薛锦雯,罗建男,韩 婧,等.含水层非均质性表征方法对地下水数值模拟结果影响的对比研究 [J]. 中国环境科学, 2025,45(11):6331-6342.
Xue J W, Luo J N, Han J, et al. Comparative study of aquifer heterogeneity characterization methods on groundwater numerical simulation results [J]. *China Environmental Science*, 2025,45(11):6331-6342.

含水层非均质性表征方法对地下水数值模拟结果影响的对比研究

薛锦雯[1],罗建男[1*],韩 婧[2],孟碧珊[1] (1.吉林大学新能源与环境学院,吉林 长春 130021；2.内蒙古自治区地质调查研究院,内蒙古 呼和浩特 010000)

摘要：含水层非均质性表征是提高地下水数值模型精度的关键,直接影响地下水资源评价与污染防治的可靠性;因此以内蒙古通辽市科尔沁区努古斯台水源地为例,采用参数分区法、普通克里金插值法和序贯高斯模拟(Sequential Gaussian Simulation, SGS)刻画承压含水层渗透系数与贮水率的空间分布,构建非均质各向同性地下水流模型及溶质运移模型,分析不同表征方法对模型预测的影响.结果表明:与参数分区法相比,由克里金插值与 SGS 表征渗透系数场产生的模拟水位与实测水位拟合的 R^2、NSE 更高,RMSE 更低,提升了模型精度;抽水情景下,参数分区法在子区边界处因渗透系数阶跃突变引发水力坡度陡变,导致等水位线形态发生改变;参数分区法因过度简化非均质性,污染羽展布范围对子区间渗透系数估值敏感,而 SGS 由于表征时保留原始方差,预测的污染羽展布范围更小,较为保守;贮水率的表征方法对水流及溶质运移结果影响不显著.在污染修复实践中,勘探点布设密度受限是常见约束,方法选择应契合数值模拟目标:若需划定最大污染风险管辖区,选择克里金插值更合适;若需平衡空间变异性与局部不确定性(如精准修复设计),则 SGS 更具优势.研究结果为地下水精准管理与污染风险防控中模型方法的选择提供了依据.

关键词：含水层非均质性表征方法；地下水数值模拟；地下水模型的预测；溶质运移
中图分类号：X53 **文献标识码**：A **文章编号**：1000-6923(2025)11-6331-12

Comparative study of aquifer heterogeneity characterization methods on groundwater numerical simulation results. XUE Jin-wen[1], LUO Jian-nan[1*], HAN Jing[2], MENG Bi-shan[1] (1.College of New Energy and Environment Institute, Jilin University, Changchun 130021, China；2.Geological Survey Institute of Inner Mongolia, Hohhot 010000, China). *China Environmental Science*, 2025,45(11)：6331~6342

Abstract：Aquifer heterogeneity characterization was recognized as crucial for enhancing the accuracy of groundwater models and the reliability of resource assessments and pollution control strategies. The Nugusitai Water Source, located in the Horqin District of Tongliao City, Inner Mongolia, was selected as a case study. Spatial distributions of hydraulic conductivity (K) and storativity (S_s) in a confined aquifer were characterized using three methods: Parameter Zoning, Ordinary Kriging (OK), and Sequential Gaussian Simulation (SGS). Heterogeneous isotropic models for flow and transport were constructed to evaluate the predictive impacts of each method.Results indicated that K fields generated through OK and SGS were associated with improved fits to observed hydraulic heads compared to Zoning, as evidenced by higher R^2 and Nash-Sutcliffe efficiency (NSE) values and lower root mean square error (RMSE). In pumping scenarios, the Zoning approach was found to cause abrupt changes in hydraulic gradients along sub-zone boundaries due to discontinuities in K values, resulting in distorted equipotential lines. The oversimplification inherent in Zoning also led to high sensitivity of predicted contaminant plume extent to the estimated K values within sub-zones. By contrast, SGS, which preserved spatial variance, produced more conservative and spatially constrained plume predictions. Storativity characterization methods were determined to have a negligible effect on model outcomes. Under common constraints such as limited borehole density, it was concluded that method selection should be aligned with specific objectives of the numerical simulation: OK was more suitable for delinerating the maximum Pollution risk Control zone, while SGS was more suitable for balancing spatial variability with local uncertainty, such as in precision remediation applications. This study provided empirical support for the selection of appropriate modeling methods in groundwater management and pollution risk mitigation efforts.

Key words：aquifer heterogeneity characterization；groundwater numerical simulation；groundwater model prediction；contaminant transport

收稿日期：2025-04-11
基金项目：国家重点研发计划项目(2024YFC3713100);国家自然科学基金资助项目(42472317);内蒙古自治区水资源基础调查专题调查评价项目(NMGZCS-G-F-241133)

* 责任作者, 教授, luojiannan01@126.com

含水层非均质性(由渗透系数、贮水率等参数表征)是地下水流动及溶质运移的重要影响因素[1-2],但传统离散点水文地质参数观测数据难以展示其空间连续分布特征[3],导致数值模型预测结果产生不确定性[4-6],此类不确定性严重制约着地下水资源评价与污染精准溯源的可靠性.因此,对含水层非均质性的准确刻画在地下水数值模拟中占据着至关重要的地位.

为了精细刻画含水层非均质性,进而得到可靠的地下水模型预测结果,研究者尝试通过参数表征的技术手段来解决这一问题[7].常用的参数表征方法包括参数分区法、插值法(如克里金插值)、基于地质统计学的随机建模方法(如序贯高斯模拟(Sequential Gaussian Simulation, SGS))及基于机器学习的方法等[8].参数分区法(Zonation Method)最早由 Carrera 等[9]提出,作为为基于地质单元划分的静态分区法,用于解决地下水模型中的参数估计问题;Tsai 等[10]提出了结合地质统计学的动态分区,显著提高了参数估计精度;克里金插值法由南非学者 Krige[11]提出,经 Matheron 系统化为地统计学理论,通过变异函数量化空间相关性[12],普通克里金法(Ordinary Kriging, OK)因其无偏性和最优性成为主流方法[13];序贯高斯模拟(SGS)20 世纪 90 年代由 Deutsch 等[14]和 Goovaerts 等[15]发展,基于随机模拟生成多参数场,能保留参数的空间变异结构,但计算复杂度高.现如今,对于上述表征方法的适用性仍存在争议,参数分区法易忽视局部变异,普通克里金插值因平滑效应错误估计参数异质性,SGS 虽然有效避免了平滑效应[16],但是对数据量和计算资源要求较高.

近年来,诸多研究已认识到非均质性表征方法的选择对地下水模型模拟结果存在潜在影响,并开展了一系列对比工作.例如,岳松梅等[17]对比了多种地质统计方法在渗透系数场表征中的应用,并分析了其对污染物运移的影响;蒋立群等[1]通过室内砂箱实验比较了等效均质、克里金插值及水力层析等方法,强调了非均质性刻画对溶质运移预测的重要性;然而多数研究侧重于其在理想条件、单一水文地质过程中的应用效果对比.然而,在真实、复杂的水文地质场中,系统性地评估多种表征方法对多参数(K、S_s)协同表征以及其对地下水流与溶质运移模型预测结果的综合影响,仍缺乏深入探讨.

因此,本研究利用内蒙古通辽科尔沁区努古斯台水源地承压含水层为例,基于实际勘探与抽水试验数据,构建水文地质参数(渗透系数、贮水率)的先验分布特征;采用参数分区法、普通克里金插值及 SGS 三类典型方法生成参数随机场,揭示其空间非均质性表征差异.通过 GMS 平台建立地下水数值模型,系统对比分析了不同表征方法对模拟水位拟合精度、开采情景下流场形态、以及污染物运移的综合影响.研究成果对优化超采区水资源管理、污染场地修复方案具有重要实践价值,为地下水可持续开发提供科学依据.

