)等深度学习方法,凭借其强大的时空特征提取与序列建模能力,在刻画地下水系统的动态演化规律方面表现出显著潜力[9]。图神经网络(GNN)

则为处理非结构化的水文地质数据提供了新思路[10]。同时, 迁移学习、元学习等技术的引入, 有效缓解了地下水观测数据相对匮乏对模型性能的制约, 为构建更精确、更高效的地下水预测模型奠定了坚实基础。

在地下水系统替代建模的研究中, 卷积神经网络(CNNs)因其卓越的特征提取能力而被广泛应用。例如, 已有研究利用 3D-CNN 预测特定时刻的地下水流场[11]。然而, 地下水模拟的核心挑战之一在于预测连续时间序列上的动态变化, 单个 CNN 模型难以有效捕捉长期的时序依赖关系。为弥补 CNN 在时序建模上的不足, 研究者常将其与具有“记忆”功能的循环神经网络(RNNs)相结合[12]。例如, CNN 与 GRU、Bi-LSTM 等模型的耦合架构已被成功应用于地下水头预测和通量估算等任务[13] [14], 显示出混合模型在处理时空耦合问题上的优势。尽管如此, 现有混合模型仍普遍面临计算复杂度高、对长期依赖关系捕捉不够充分、以及在小样本场景下泛化能力不足等问题。

因此, 为解决地下水数值模拟中物理模型计算效率低、以及现有机器学习方法对时空特征耦合与长期依赖性刻画不足等问题, 本研究提出了一种新型的 Transformer-CNN 混合替代模型。该模型通过改进传统 Transformer 架构的位置编码机制(采用相对位置编码替代绝对位置编码), 并将其与卷积神经网络(CNN)的局部空间特征提取能力相结合, 高效捕捉地下水头场复杂的时空演化规律, 以期在提升长序列预测精度和鲁棒性的同时, 进一步优化训练效率。相对位置编码增强了模型对水文序列中元素相对关系的理解, 而交叉学习策略的引入则提升模型在小样本条件下的泛化能力。本研究将系统评估所提出的新型替代模型在地下水头场预测中的性能, 并通过与传统模型的对比实验, 验证所提出的 Transformer-CNN 混合模型在地下水头场序列预测中的精度与效率优势, 为解决地下水管理中高精度实时预测的难题提供一个更为实用的工具。

2. 研究方法

2.1. 相对位置编码的 Transformer 神经网络

为了克服传统地下水模拟方法在捕捉长程时间依赖性和处理序列长度外推问题上的局限性, 本研究对传统的 Transformer 架构进行了改进, 将固定的绝对位置编码替换为可学习的相对位置编码, 克服了传统绝对位置编码在泛化性和灵活性上的局限性。

传统 Transformer 采用如公式(1)所示的预定义正弦函数来生成绝对位置编码 $PE_{(pos,i)}$, 并将其直接加至输入嵌入向量 X 上。

$$X' = X + PE(pos), PE_{(pos,2i)} = \sin\left(\frac{pos}{10000^{2i/d}}\right), PE_{(pos,2i+1)} = \cos\left(\frac{pos}{10000^{2i/d}}\right) \quad (1)$$

这种方式存在明显缺陷: 其一, 其对序列长度的外推能力较差, 当测试序列长度超过训练时所见的长度时, 模型性能会显著下降; 其二, 无法显式地建模序列元素之间的相对位置关系(如相邻时间步的局部依赖性), 而这对于理解地下水系统的连续动态变化至关重要。

本模型引入了如公式(2)所示的相对位置编码机制。该机制不再为每个绝对位置分配一个固定的编码, 而是在自注意力计算过程中直接注入一个可学习的相对位置偏置 B_{i-j} 。

$$\text{Attention}(Q, K, V) = \text{softmax}\left(\frac{QK^T}{\sqrt{d_k}} + B_{i-j}\right)V \quad (2)$$

其中 $B_{i,j} \in \mathbb{R}^{L \times L \times h}$ 为偏置矩阵(h 为注意力头数), i, j 为序列位置索引。

由于编码仅依赖于相对距离 $i-j$, 模型天然具备平移不变性, 并对序列长度的变化具有更强的鲁棒性; 另外, 通过约束 $B_{i,j}$ 的稀疏性(如设置最大相对距离 k), 强制模型聚焦于局部上下文, 这与本文研究的地

下水运移过程的局部性特征相符; 最后, 偏置矩阵 B 作为可学习参数, 允许模型根据地下水序列预测的具体任务, 动态调整并学习最有效的位置关系模式, 避免了绝对位置编码的固定模式可能带来的局限。

在计算效率方面, 尽管相对位置编码的理论复杂度与传统注意力机制相同, 均为 $O(L^2d)$, 但由于引入了局部窗口约束 $|i-j| \leq k$, 实际计算量可降至 $O(Lkd)$ 。当 $k \ll L$ 时, 计算量减少至 k/L 倍(例如 $L=1024$, $k=32$ 时加速约 32 倍), 使得模型能够高效处理长序列数据。

相对位置编码的优越性可归纳为以下优化问题:

$$\min_B \mathcal{L}(Y, f(X, B)) \quad \text{s.t. } B_{ij} = 0 \text{ for } |i-j| > k \quad (3)$$

其中, 相较于传统绝对位置编码的固定模式, 相对位置编码通过可学习的偏置项 B 和局部性约束, 实现了对序列依赖关系更灵活、更高效的动态建模, 为后续与 CNN 模块的融合提供了良好基础, 特别适用于地下水头场这类兼具强局部相关性与连续时空依赖的物理序列建模任务。

2.2. 新型 CNN-Transformer 混合网络架构

本研究构建的新型 CNN + 相对位置 Transformer 混合模型, 用以高效处理多模态输入数据并精确预测地下水头场的时空演化。该架构完整流程如图 1 所示。

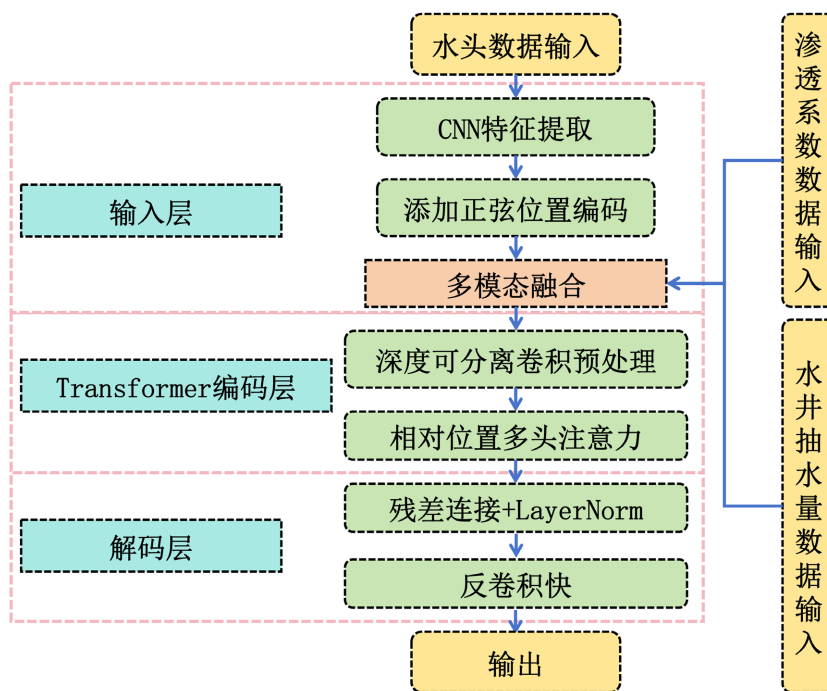


Figure 1. CNN + transformer architectural schematic diagram

图 1. CNN + Transformer 架构原理图

模型训练数据包括三类: 渗透系数场、动态水井抽水量时序数据以及连续时间序列水头场(显式为图像序列)。首先, 渗透系数场和动态水井抽水量时序数据作为后续替代模型的输入数据, 用来预测第 10、20、30、40、50 及 60 个月的输出水头场。水头场图像序列首先进行帧分离, 每帧独立通过卷积网络提取空间特征。对于非图像模态数据, 渗透系数场作为空间静态场, 先通过双线性插值重采样至与水头场相同的空间分辨率, 再经卷积层编码为与图像特征同维的张量; 抽水量数据作为动态时序变量, 按时间步对齐至水头场序列, 并通过全连接层投影至统一特征维度, 以适配图像特征表示。为增强训练数据的多

样性, 训练阶段对水头场图像采用随机裁剪与水平翻转进行数据增强。所有输入数据在送入模型前均进行归一化处理, 将像素值或物理量缩放至 $[0, 1]$ 区间, 以加速模型收敛。

采用改进的 ResNet-18 作为空间特征提取主干网络。前三个卷积块保留原始结构, 使用 3×3 卷积配合批量归一化(BN)与 ReLU 激活函数, 并通过步长为 2 的卷积进行空间下采样。在第四个卷积块中引入深度可分离卷积(DSCNN), 将标准卷积分解为逐通道卷积与 1×1 点卷积, 显著减少参数量。为进一步增强特征表达能力, 引入多尺度特征融合, 通过跳跃连接将第二、三卷积块的中层特征与深层特征拼接, 构建通道数为 $[64, 128, 256]$ 的金字塔特征结构(图 1)。此外, 在 CNN 顶层嵌入轻量级注意力模块, 首先生成空间注意力权重图突出关键区域, 再结合通道注意力(SE 模块)进行通道重标定, 最终通过特征加权实现自适应特征筛选。

相对位置 Transformer 编码器部分主要用于捕捉水头场的长期时间依赖性(图 2)。首先, 将 CNN 提取的特征序列通过 1×1 卷积投影至固定维度, 以降低后续计算复杂度。在输入 Transformer 前, 对每个时间步的特征施加 3×3 深度可分离卷积, 强化局部上下文感知。核心的多头自注意力机制采用 8 个头, 键维度设为 32, 并使用相对位置编码, 通过可学习的偏置矩阵 B (限制最大相对距离 $k = 16$)动态建模序列元素间的相对关系, 替代传统正弦位置编码, 从而增强模型对序列长度变化的鲁棒性。前馈网络由两层全连接层与 GeLU 激活函数构成, 残差连接后接 LayerNorm 进行标准化。

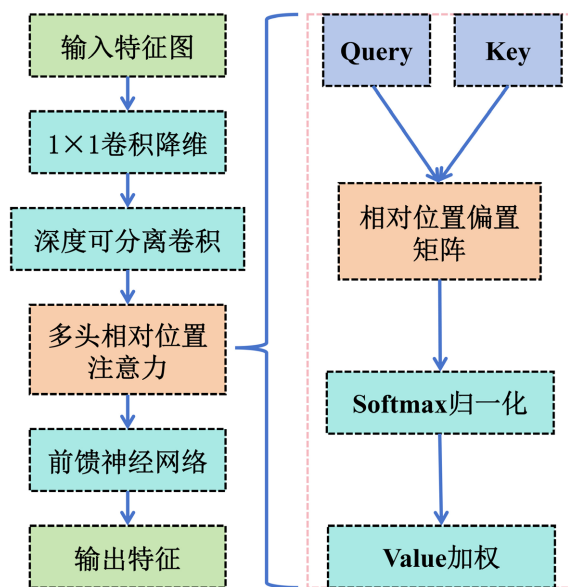


Figure 2. Schematic diagram of the relative position transformer encoder section

图 2. 相对位置 Transformer 编码器部分原理图

在跨模态特征融合模块部分, 将静态渗透系数场与动态泵送量数据经独立全连接层映射为 256 维特征向量。随后, 以这些物理参数特征作为 Query, 以 Transformer 输出的时序特征作为 Key 和 Value, 通过交叉注意力机制计算模态间关联权重。最终, 采用可学习的门控权重平衡图像特征与物理先验信息的贡献, 实现自适应融合。

在解码器部分(图 3), 研究将 Transformer 解码层与渐进式 CNN 上采样进行融合。Transformer 解码层使用对位置掩码注意力确保自回归预测时不泄露未来信息, 并通过交叉注意力连接编码器输出; 在渐进式 CNN 上采样部分, 初始特征通过反卷积从水头特征数据上采样 2 倍, 每级上采样后与编码器对应尺度特征跳跃连接, 最后一级使用亚像素卷积实现 4 倍超分。最终, 模型在 $1/2$ 与 $1/1$ 两个尺度计算重建损

失, 增强细节保留并进行多尺度预测。训练过程中, 模型使用 Adam 优化器训练 200 个 epoch, 其学习率设置为 0.001, 并采用默认的矩估计衰减率($\beta_1 = 0.9, \beta_2 = 0.999$)及 $1e^{-7}$ 的常数项 ϵ 以确保数值稳定性。