1 研究区概况及地下水数学模型的建立求解

1.1 研究区概况

水源区位于内蒙古通辽市科尔沁区和科尔沁左翼后旗(43°22′N~43°32′N;122°06′E~122°39′E).研究区位于中温带半干旱季风气候带.年平均降雨量为 363.3mm,主要集中在 5 月至 9 月,而年平均蒸发量为 1376.7mm,主要集中在 4 月至 10 月.研究区地形趋势为西南高,东北低,地貌可分为冲积平原、河谷和风积沙丘.根据含水层的地质时代、地下水赋存条件和埋藏条件,含水层系统可划分为二个亚系统:第四系松散岩类孔隙潜水含水层亚系统和第四系孔隙承压水含水层亚系统.潜水含水层岩性以细砂、粉砂为主,局部夹有粉质黏土透镜体,承压含水层岩性以粉砂、细砂为主,局部还有砾砂及粉质黏土透镜体.根据研究区钻孔数据,两个含水层之间存在厚度在 1.7~12.0m 的粉质黏土层,该层构成弱透水层,潜水与承压水之间通过弱透水层发生垂向水量交换(越流).潜水含水层的主要补给来源为降雨入渗、地表水补给和径流补给,此外还存在少量的下层承压水的越流补给.主要排泄项包括蒸发、径流排泄和人工开采.承压水缓慢由南向北、西北流,水力梯度约为 0.75‰,以侧向径流、人工开采和越流的形式排泄.

1.2 地下水数学模型的建立

1.2.1 水文地质概念模型的建立 研究区位于科尔沁区及科尔沁左翼后旗西辽河平原地带, 见图 1.基于研究区水文地质条件,该区含水层垂向上可以概化为 3 层,分别为:潜水含水层、弱透水层及承压含水层.在水平方向上,由于潜水含水层的东、西边

界和承压含水层的西边界与地下水流动方向基本平行,因此将其概化为隔水边界,其余边界均概化为给定流量边界;在垂直方向上,含水层系统上部概化为与外界进行水量交换的边界,下部为隔水边界;潜水含水层与承压含水层之间的水力连接是通过其间弱透水层发生越流实现的;在研究区内,潜水及承压含水层有较为平缓的天然水力坡度,符合达西定律,水流运动过程中,各渗流要素均会随着时间发生变化,该区域的地下水流动可以被大致描述为非均质、各向同性、非稳定的准三维流;水文地质参数随空间变化,概化为非均质各向同性.由于承压水是该水源区的主要开采含水层,因此本模拟目的层为承压含水层.综上所述,该研究将水文地质概念模型概化为非均质、各向同性、准三维、非稳定流模型.

研究区水文地质参数的核心数据来源于该区域系统性的水文地质勘探工作项目的钻孔资料.研究区共施工 36 组勘探孔(图 1),为本模型提供了坚实的数据基础,基于这些钻孔数据,参数获取方法如下:针对目的层第四系承压含水层实施了完整井抽水试验.基于同一次试验数据,综合应用了稳定流和非稳定流分析方法,利用裘布依公式计算渗透系数(K);采用泰斯配线法、泰斯恢复法及库伯-雅各布直线法求取渗透系数(K)及弹性释水系数(S).模型所需的贮水率(S_s)由弹性释水系数(S)结合含水层厚度转换获得.上述抽水试验计算结果经过统计分析,确定了承压含水层渗透系数取值范围为(2.0m/d,18.0m/d),贮水率取值范围为($1.0\times10^{-10}m^{-1}$,$2.0\times10^{-6}m^{-1}$),客观反映了参数的空间变异性.

基于上述钻孔试验获得的离散点参数值(K,S_s),首先利用参数分区法是结合地貌岩性特征将研究区划分为多个子区,子区内可以认为渗透系数是相同的值,适用于大尺度结构性非均质性表征,高效但忽略局部变异;采用克里金插值方法进行空间估计,该方法基于区域化变量理论,通过拟合变异函数量化参数的空间自相关结构,对未采样点进行最优无偏线性估计,生成一个反映区域趋势的“平滑”参数场,适用于连续平稳参数,会因平滑效应无法表征小尺度的非均质性;随后,为更充分刻画含水层固有的小尺度随机非均质性及评估模型参数不确定性,应用序贯高斯模拟(SGS)方法,该方法在满足点观测数据和克里金所建立的变异函数模型的约束下,通过序贯模拟生成非光滑的随机参数场实现,这些实现能表征如砂体、透镜体分布等地质结构的不确定性.随后在模型的参数设置时将承压含水层渗透系数与贮水率设为随机变量(分别用参数分区、克里金插值、SGS 表征).

潜水含水层水文地质参数根据研究区以往的勘察报告中的参数值来确定.此外,潜水给水度取用研究区资料计算值 0.17,研究区大气降雨入渗系数主要分为两个部分,一部分是研究区洪河以西北部水位埋藏深度大于 10m 的冲积平原,采用研究区资料中计算的数值 0.20,另一部分是洪河以东南部水位埋藏深度小于 5m 的冲积平原、沙丘,采用研究区资料中计算的数值 0.265.潜水蒸发的临界深度为 5m,研究区地下水为埋深小于 5m 的区域潜水蒸散发系数为 0.25.

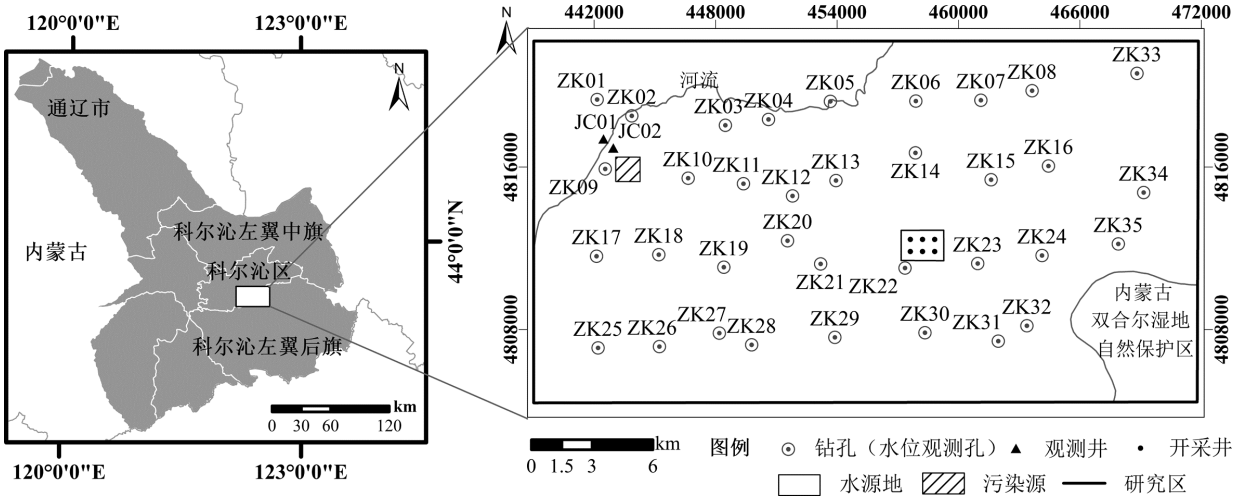


图 1　研究区范围

Fig.1　Study area scope

1.2.2 数学模型的建立与求解根据对研究区水文地质概念模型,建立如下地下水流数学模型:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial}{\partial x}\left(K\dfrac{\partial h}{\partial x}\right)+\dfrac{\partial}{\partial y}\left(K\dfrac{\partial h}{\partial y}\right)+\dfrac{\partial}{\partial z}\left(K\dfrac{\partial h}{\partial z}\right)+W= \\ S_s\dfrac{\partial h}{\partial t},(x,y,z)\in\Omega \\ K\left(\dfrac{\partial h}{\partial x}\right)^2+K\left(\dfrac{\partial h}{\partial y}\right)^2+K\left(\dfrac{\partial h}{\partial z}\right)^2-\dfrac{\partial h}{\partial z}K= \\ \mu\dfrac{\partial h}{\partial t},(x,y,z)\in\Gamma_0 \\ h(x,y,z,t)\big|_{t=0}=h_0(x,y,z),(x,y,z)\in\Omega \\ K_n\dfrac{\partial h}{\partial n}\Big|_{\Gamma_2}=q(x,y,z,t),(x,y,z)\in\Gamma_2\end{cases} \tag{1}$$

式中:K 为渗透系数,m/d;K_n 为边界面外法线方向的渗透系数,m/d;μ为潜水含水层给水度;S_s 为含水层单位储水系数,m^{-1};W 为单位体积流量,表示源汇项,m/d;h 为地下水水位标高,m;h_0 为地下水初始水位标高,m;$q(x,y,z,t)$为单位面积流量,$m^3/d/m^2$;x,y,z 为坐标;Ω为渗流区域;Γ_0 为渗流区域上边界,即地下水的自由水面;Γ_2 为渗流区域的第二类边界.

在地下水流模型的基础上,建立溶质运移模型,可描述为:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial c}{\partial t}=\dfrac{\partial}{\partial x}\left(D_{xx}\dfrac{\partial c}{\partial x}\right)+\dfrac{\partial}{\partial y}\left(D_{yy}\dfrac{\partial c}{\partial y}\right)+\dfrac{\partial}{\partial z}\left(D_{zz}\dfrac{\partial c}{\partial z}\right)- \\ \dfrac{\partial(\mu_x c)}{\partial x}-\dfrac{\partial(\mu_y c)}{\partial y}-\dfrac{\partial(\mu_z c)}{\partial z} \\ c(x,y,z,0)=c_0(x,y,z),(x,y,z)\in\Omega,t=0 \\ (vc-Dgradc)\cdot n\big|_\tau=\varphi(x,y,t),(x,y,z)\in\Gamma_2,t\geqslant 0\end{cases} \tag{2}$$

式中:D_{xx} 为纵向弥散系数主值;D_{yy} 为横向弥散系数主值;D_{zz} 为垂向弥散系数主值;c 为溶质浓度(mg/L);μ为实际平均流速(m/d);c_0为初始浓度;φ为边界溶质通量.

将研究区在水平方向上离散为 120×61 网格(每个网格 300m×300m),垂直方向上分为 3 层.地下水水流模型采用 MODFLOW 求解.根据水位统测时间,选取识别期 2014.5.1–2018.9.1 与验证期 2018.9.1–2019.4.1.此外,在识别期时,为确保差异仅反映非均质表征方法本身特性,而非参数优化程度差异,渗透系数及贮水率均保留原始表征的参数分布场.

溶质运移模型采用与水流模型相同网格剖分,模拟的溶质为保守性示踪剂,以聚焦研究含水层非均质性本身对污染物运移过程的影响.即本研究中地下水污染物模拟预测过程仅考虑污染物在含水层中的对流和弥散作用,不考虑污染物在含水层中的吸附、挥发、生物化学反应,承压含水层岩性主要为粉砂、细砂为主,结合经验值将其有效孔隙度取值为 0.3;鉴于研究区面积达 648km²,属于宏观尺度,弥散度室内测定值不适用于大范围的研究区污染物弥散数值模拟,为合理反映研究区含水层渗透系数非均质性对溶质运移的影响,并参考在类似尺度(数百平方公里至上千平方公里)砂质含水层中开展溶质运移模拟研究的前人成果[18-19],确定纵向/横向弥散度取 500m/250m,该取值水平符合区域尺度弥散度经验范围(纵向弥散度常为数十 m 至数 km)及横向弥散度通常取纵向弥散度 1/10 至 1/2 的规律.建立研究区地下水流与溶质运移模型后,继续利用数学模型研究非均质表征方法对地下水流及溶质运移模型的影响.

2 非均质性表征方法应用与对比

基于研究区抽水试验资料求得的离散点处渗透系数及贮水率的值对承压含水层的渗透系数及贮水率分别应用参数分区法、克里金插值及 SGS 进行表征,后续将得到的参数场分别输入数值模型中,以分析参数表征方法对地下水流模型及污染运移模型的影响.

2.1 参数分区法

研究区抽水试验资料剔除无效数据后,渗透系数及贮水率分别有 33 和 28 个有效数据点,并结合水文地质条件进行承压含水层渗透系数、贮水率的参数分区,分区结果见表 1 及图 2.

表 1 渗透系数及贮水率分区具体取值表

Table 1 Specific values of permeability coefficient and storage rate zoning

参数分区	渗透系数子区	渗透系数(m/d)	贮水率子区	贮水率($10^{-9}m^{-1}$)
I	K_1	14.0	S_{s1}	144.93
II	K_2	17.0	S_{s2}	47.66
III	K_3	9.0	S_{s3}	2.53
IV	K_4	5.0	S_{s4}	9.25
V	K_5	8.0	S_{s5}	6.95
VI	K_6	15.0	S_{s6}	19.78
VII	K_7	10.0	S_{s7}	16.73
VIII	K_8	12.0	S_{s8}	4.64
IX	K_9	2.0	S_{s9}	7.60

用参数分区法表征含水层的非均质性,可以很大程度上减少工作量,简单易行;观察图 2 及表 1 可发现,参数分区法的分区边界上渗透系数及贮水率的值发生突变.

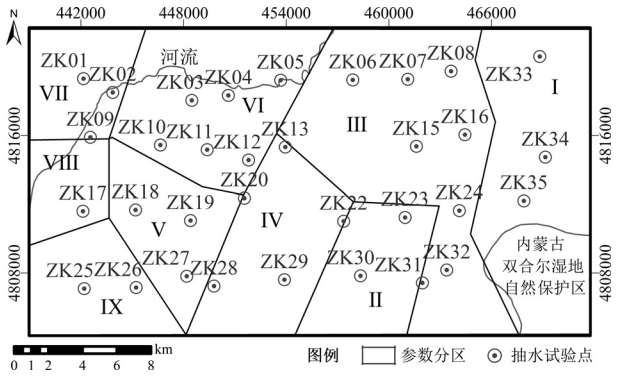


图 2　渗透系数及贮水率分区结果

Fig.2　Permeability coefficient and storage rate zoning results

2.2　克里金插值法

普通克里金法是最常用的克里金插值方法[20],普通克里金插值法以区域化变量理论为基础,通过构建半变异函数量化渗透系数的空间自相关性,在假设均值平稳的前提下,通过求解最优权重系数实现未知点的无偏最优估计[21].

进行普通克里金插值,首先需通过对数据进行初步的探索性分析,将数据处理为接近正态分布后,对已知的数据计算实验半变异函数,并选择合适的理论变异函数模型进行拟合,拟合结果见表 2,最后使用已知数据点参数值,插值得到渗透系数场及贮水率场,结果见图 3 和图 4.