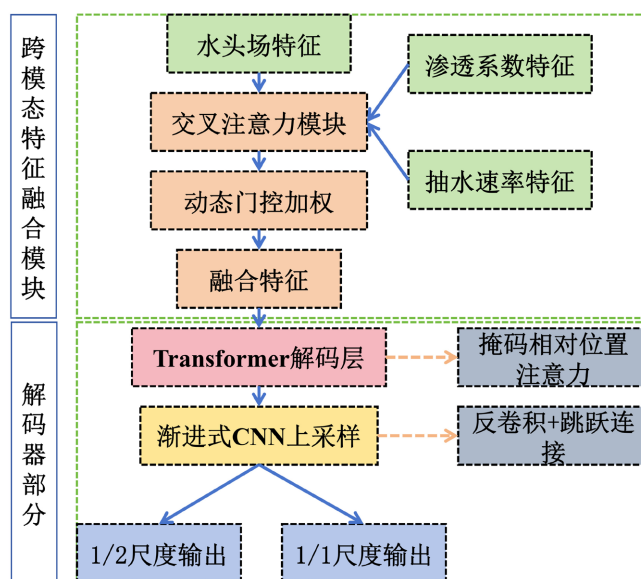


Figure 3. Schematic diagram of the cross-modal feature fusion module and decoder section
图 3. 跨模态特征融合模块与解码器部分原理图

3. 地下水数值算例

3.1. 研究区概况

本研究选取澳大利亚东南部一典型区域(东西宽 36 km, 南北长 42 km)作为数值模拟与替代模型的验证区[15]。该区地形平坦, 以石灰岩为基础, 上覆砂质土壤, 属温和温带气候, 年均降水量 480~780 mm, 潜在蒸散发量 890~1160 mm/yr, 区域地下水流向总体自东向西。地貌上以历史海侵形成的沙丘与丘间洼地为特征。在该研究区范围内划定的数值模型模拟区域含水层底部被假定为隔水边界, 而东部和西部边界则被指定为时变地下水位边界。瞬态水位边界数据(图 4(a))来源于附近观测井的监测记录(数据来源: <https://www.waterconnect.sa.gov.au/Systems/GD/Pages/Default.aspx>), 瞬态补给量与蒸散发数据(图 4(b)和图 4(c))则引自 Morgan 等人(2016)率定后的东南区域水量平衡模型[16]。

水文地质结构主要包括非承压第三系石灰岩含水层(TLA)和承压第三系封闭砂层含水层(TCSA)。TLA 为岩溶含水层, 广泛用于农业与供水。人类活动对地下水系统影响显著: 自 19 世纪起为治理渍害建设了密集排水渠系, 近年来 Penola 周边油气田的开发及农业活动的加强, 也增加了地下水污染风险。

该区域水文地质结构清晰、人类活动记录完整、监测数据较为丰富, 为构建高可信度地下水流数值模型提供了良好基础。本研究将以此区域为对象, 建立用于替代模型验证的物理数值模型, 为后续机器学习方法的可靠性评估提供支撑。

3.2. 地下水数值模型及求解方法

由于本研究的主要目标是验证深度学习替代模型的可行性, 所构建的模型旨在反映研究区的总体水文地质背景, 而非针对某一特定地点。为此, 建立了一个三维剖面模型(长 10 km, 宽 10 km, 深 105 m), 用于表征研究区内靠近石油气井的非承压含水层。该流域被离散化为 100 行、100 列和 21 层, 且所有层

均设计为可转换层。东部和西部地区的表面高程设定为 2 米。

地下水模拟采用 MODFLOW-2005 完成。从 2009 年至 2014 年的时间跨度中, 本研究选取了代表单一压力时期的 60 个月, 每个月作为一个时间步长。该模型的参数范围主要来源于前述已率定的区域模型。其他参数(如水平水力传导系数、垂直水力传导系数、初始水头、边界条件、井的抽水率和蒸散率)的范围则基于专家知识和当地水文地质信息确定。

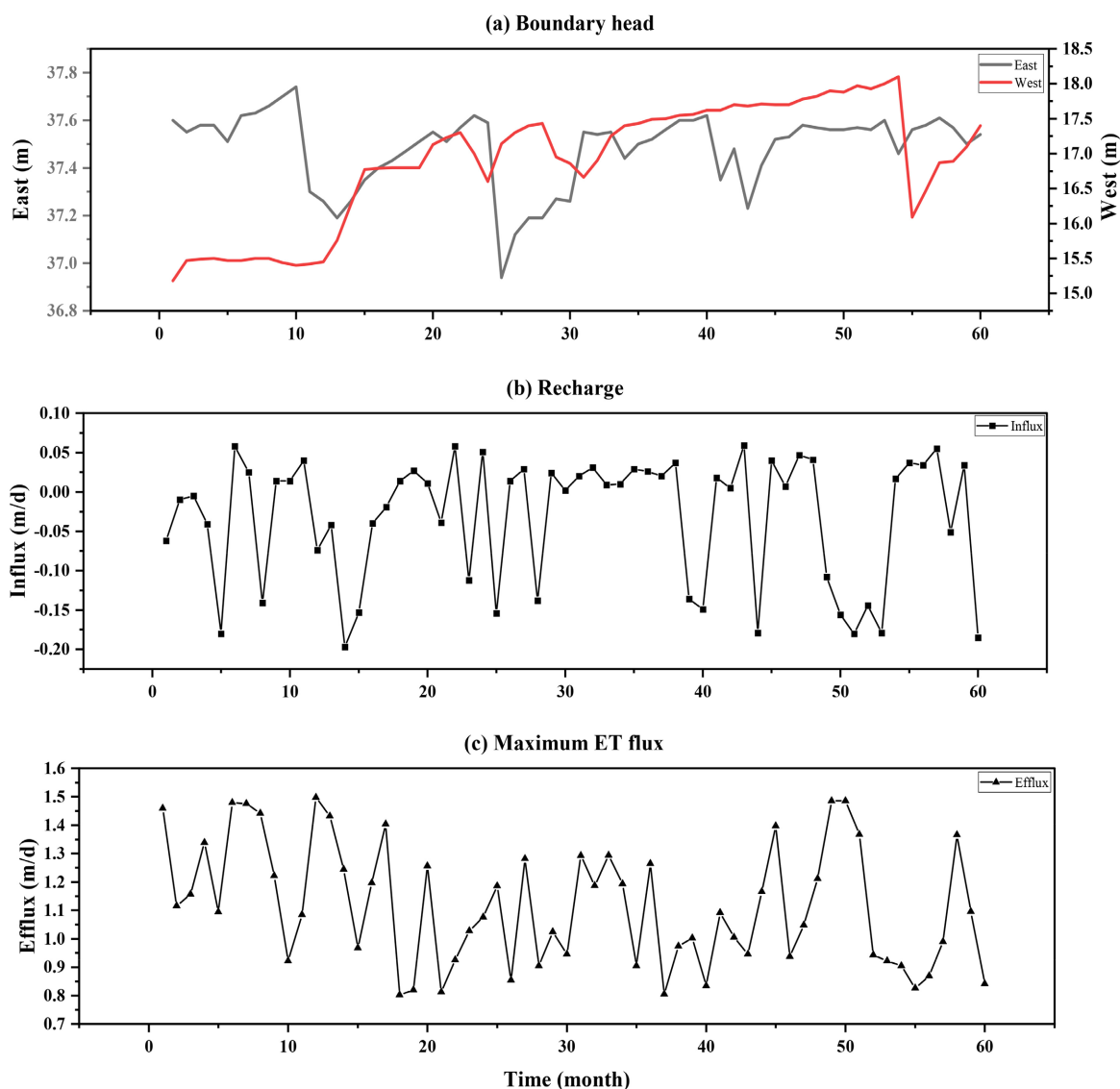


Figure 4. Transient boundary conditions used in the conceptualized mathematical model of the study area
图 4. 研究区概化数学模型中使用的瞬态边界条件