表 2　渗透系数及贮水率半变异函数拟合结果

Table 2　Fitting results of semi-variogram models for hydraulic conductivity and storage rate

数据类型	渗透系数拟合结果	贮水率拟合结果
块金值	0.00791	0.02086
基台值	0.17339	0.01106
最大变程	8262	30229
中间变程	5998	11333
最小变程	0	0
模型类型	指数函数	指数函数

观察图 3 及图 4 可发现,参数场均存在明显的高值区及低值区.渗透系数在研究区南部、北部及东西部较高,最高达到 17.09m/d,研究区中部及西南部较低,低至 3.22m/d;贮水率于研究区东部较高,最高达到 $1.55\times10^{-7}m^{-1}$,西部、北部较低,低至 $2.43\times10^{-9}m^{-1}$,且二者高低值的分布及参数取值区间与参数分区法所得参数场基本一致.此外,参数分布场过渡均匀,边界平滑,未出现突变现象.在图中形成了大范围的“分布晕”,“分布晕”中间参数值高(低),向四周扩散的同时参数值减小(增大).

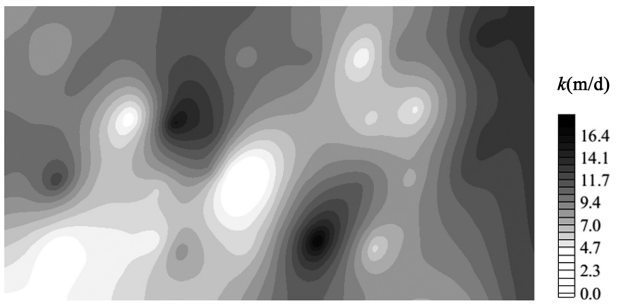


图 3　渗透系数场分布(Kriging)

Fig.3　Permeability coefficient field distribution (Kriging)



图 4　贮水率场分布(Kriging)

Fig.4　Storage rate field distribution (Kriging)

2.3 序贯高斯模拟(SGS)

序贯高斯模拟(SGS)假设随机变量满足高斯分布或通过变换后近似高斯分布,并基于多高斯随机函数模型逐点进行条件模拟.它在生成每一个未知点的值时,考虑该点与所有已模拟点之间的空间相关性,从而构建一个符合空间统计特性的随机场[22].基于 SGS 对渗透系数场及贮水率场进行表征[23],首先需将数据处理为接近正态分布后,对已知的数据拟合半变异函数,拟合结果见表 2,而后生成表征结果参数场,分别见图 5、图 6.

观察图 5 及图 6 可以发现,SGS 表征的参数场也存在明显的高值区及低值区.渗透系数高至 17.29m/d,低至 1.61m/d,贮水率高至 $1.45\times10^{-6}m^{-1}$,低至 $7.43\times10^{-10}m^{-1}$,且高低值区的分布及参数取值区

间与克里金插值法及参数分区法表征结果基本一致.不同点在于,序贯高斯模拟表征的参数场,其参数值的过渡边界凹凸不平,彼此交融,未形成大范围的分布晕现象,随机性较强.



图 5 渗透系数场分布(SGS)

Fig.5 Permeability coefficient field distribution (SGS)

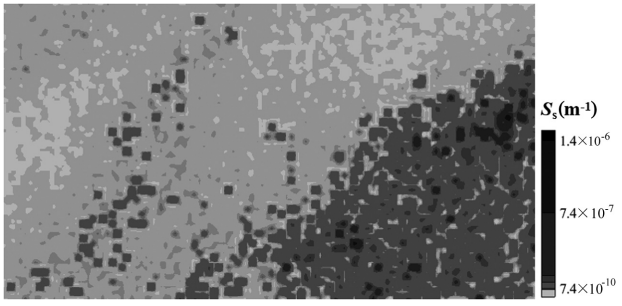


图 6 贮水率场分布(SGS)

Fig.6 Storage rate field distribution (SGS)

3 非均质性表征方法对地下水流模型预测结果的影响

将参数分区法、克里金插值法及 SGS 三种表征方法得到的渗透系数场及贮水率场分别输入地下水流模型中,分析表征方法对地下水流模型预测结果的影响.

3.1 模型的识别与验证及水位拟合结果分析

模型识别与验证依赖于研究区内承压含水层的地下水水位监测数据.研究区识别期末(2018 年 9 月 1 日)及验证期末(2019 年 4 月 1 日)布设了 35 眼水位观测井,这些井点空间分布上基本覆盖整个研究区,如图 1 所示.以 2014.5.1 的承压水水位为初始水位,分析渗透系数表征结果及贮水率表征方法对识别末期及验证末期水位预测结果的影响.此外,在识别期参数优化时,为确保差异仅反映非均质表征方法本身特性,而非参数优化程度差异,渗透系数及贮水率均保留原始表征的参数分布场.因此,模型识别过程主要针对潜水蒸散发系数、给水度及大气降雨入渗系数这些参数采用试估—校正法进行优化,并利用 PEST 模块自动调参,直到大部分观测孔的模拟值与观测值误差达到模拟的精度要求,要求识别期所有观测井模拟与观测水位的 R^2≥0.9,同时满足流场形态合理及关键区域拟合良好的要求,验证期结果也需达到基本精度(R^2≥0.9).

将拟合优度系数(R^2)、均方根误差(RMSE)和纳什效率系数(NSE)作为定量评价指标[24],分别对模型识别期和验证期的模拟结果进行评估.具体计算公式如下:

$$R^2=\frac{\left[\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})\left(y_i-\hat{y}_i\right)\right]^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2\cdot\sum_{i=1}^{n}\left(\hat{y}_i-\bar{\hat{y}}\right)^2} \tag{3}$$

$$\mathrm{RMSE}=\sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i-\hat{y}_i\right)^2} \tag{4}$$

$$\mathrm{NSE}=1-\frac{\sum_{i=1}^{n}\left(y_i-\hat{y}_i\right)^2}{\sum_{i=1}^{n}\left(y_i-\bar{y}\right)^2} \tag{5}$$

式中:y_i 为第 i 个观测水位值;$\hat{y}_i$ 为第 i 个预测水位值;$\bar{y}$ 为观测水位的均值;$\bar{\hat{y}}$ 为模拟水位的均值;n 为观测井数量.R^2 值越接近 1 表示拟合精度越高;RMSE 反映预测值与实测值之间的平均偏差,值越小精度越高;NSE 衡量模型预测结果相对于实测值均值的改进程度,值越接近 1 表示模型性能越好.

不同参数表征方法下模型在识别期与验证期的监测井处的预测水位与实测水位的拟合精度评价指标统计结果见分别见表 3.分析表 3 可知:(1)所有方法在验证期相比识别期拥有更高的 R^2、NSE,更低的 RMSE,即拟合精度指标均优于识别期,表明模型经过识别期参数优化后,在独立验证时段具有更好的预测能力和稳定性;(2)无论在识别期还是验证期,三种方法的精度排序均保持一致:SGS>克里金插值法>参数分区法;(3)三种贮水率表征方法在识别期和验证期对应的 RMSE、NSE 和 R^2值均高度一致,无明显差异,这表明贮水率表征方法对模拟水位影响微弱,这印证了地下水流场对贮水率敏感性相对渗透系数较小的结论[25].故地下水数值模拟中可将贮水率视为次要变量,更侧重渗透系数等主导表征含水层非均质性,以提升模型预测精度.接下来重点分析渗透系数表征结果对地下水流模型的

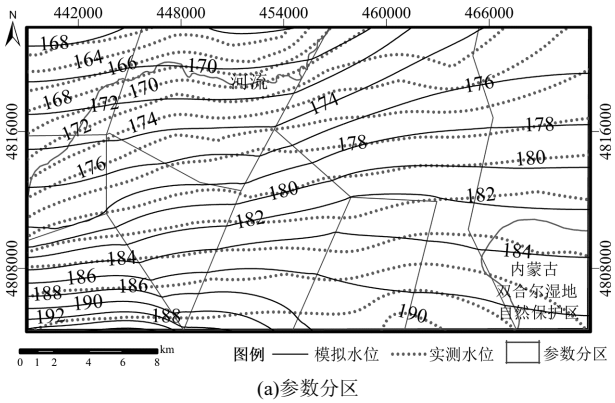
影响.