对于渗透系数场的设置, 研究区域内共设置了 64 个均匀分布的采样点, 如图 5(a)所示。根据现有研究数据, 每个采样点的渗透系数随机选自 10 至 100 m/d。随后, 采用克里金插值法, 利用采样值估算整个研究区域的渗透系数场, 如图 5(b)所示。此外, 在该算例中设计两个随机放置的抽水井: 一个位于第 5 行第 1 列, 另一个位于第 74 行第 58 列。这些井的抽水率随机选自 20 至 70 m³/d。

为构建神经网络模型的训练与测试数据集, 本研究基于前述算例随机生成了输入参数, 包括渗透系

数场及抽水井运行数据, 并利用 MODFLOW 数值模拟软件计算得到对应的水头场输出。每个样本均包含时间步长 10、20、30、40、50 和 60 的渗透系数场、两口井的抽水速率以及全局水头场。最终数据集共包含 600 个样本, 其中 540 个用于模型训练, 60 个用于测试评估。

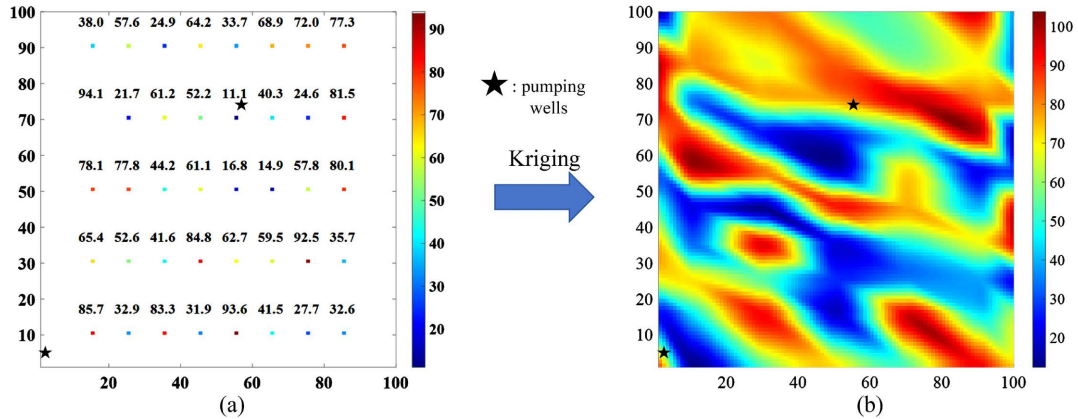


Figure 5. The hydraulic conductivity field in the study area based on the Kriging interpolation method
图 5. 基于克里金插值法的研究区渗透系数场

3.3. 评价指标

本研究采用均方误差(Mean Squared Error, MSE)作为损失函数, 以评估替代模型在训练过程中的拟合性能。MSE 值越低, 表明模型在对由算例生成的样本所包含的参数与特征关系学习效果越好, 即训练损失越小。同时, MSE 也被用于量化替代模型预测输出与数值算例输出之间的整体偏差, 其计算公式如下:

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} [x(i) - y(i)]^2 \quad (4)$$

其中, $x(i)$ 为预测水头值, $y(i)$ 为对应数值算例的输出水头值, N 为样本数量。

然而, MSE 对异常值较为敏感, 且难以反映预测结果的结构一致性。为此, 本研究进一步引入决定系数(R^2)以综合评价预测精度。 R^2 越接近 1, 说明预测值与真实值之间的相关性越强, 模型的解释能力越高。其计算公式为:

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2} \quad (5)$$

其中, \hat{y}_i 是预测值, \bar{y} 是预测结果的平均值, y_i 是观测值。

为进一步评估预测图像在视觉和结构层面的相似性, 本研究还采用结构相似性指数(Structural Similarity Index, SSIM), 从亮度、对比度和结构三个维度综合评价图像质量。SSIM 计算公式如下:

$$SSIM(x, y) = f(l(x, y), c(x, y), s(x, y)) = \frac{(2\mu_x\mu_y + C_1)(2\sigma_{xy} + C_2)}{(\mu_x^2 + \mu_y^2 + C_1)(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + C_2)} \quad (6)$$

其中, μ_x 是 x 的平均值, μ_y 是 y 的平均值、 σ_x^2 是 x 的方差、 σ_y^2 是 y 的方差、 σ_{xy} 是 x 和 y 之间的协方差, C_1 和 C_2 是用于保持稳定性的常数。

此外, 考虑到训练模型对每组预测图像(6 幅图像)的生成时间小于 5.625 毫秒, 可以忽略不计, 因此使用训练时间来评估模型效率。

4. 数值试验结果与讨论

4.1. Transformer-CNN 替代模型效果分析

为评估本研究提出的 Transformer-CNN 模型在训练过程中的性能表现, 选用已在同类研究中验证有效的 DSCNN-GRU 模型作为对比基准[17], 并以前述数值算例作为统一实验场景。两种模型在训练过程中的 MSE 变化如图 6 所示, 其在收敛速度与最终精度方面呈现出显著差异。DSCNN-GRU 模型在前 50 个训练周期内表现出较快的收敛趋势, MSE 从初始值 0.127 迅速下降至 0.004, 显示出良好的初始学习能力; 然而在后续训练中改进幅度明显减缓, 最终 MSE 稳定在约 0.0012。相比之下, Transformer-CNN 模型在整个训练过程中均保持平稳优化, MSE 从 0.077 开始持续下降, 最终达到 0.0038, 在整体收敛稳定性和最终精度方面均优于对比方法。