表 3　不同渗透系数表征方法模型在识别期和验证期监测井处的预测水位与实测水位的拟合精度评价指标

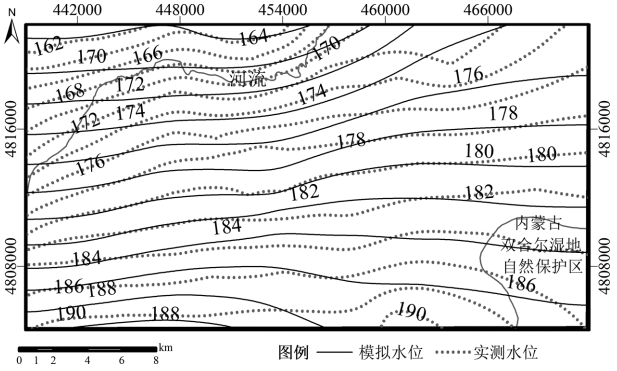
Table 3　Evaluation metrics of fitting accuracy between predicted and observed groundwater levels at monitoring wells during calibration and validation periods under different parameter characterization methods

渗透系数表征方法	表征参数	阶段	RMSE(m)	NSE	R^2
参数分区法	渗透系数	识别期	1.826	0.917	0.926
		验证期	1.438	0.941	0.948
	贮水率	识别期	1.826	0.917	0.926
		验证期	1.438	0.941	0.948
克里金插值法	渗透系数	识别期	1.617	0.935	0.951
		验证期	1.269	0.954	0.963
	贮水率	识别期	1.826	0.917	0.926
		验证期	1.438	0.941	0.948
序贯高斯模拟(SGS)	渗透系数	识别期	1.496	0.944	0.960
		验证期	1.199	0.959	0.967
	贮水率	识别期	1.826	0.917	0.926
		验证期	1.438	0.941	0.948

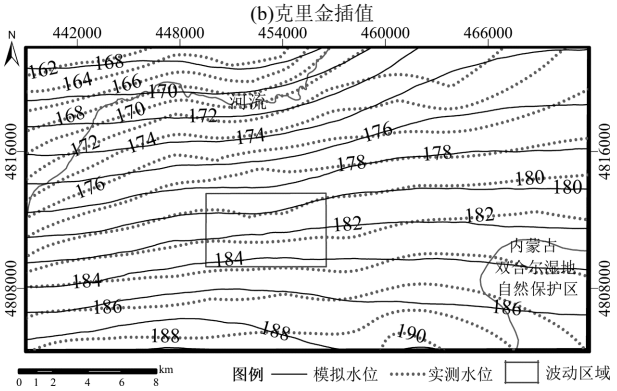
由图 7 可见,参数分区法边界等水位线形态发生急剧变化,导致了其拟合精度的降低,这归因于参数分区各子区间边界处渗透系数陡变,导致相邻分区水力梯度产生显著差异,从而引起的等水位线形态变化;克里金插值因其平滑效应产生的模拟水位等水位线最为连续光滑,序贯高斯模拟的流场宏观上无明显异变,但因其表征时的随机性等水位线局部有微小波动,且二者拟合精度均较高,可见克里金插值与 SGS 更能体现出本研究区的水文地质真实性.此外对比克里金插值法,SGS 更高的拟合精度表明该方法在表征非均质含水层参数场时具有更强的适应性,这为区域地下水流模型渗透系数场的构建提供了更优的随机性表征方法.



(a)参数分区



(b)克里金插值



(c)序贯高斯模拟(SGS)

图 7　识别末时刻承压含水层预测等水位线与实测等水位线拟合结果

Fig.7　Fitting results between predicted and measured equipotential lines of confined aquifer at the end of identification period

3.2　表征方法对开采情景下水位预测结果的影响

3.2.1　水源地概况　在研究区中西部存在一水源地,如图 1 所示,呈东西向矩形展布,根据研究区抽水试验资料,地下水的影响半径为 500m,从经济效益及避免井群间干扰程度过大角度综合考虑确定合理的井间距,井间距设置为 600m, 均匀布井,在垂直地下水流向方向布置 2 个井排,每个井排布置 3 眼井,单井开采量 5000m^3/d.

3.2.2　表征方法对地下水流模型预测结果的影响　基于识别阶段水位动态响应特征分析,发现贮水系数对地下水流系统敏感性较渗透系数低.因此,为深入揭示参数表征对地下水流模型的影响,本次实验采用控制变量法,重点针对渗透系数场非均质性表征方法开展对比研究,而将贮水率简化为参数分区法进行表征.用三种方法分别表征渗透系数,预测水源地按照上述开采情境开采 20 年后的水源地及周边地下水位的分布情况,等水位线预测结果的降落漏斗及周边流场的局部放大图如图 8 所示.

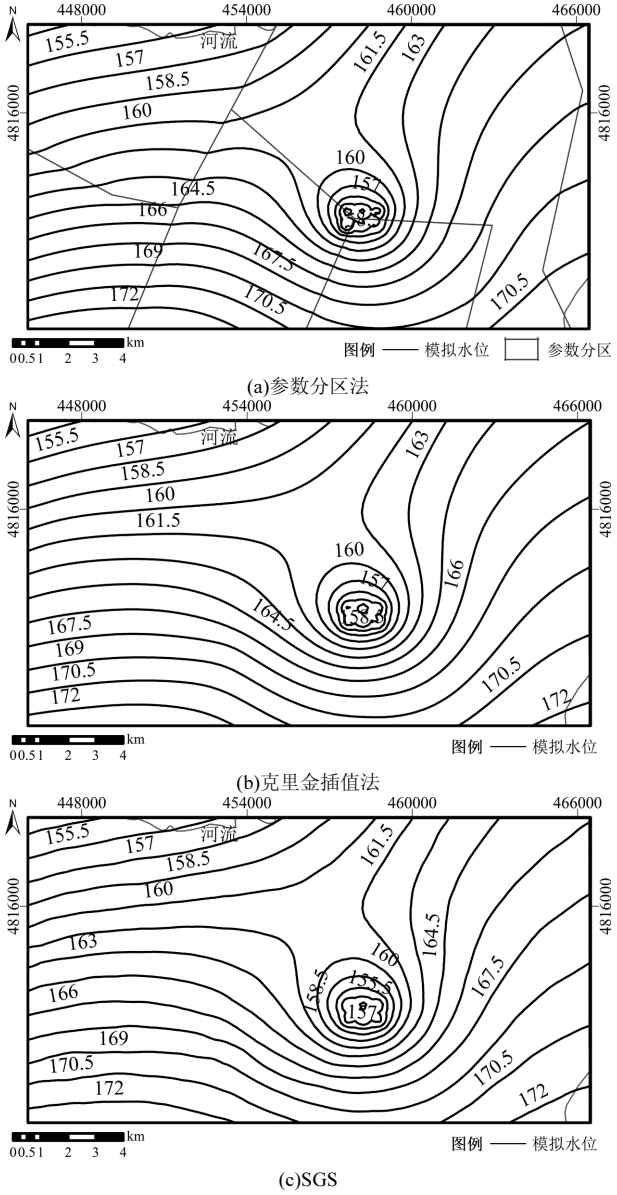


图 8 基于不同参数表征方法的流场预测结果降落漏斗及周边流场局部放大

Fig.8 Local enlargement of predicted drawdown funnel and surrounding flow field based on different parameter characterization methods