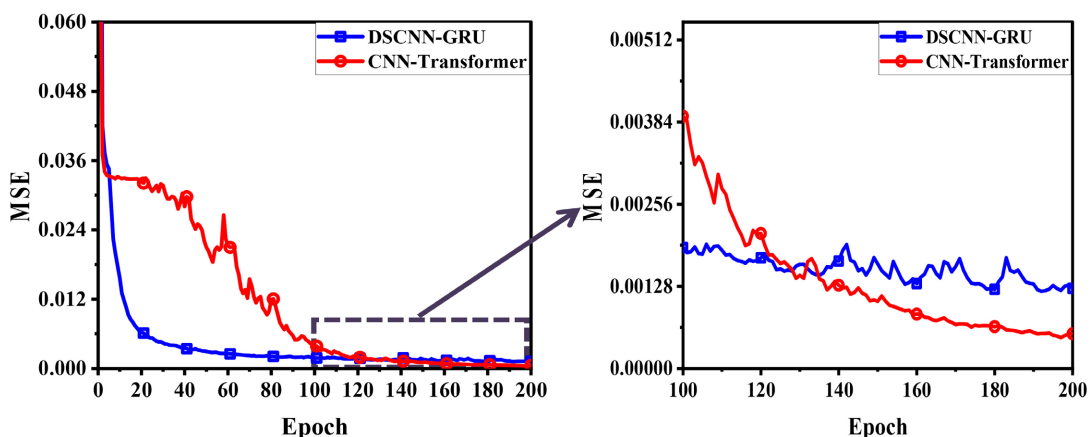


Figure 6. Training convergence curve of two models
图 6. 两种模型训练过程收敛曲线

这种性能差异主要源于两种模型在架构设计上的本质区别。DSCNN-GRU 模型融合了卷积神经网络的空间特征提取能力与门控循环单元的时序建模能力, 虽在局部序列模式捕捉方面表现良好, 但对长距离依赖关系的建模仍存在固有局限。相比之下, 本文提出的 Transformer-CNN 模型引入了自注意力机制, 能够全局感知序列中不同位置特征间的相互作用, 有效克服了循环神经网络在长序列训练中常见的梯度消失或爆炸问题。

从优化过程来看, Transformer-CNN 展现出更为平滑的收敛轨迹, 反映出其训练过程具有更好的稳定性。而 DSCNN-GRU 在训练中期出现的损失平台期, 暗示其可能陷入局部最优或面临梯度更新不足的困境。特别在训练后期(epoch > 100), 当 DSCNN-GRU 的性能提升趋于饱和时, Transformer-CNN 仍保持持续优化能力, 说明该架构在模型表达能力和优化效率方面具备明显优势。上述实验结果与两类模型的理论特性一致, 进一步验证了 Transformer-CNN 结构在当前任务中的有效性和先进性。

DSCNN-GRU 与 Transformer-CNN 两种模型在测试集上的预测性能量化结果如图 7 所示。本文所提出的 Transformer-CNN 模型在所有关键指标上均优于 DSCNN-GRU 基准方法, 显示出系统性优势。在预测精度方面, Transformer-CNN 的 R^2 值达到 0.993, 相比 DSCNN-GRU 的 0.974 提升了约 1.95%, 反映出其输出与真实值之间具有更强的线性相关程度; SSIM 值从 0.981 提高至 0.989, 说明生成水头场在视觉结构和局部特征保留方面更为接近真实情况。尤为显著的是 MSE 指标, Transformer-CNN 的数值(0.0011)较 DSCNN-GRU (0.0052)大幅降低 78.8%, 表明新模型在整体误差控制方面具有明显优势。

通过对 DSCNN-GRU 与 Transformer-CNN 模型性能差异的深入分析, 可以发现其根本原因源于二者

在架构设计上的本质区别。DSCNN-GRU 作为已有研究中采用的卷积 - 循环混合模型, 虽在局部特征提取和序列建模方面具有一定优势, 但其 RNN 结构在处理长距离依赖时仍存在梯度衰减与串行计算瓶颈。相比之下, 本文提出的 Transformer-CNN 模型通过引入自注意力机制, 不仅能有效捕捉全局特征关系, 还显著提升了时序建模中的并行化能力。

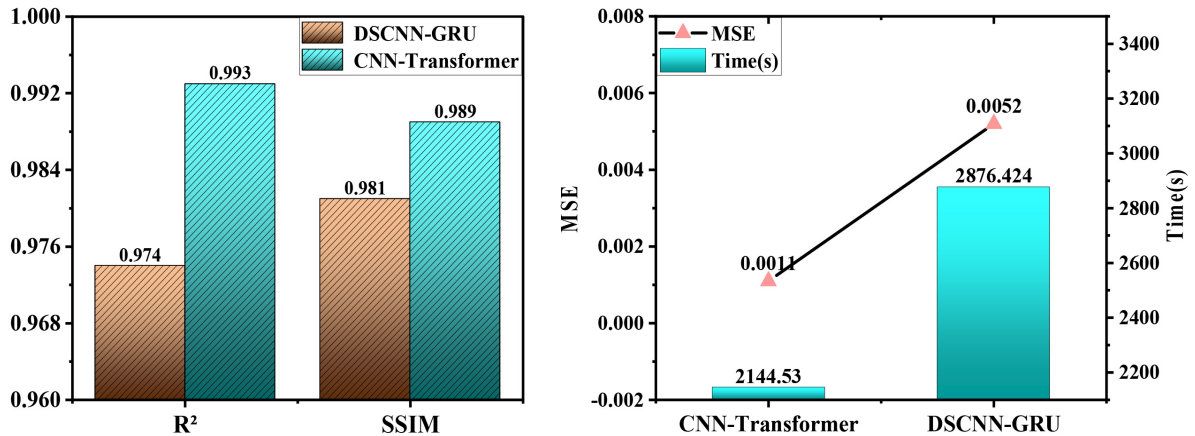


Figure 7. Comparison of prediction performance metrics for the two models
图 7. 两种模型预测性能评价指标对比

值得注意的是, Transformer-CNN 在实现预测精度全面提升的同时, 训练时间由 DSCNN-GRU 的 2876.42 秒缩短至 2144.53 秒, 效率提升达 25.5%。这一结果打破了深度学习领域中常见的“精度 - 效率”权衡关系, 其主要归因于 Transformer 架构的并行计算特性与交叉学习机制, 有效克服了传统 RNN 在长序列处理中的串行计算限制。

进一步从研究区代表性点位水头的预测结果与真实结果的拟合对比(图 8)可知, DSCNN-GRU 与 Transformer-CNN 模型的预测结果均表现出良好的整体拟合效果, 紧密分布在 $y = x$ 参考线附近, 显示出优异的拟合能力。上述结果不仅验证了 CNN 与 Transformer 混合架构在地下水模拟任务中的有效性, 也为替代模型的设计提供了重要思路, 即通过增强全局感知能力与并行化计算结构, 可在提升精度的同时实现效率优化。

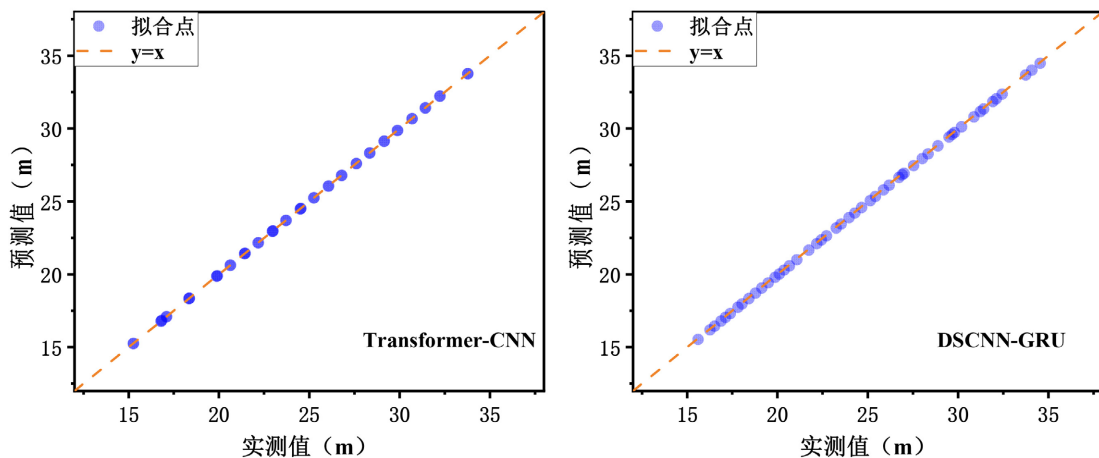


Figure 8. Fit between predicted and true values from the surrogate model at different locations
图 8. 不同位置替代模型预测值与真实值拟合结果

4.2. 替代模型性能验证

为系统验证两类替代模型在实际水文地质场景中的预测性能, 本研究进一步随机选取三组测试样本进行对比分析。所有算例样本均采用不同的渗透系数场及抽水量配置, 其余初始条件保持一致, 确保各组实验在理论复杂度上具有可比性。

图中分别表示原水头场数据、Transformer-CNN 预测结果、DSCNN-GRU 预测结果、原水头场与 Transformer-CNN 预测的绝对差值、原水头场与 DSCNN-GRU 预测的绝对差值。为便于系统比较, 所有图示均选用第 10、20、30、40、50 及 60 个月的水头场数据。

图 9 展示了 Transformer-CNN 与 DSCNN-GRU 两种替代模型对于随机选取输入样本 A 的预测结果, 从时间序列来看 Transformer-CNN 模型的预测误差随模拟时间延长略有增加, 而 DSCNN-GRU 模型的误差在整个模拟期内基本保持稳定, 甚至呈现微弱下降趋势。尽管如此, 在整个模拟期内, Transformer-CNN 的误差均值仍显著低于 DSCNN-GRU。空间分布上, 两种模型的高误差区域呈现明显分区特征: Transformer-CNN 的误差主要集中在东北部, 而 DSCNN-GRU 的误差则集中于西南部。值得注意的是, 两模型在对向区域均出现局部误差高值, 表明在断层边界等复杂地质界面附近的预测能力仍有提升空间, 这可能与当前模型对局部地质结构的表征能力不足有关。

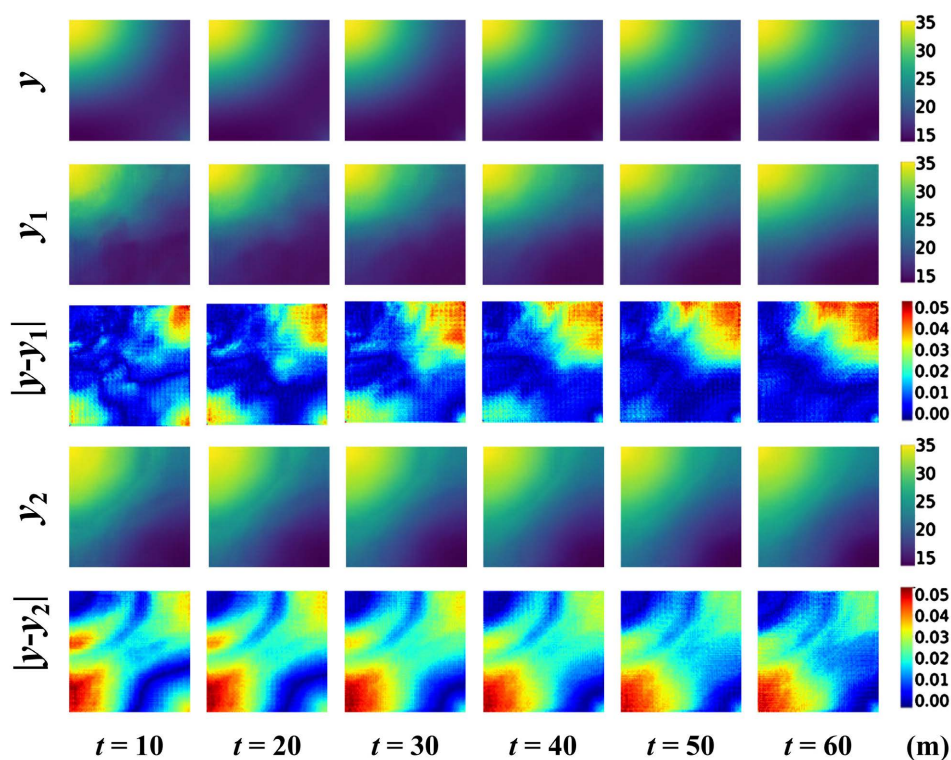


Figure 9. A Comparison of predicted hydraulic head fields from the two models based on random input sample A

图 9. 基于随机输入样本 A 的两种模型预测水头场对比

图 10 (基于随机输入样本 B)进一步揭示了模型对空间异质性的响应能力。两种模型的误差均呈现东南低、西北高的分布格局, 与研究区已知地质构造走向一致。然而在西北部高误差区域, Transformer-CNN 的误差斑块面积明显更小且边界更为清晰, 显示出其对复杂地质边界更强的识别能力。具体表现为: Transformer-CNN 在水头梯度变化区域与真实值的吻合度更高, 且能有效捕捉真实水头场中的局部特征

(如中部小范围高值区), 而 DSCNN-GRU 的预测结果则出现明显的特征平滑现象。这种差异体现了 Transformer 架构通过自注意力机制实现多尺度特征自适应处理的优势。特别值得注意的是, 两模型在东北均质区域的预测精度相当, 但在西北非均质区域性能差距显著扩大, 凸显了 Transformer-CNN 在处理空间异质性方面的卓越性能。