从图 8 可以看出,基于参数分区法预测的等水位线在渗透系数分区边界处形态发生急剧变化,归因于渗透系数的分区边界水力梯度产生显著差异,从而引起等水位线形态变化.SGS 生成的等水位线在开采情境下产生了与模型识别阶段(图 7(c))不同的特殊现象:由于持续抽水引发的大范围区域性水位下降,使得原本由渗透系数局部差异引起的水力梯度异常被掩盖,图 8(c)与图 7(c)对比显示,开采条件下的水位波动明显减弱,基本可忽略不计,这表明区域性的水位下降趋势主导了流场变化,使得局部参数差异的影响相对弱化.克里金法则因插值平滑效应形成连续无突变的等水位线,能够在反映含水层非均质性的同时保证参数空间渐变.三者形态差异本质源于非均质表征方法对参数场空间连续性的刻画能力差异.

分析三种方法得到的模拟水位分布可知,在开采情境下,除参数分区的主观性会使流场等水位线形态分布不连续外,宏观上克里金插值与序贯高斯模拟表征渗透系数对于流场分布无显著影响,微观上序贯高斯模拟因其随机性对流场的微小扰动被大范围开采引发的水位下降所掩盖,基本可忽略不计;克里金插值则因其平滑效应产生光滑连续的等水位线.

4 表征方法对地下水溶质运移模型预测结果的影响

4.1 污染源区概况

污染源区为一垃圾填埋场,位于研究区西北部,如图 1 所示.由于管理不当,填埋场底部防渗层侧壁发生鼓胀破坏现象,导致渗滤液和地下水混合,地下水受到污染,且一直未被修复,污染物 2019.5.1 发生泄漏,泄漏速率为 2 万 mg/d.为定量捕捉污染物运移的时间动态特征,在污染源下游 1000m(JC01)及 400m(JC02)处设置了观测井(位置见图 1),连续记录浓度随时间变化.

4.2 表征方法对地下水溶质运移模型预测结果的影响

将非均质参数场输入溶质运移模型中,基于 MODFLOW-MT3DMS 模拟污染物在非均质场中运移 20 年后(至 2039.5)的分布状况.溶质运移模型结果如图 9 所示:

图 9(d)~(f)分别为不同方法表征贮水率所得的污染羽分布图,由图可见,各污染羽的形态、浓度峰值均高度一致,这表明,在该情境下贮水率空间变异性对溶质运移影响较小,溶质运移主要受渗透系数的控制.实际应用中可采用均值法或分区法等简捷方法表征贮水率,在保证模拟精度的同时显著提升计算效率.图 9(a)~(c)分别为利用不同方法表征渗透系数所得的污染羽分布图.由图可知,参数分区法的污染物浓度峰值及高浓度范围最大,展布范围最小.

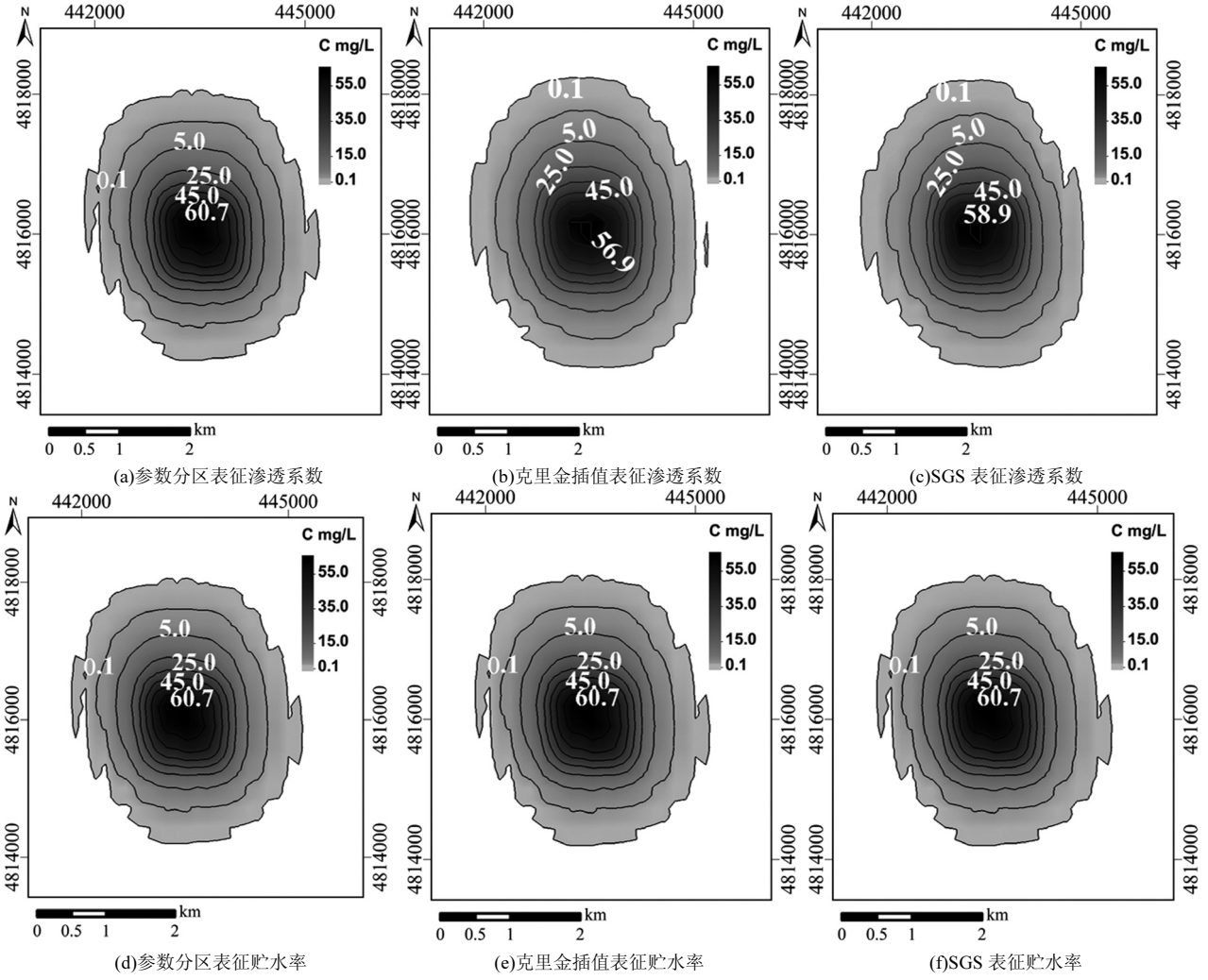


图 9　基于不同参数表征方法的 20 年后污染羽浓度分布

Fig.9　Concentration distribution of contaminant plumes after 20 years based on different parameter characterization methods

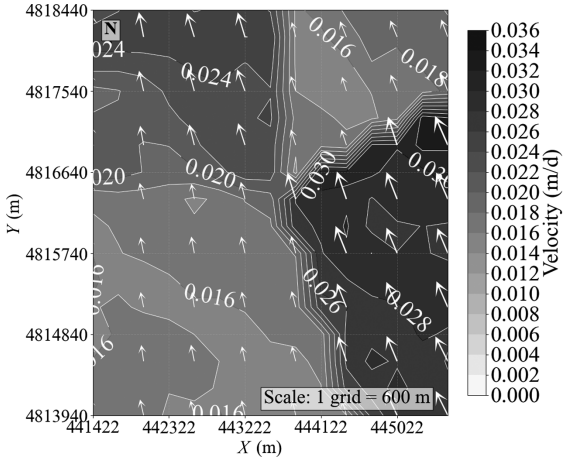
表 4　污染物浓度分布零至二阶矩及渗透系数空间分布统计参数表

Table 4　Zero- to second-order moments of pollutant concentration distribution and statistical parameters of permeability coefficient spatial distribution

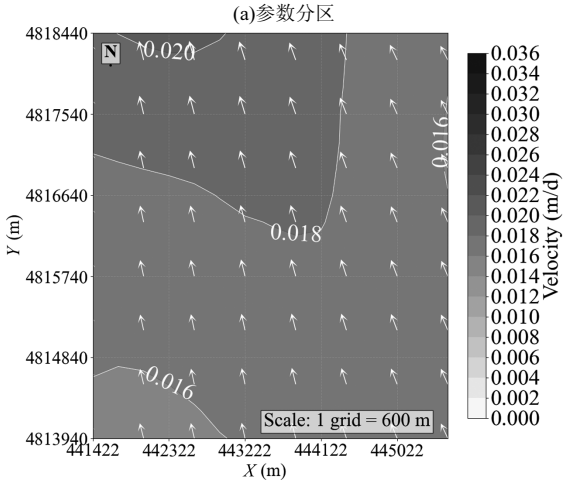
统计参数	参数分区法			克里金插值			序贯高斯模拟(SGS)		
	1825d	3650d	7300d	1825d	3650d	7300d	1825d	3650d	7300d
*C*max(mg/L)	17.99	34.94	60.70	17.89	34.08	56.85	17.93	34.56	58.87
总质量(g)	7899271	15979309	31634862	7891947	15955164	31595613	7891998	15955185	31595621
μ_x(m)	443672	443662	443628	443671	443661	443632	443671	443662	443636
μ_y(m)	4815925	4815963	4816048	4815930	4815976	4816081	4815927	4815970	4816068
σ_{xx}(m^2)	130200	152713	208535	132257	156664	214092	129326	150833	203011
σ_{yy}(m^2)	148327	188789	283378	154289	202821	316753	151174	196493	304817
渗透系数空间变异方差	1.3718	1.3718	1.3718	1.0505	1.0505	1.0505	1.0502	1.0502	1.0502
渗透系数对数均值	9.3392	9.3392	9.3392	9.9670	9.9670	9.9670	9.5828	9.5828	9.5828

为明确造成上述差异的物理机制,并定量刻画其时空演化规律,表 4 计算了污染羽的最大浓度、零阶矩(即总质量)、一阶矩(μ_x,μ_y)以及二阶矩(σ_{xx},σ_{yy})在 5 年(1825d)、10 年(3650d)和 20 年(7300d)的演变,并统计渗透系数场的关键统计参数,图 10 展示了污染源附近的流速场分布.其中,(σ_{xx},σ_{yy})分别定义为污染羽在 x 和 y 方向上的空间方差(m^2),用来量化污染羽的展布范围,其大小与渗透系数空间变

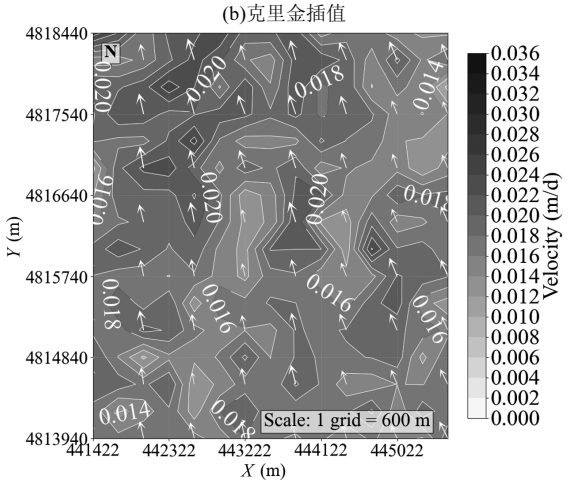
异方差正相关,即空间变异方差越大,水动力弥散效应越强,污染羽展布范围越大.一阶矩(μ_x,μ_y)为污染羽质心坐标[26-27].



(a)参数分区



(b)克里金插值



(c)SGS

图 10 基于不同渗透系数表征方法的地下水流速分布(污染源附近)

Fig.10 Distribution of groundwater flow velocities near the contamination source under different hydraulic conductivity characterization methods

图 9(a)~(c)及表 4 表明,尽管三种方法所预测污染羽虽在具体参数上存在显著差异,但其整体形态表现出一定程度的相似性.分析图 10 可知,地下水流向均为东南至西北,主导流向的一致性奠定了污染羽整体延伸方向相似的基础.此外,虽然表征方法不同,但均是基于相同基础地质信息和抽水试验资料进行参数赋值,含水层的主要结构特征在表征时得以保留或近似,从而造成了污染羽整体形态的相似性.

表 4 表明:(1)虽表征方法及时间点不同,但是各污染羽质心坐标(μ_x,μ_y)无显著差异,此外,各表征方法得到的参数场对数均值相近,印证了质心坐标由渗透系数均值主导的理论;(2)所有表征方法下,浓度峰值、总污染质量、污染羽二阶矩(σ_{xx},σ_{vv})均随时间不断增加,表明污染物持续从源区释放并向含水层中累积、运移.

在所有时间点,σ_{xx}(即在东西方向上污染羽展布范围)排序为克里金插值>参数分区法>SGS, σ_{yy} (即在南北方向上污染羽展布范围)排序为克里金插值>SGS>参数分区法,结合图 10 造成以上结果的原因可分析为:(1)由于研究区内数据点间距离较大(图 1),克里金插值在外推时因平滑效应导致其表征的渗透系数场空间变异方差最大,以及其具有连续的空间结构,最有效地促进了污染物各方向的水动力弥散,导致其(σ_{xx},σ_{yy})均最大,即污染羽展布范围最大;(2)SGS 严格保留了原始数据的方差,其空间变异方差居中,而参数分区法虽空间变异方差最大,但来源于分区间差异,区内为均质,缺乏连续变异结构,因此弥散作用最弱;(3)图 10 显示,因参数分区东西方向渗透系数取值较大,其东西方向上的地下水流速显著大于 SGS.这种较高的东西向流速有效地推动了污染物在东西方向的运移,促进程度大于 SGS 连续的空间变异结构对弥散的促进作用,使其σ_{xx} 大于 SGS,但小于克里金.但其在污染源南北方向上的流速与克里金插值法和 SGS 相差不大,加之其虽具有最大的空间变异方差,但源于分区间跳跃,结构离散,对弥散促进作用微弱,无法克服低流速的阻滞效应,因此,其σ_{yy} 在三种方法中始终最小.(4)不同时间点污染羽浓度峰值、污染羽总质量排序均为参数分区法>SGS>克里金插值,亦佐证了以上 3 点:参数分区法离散的空间变异结构阻碍了污染物扩散;克里金

插值拥有最大空间变异方差和连续的空间结构,促进污染物扩散;SGS 其空间变异特征(方差略小于克里金但连续)使其模拟的污染物扩散程度介于两者之间,浓度峰值和总质量也处于中间位置.

图 11 为污染源下游 400m(JC02)和 1000m(JC01)的观测井污染物浓度变化曲线,观测井浓度动态进一步验证上述机理.