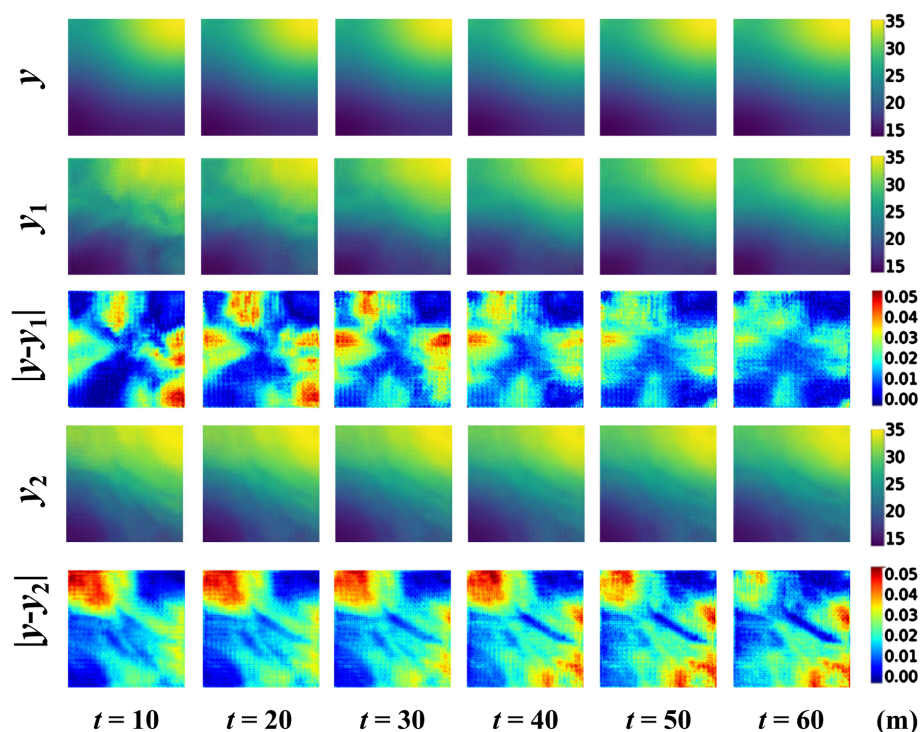


Figure 10. A comparison of predicted hydraulic head fields from the two models based on random input sample B
图 10. 基于随机输入样本 B 的两种模型预测水头场对比

对比图 11 (基于随机输入样本 C) 中 Transformer-CNN 与 DSCNN-GRU 两种替代模型预测结果, 从空间格局重建精度分析, Transformer-CNN 的预测结果与真实水头场高度吻合, 成功再现了三个关键特征: 西南部均质区域的平缓水头梯度、中部过渡带的等值线弯曲形态以及东南断层带的急剧水头变化。相较之下, DSCNN-GRU 在这些特征区域均出现不同程度的平滑效应, 特别是在水头变化细微区域表现出明显的边界模糊。时间维度上, 两模型在短期预测($t = 10 \sim 20$ 月)中性能相近, 但随着预测时长增加, DSCNN-GRU 的误差累积速率显著更快。至 $t = 60$ 月时, Transformer-CNN 在复杂区域的误差控制在 0.1 m 以内, 而 DSCNN-GRU 的误差达到 0.15~0.5 m, 这一结果印证了 Transformer 架构在长期依赖建模方面的理论优势, 其自注意力机制能够有效维持跨时间步的特征关联性。

实验结果表明, Transformer-CNN 模型在地下水溶质运移预测中展现出显著优势: 其通过自注意力机制和相对位置编码, 在预测精度($R^2 = 0.993$, $MSE = 0.0011$, $SSIM = 0.989$)、计算效率(训练时间缩短 25.5%)和长期依赖建模能力上全面超越 DSCNN-GRU 模型, 尤其在复杂地质区域(如断层边界)和长期时间序列预测中表现更优。同时, Transformer-CNN 在多尺度特征融合和局部细节保留方面更具优势, 而 DSCNN-GRU 则适用于均质区域的短期预测。研究结果验证了 Transformer-CNN 架构在时空特征建模中的有效性, 为高精度、高效率的地下水动态预测提供了新方法, 未来可进一步优化模型对高非线性数据的适应性及实际应用场景的泛化能力。

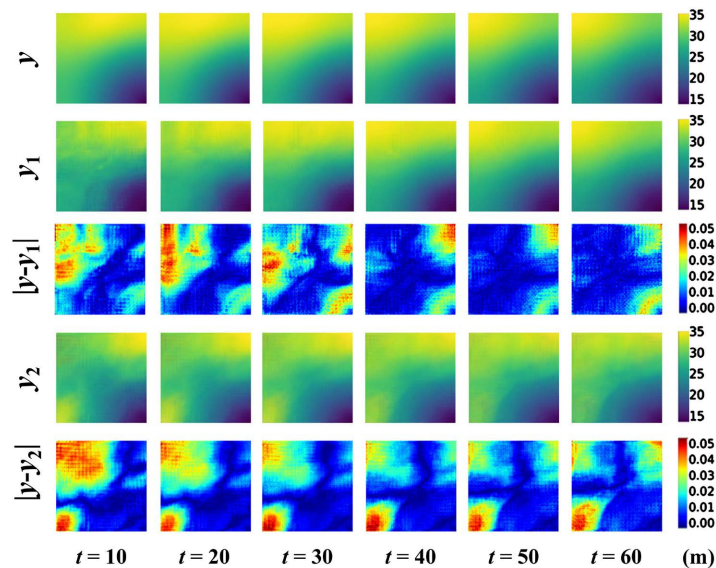


Figure 11. A Comparison of predicted hydraulic head fields from the two models based on random input sample C
图 11. 基于随机输入样本 C 的两种模型预测水头场对比

4.3. 局限性讨论

尽管本模型在水头预测任务中展现了良好的性能, 但作为一项基于数据驱动的研究, 它仍存在一些固有的局限性。首先, 模型的预测性能与训练数据的覆盖度和代表性高度相关。预测误差较大的区域通常出现在训练数据中存在抽水井情况下。这表明当前模型在数据分布之外的泛化能力有限, 其适用边界受到训练集所表征物理场景的制约。

与物理信息神经网络(PINNs)等将控制方程直接嵌入损失函数的方法相比, 本研究的 Transformer-CNN 模型在严格保证物理一致性方面存在不足。然而, 这种设计也保证了本模型更高的计算效率和从训练数据中学习复杂非线性映射的能力。未来的工作将着眼于探索一种混合建模框架, 旨在将物理约束以软形式(如物理损失项)引入当前高效的数据驱动架构中, 以期在保持计算效率的同时, 增强模型的物理合理性与外推能力。

5. 结论

本研究成功开发并验证了一种新型的 CNN-Transformer 混合架构, 作为传统物理驱动地下水数值模型的高效替代模型。通过将改进的相对位置编码 Transformer 与多尺度 CNN 特征提取器相结合, 该模型在保持高计算效率的同时, 显著提升了地下水流场时空预测的精度与稳健性。系统实验表明, 与已有的 DSCNN-GRU 模型相比, 本文提出的 Transformer-CNN 模型在 R^2 、MSE 和 SSIM 等关键指标上均表现出系统性优势, 尤其在水文地质条件复杂、空间异质性强的区域展现出更优异的性能。其卓越表现主要归因于自注意力机制对长程依赖关系的有效捕捉, 以及并行化架构带来的训练效率提升。研究成果为地下水管理提供了高精度、高效率的模拟工具, 特别适用于需要快速情景分析和水污染风险评价的实际应用场景。未来工作将聚焦于融入物理约束机制、扩展至更复杂的水文地质条件, 以及探索在多模态数据融合方面的进一步应用。

致 谢

本研究由地下水循环与环境演化教育部重点实验室开放课题资助。

基金项目

地下水循环与环境演化教育部重点实验室开放课题, 项目名称: 非完整物理机制下的湿地演替带重金属迁移转化研究, 项目编号: 202301。

参考文献

- [1] Luo, J., Ma, X., Ji, Y., Li, X., Song, Z. and Lu, W. (2023) Review of Machine Learning-Based Surrogate Models of Groundwater Contaminant Modeling. *Environmental Research*, **238**, Article 117268. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2023.117268>
- [2] Müller, J., Park, J., Sahu, R., Varadharajan, C., Arora, B., Faybishenko, B., *et al.* (2021) Surrogate Optimization of Deep Neural Networks for Groundwater Predictions. *Journal of Global Optimization*, **81**, 203-231. <https://doi.org/10.1007/s10898-020-00912-0>
- [3] Taccari, M.L., Nuttall, J., Chen, X., Wang, H., Minnema, B. and Jimack, P.K. (2022) Attention U-Net as a Surrogate Model for Groundwater Prediction. *Advances in Water Resources*, **163**, Article 104169. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2022.104169>
- [4] Ali, A.S.A., Jazaei, F., Clement, T.P. and Waldron, B. (2024) Physics-Informed Neural Networks in Groundwater Flow Modeling: Advantages and Future Directions. *Groundwater for Sustainable Development*, **25**, Article 101172. <https://doi.org/10.1016/j.gsd.2024.101172>
- [5] Secci, D., A. Godoy, V. and Gómez-Hernández, J.J. (2024) Physics-Informed Neural Networks for Solving Transient Unconfined Groundwater Flow. *Computers & Geosciences*, **182**, Article 105494. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2023.105494>
- [6] Zhan, Y., Guo, Z., Yan, B., Chen, K., Chang, Z., Babovic, V., *et al.* (2024) Physics-Informed Identification of PDEs with LASSO Regression, Examples of Groundwater-Related Equations. *Journal of Hydrology*, **638**, Article 131504. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2024.131504>
- [7] Sun, J., Hu, L., Li, D., Sun, K. and Yang, Z. (2022) Data-Driven Models for Accurate Groundwater Level Prediction and Their Practical Significance in Groundwater Management. *Journal of Hydrology*, **608**, Article 127630. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2022.127630>
- [8] Kouadri, S., Pande, C.B., Panneerselvam, B., Moharir, K.N. and Elbeltagi, A. (2022) Prediction of Irrigation Groundwater Quality Parameters Using ANN, LSTM, and MLR Models. *Environmental Science and Pollution Research*, **29**, 21067-21091. <https://doi.org/10.1007/s11356-021-17084-3>
- [9] Zhao, Y., Yang, L., Pan, H., Li, Y., Shao, Y., Li, J., *et al.* (2025) Spatio-Temporal Prediction of Groundwater Vulnerability Based on CNN-LSTM Model with Self-Attention Mechanism: A Case Study in Hetao Plain, Northern China. *Journal of Environmental Sciences*, **153**, 128-142. <https://doi.org/10.1016/j.jes.2024.03.052>
- [10] Bai, T. and Tahmasebi, P. (2023) Graph Neural Network for Groundwater Level Forecasting. *Journal of Hydrology*, **616**, Article 128792. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2022.128792>
- [11] Elmorsy, M., El-Dakhkhni, W. and Zhao, B. (2022) Generalizable Permeability Prediction of Digital Porous Media via a Novel Multi-Scale 3D Convolutional Neural Network. *Water Resources Research*, **58**, e2021WR031454. <https://doi.org/10.1029/2021wr031454>
- [12] Vu, M.T., Jardani, A., Massei, N. and Fournier, M. (2021) Reconstruction of Missing Groundwater Level Data by Using Long Short-Term Memory (LSTM) Deep Neural Network. *Journal of Hydrology*, **597**, Article 125776. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2020.125776>
- [13] Nan, T., Cao, W., Wang, Z., Gao, Y., Zhao, L., Sun, X., *et al.* (2023) Evaluation of Shallow Groundwater Dynamics after Water Supplement in North China Plain Based on Attention-GRU Model. *Journal of Hydrology*, **625**, Article 130085. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2023.130085>
- [14] Ghasemlounia, R., Gharehbaghi, A., Ahmadi, F. and Saadatnejadgharahassanlou, H. (2021) Developing a Novel Framework for Forecasting Groundwater Level Fluctuations Using Bi-Directional Long Short-Term Memory (Bilstm) Deep Neural Network. *Computers and Electronics in Agriculture*, **191**, Article 106568. <https://doi.org/10.1016/j.compag.2021.106568>
- [15] Yu, X., Cui, T., Sreekanth, J., Mangeon, S., Doble, R., Xin, P., *et al.* (2020) Deep Learning Emulators for Groundwater Contaminant Transport Modelling. *Journal of Hydrology*, **590**, Article 125351. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2020.125351>
- [16] Morgan, L.K., Harrington, N., Werner, A.D., Hutson, J.L., Woods, J. and Knowling, M.J. (2016) South East Regional Water Balance Project-Phase 2 Development of a Regional Groundwater Flow Model. Goyder Institute for Water Research

Technical Report Series, Goyder Institute for Water Research.

- [17] Li, X., Peng, C., Zhao, Y. and Xia, X. (2025) A Hybrid DSCNN-GRU Based Surrogate Model for Transient Groundwater Flow Prediction. *Applied Sciences*, **15**, Article 4576. <https://doi.org/10.3390/app15084576>