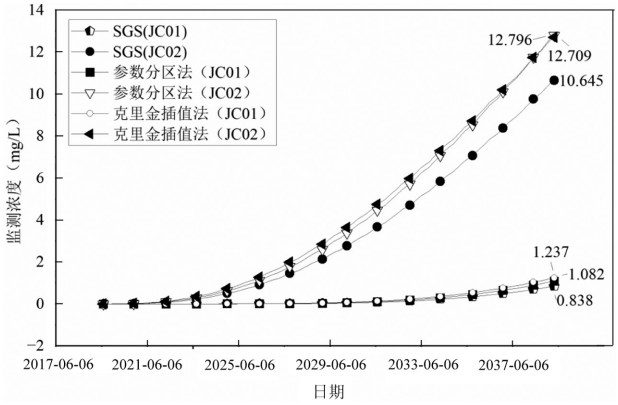


图 11　下游观测井(JC01, JC02)污染物浓度变化曲线

Fig.11　Temporal variations of contaminant concentrations at downstream observation wells (JC01, JC02)

分析图 11 可知,JC01(1000m 观测井)监测到的污染物到达时间排序为克里金最早,参数分区次之,SGS 最晚,最终浓度排序为克里金>参数分区>SGS,这与污染羽东西展布范围排序一致,反映克里金强弥散使污染物更快到达远场并广泛扩散;参数分区法污染源附近东西向流速高(图 10a),但弥散较弱,污染物主要集中在运移路径上,故最终浓度居中.SGS 中等弥散、中等流速使之最终浓度最低.JC02(400m 观测井)监测污染物到达时间排序与 JC01 监测结果一致,但最终峰值浓度为参数分区>克里金插值>SGS,佐证了参数分区法虽空间变异方差最大但缺乏连续变异结构,弥散作用弱,到达 JC02 后因弥散不足而持续累积在近场位置,后期浓度反超克里金.

5　结论

5.1　相比贮水率,渗透系数的表征方法是影响地下水流模型精度和溶质运移预测的关键因素,需优先对渗透系数的非均质性进行精细刻画.

5.2　关于渗透系数表征,克里金插值和 SGS 显著提高了地下水流模型水位拟合精度,并避免了参数分区法中参数突变引起的子区边界处等水位线形态失真的问题.

5.3　在溶质运移预测过程中,参数分区忽略子区内空间变异性,导致其模拟出的污染羽范围最小、局部浓度最高,且对子区渗透系数赋值高度敏感;克里金插值在本研究数据点稀疏条件下,因其平滑效应增强了弥散作用,预测出范围最大的污染羽;SGS 严格保留原始数据统计方差,预测污染羽范围介于二者之间.在模拟实践中,勘探点布设密度受限是常见约束,因此,方法选择应直接契合数值模拟目标:若模拟目标是划定最大污染风险管控区,建议采用克里金插值法;若模拟需平衡空间变异性与局部不确定性,则 SGS 的结果更具价值.

5.4　本研究聚焦渗透系数、贮水率的表征,未来可探讨渗透系数与贮水率、孔隙度等多参数非均质性及其空间相关性共同表征对模型预测的综合影响.此外,还可深入分析表征方法在不同模拟尺度(如从场地尺度到区域尺度)下的适用性和表现差异.

参考文献:

[1] 蒋立群,孙蓉琳,梁　杏.含水层非均质性不同刻画方法对地下水流和溶质运移预测的影响 [J]. 地球科学, 2021,46(11):4150−4160.
Jiang L Q, Sun R L, Liang X. Predicting groundwater flow and transport in heterogeneous aquifer sandbox using different parameter estimation methods [J]. Journal of Earth Science, 2021,46(11):4150–4160.

[2] 李嘉宁.GFModel 的水文地质参数反演研究 [D]. 徐州:中国矿业大学, 2023.
Li J N. Study on hydrogeological parameter identification of GFModel [D]. Xuzhou: China University of Mining and Technology, 2023.

[3] 吴双红,刘　泉,戚俊杰,等.基于水力走时反演刻画裂隙含水层非均质性 [J]. 地质科技通报, 2021,40(1):175−183.
Wu S H, Liu Q, Qi J J, et al. Characterization of the heterogeneity of a fractured aquifer based on hydraulic travel time inversion [J]. Bulletin of Geological Science and Technology, 2021,40(1):175–183.

[4] 陈　霞,陈少华,金　震,等.地下水污染数值模拟与应用进展 [J]. 安徽化工, 2025,51(4):120−122.
Chen X, Chen S H, Jin Z, et al. Advances in Numerical Simulation and Application of Groundwater Pollution [J]. Anhui Chemical Industry, 2025,51(4):120–122.

[5] 任婉立.非均质孔隙介质中溶质运移模拟的不确定性分析 [D]. 长春:吉林大学, 2023.
Ren W L. Uncertainty analysis of solute transport simulation in heterogeneous porous media [D]. Changchun: Jilin University, 2023.

[6] 安永凯,张岩祥,闫雪嫚.基于自适应多保真度 Co−Kriging 代理模型的地下水污染源反演识别 [J]. 中国环境科学, 2024,44(3):1376−1385.

An Y K, Zhang Y X, Yan X M. Identification of groundwater pollution sources based on self-adaption Co-Kriging multi-fidelity surrogate model [J]. China Environmental Science, 2024,44(3):1376–1385.

[7] 王美悦.孔隙非均质含水层径向溶质运移数值模拟研究 [D]. 淮南: 安徽理工大学, 2025.
Wang M Y. Numerical simulation of radial solute transport in porous heterogeneous aquifer [D]. Huainan: Anhui University of Science and Technology, 2025.

[8] Liu Y, Zhang X, Guo W, et al. Research status of and trends in 3D geological property modeling methods: a review [J]. Applied Sciences, 2022,12(11):5648.

[9] Carrera J, Neuman S P. Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions: Maximum likelihood method incorporating prior information [J]. Water Resources Research, 1986, 22(2):199-210.

[10] Tsai F T C, Sun N Z, Yeh W W G. A combinatorial optimization scheme for parameter structure identification in ground water modeling [J]. Water Resources Research, 2003,39(6):1153.

[11] Krige D G. A statistical analysis of some of the borehole values in the Orange Free State gold field [J]. Journal of the Chemical and Metallurgical Society of South Africa, 1952,53:47-64.

[12] Matheron G. Principles of geostatistics [J]. Economic Geology, 1963, 58(8):1250-1266.

[13] 陈 航,杨 洁,杜文强,等.潜水位变动对非均匀介质中 DNAPL 分布影响的数值模拟研究 [J]. 中国环境科学, 2025,45(10):5796-5810.
Chen H, Yang J, Du W Q, et al. The numerical simulation study of the impact on DNAPL distribution in heterogeneous media due to fluctuation of water table [J]. China Environmental Science, 2025, 45(10):5796-5810.

[14] Deutsch C V, Journel A G. GSLIB geostatistical software library and user's guide [M]. 2nd ed. New York: Oxford University Press, 1998.

[15] Goovaerts P. Geostatistics for natural resources evaluation [M]. New York: Oxford University Press, 1997.

[16] Boumpoulis V, Michalopoulou M, Depountis N. Comparison between different spatial interpolation methods for the development of sediment distribution maps in coastal areas [J]. Earth Science Informatics, 2023,16(3):2069-2087.

[17] 岳松梅,杨 蕴,吴剑锋,等.基于不同地质统计方法的渗透系数场对污染物运移的影响 [J]. 地下水, 2014,36(4):10-14.
Yue S M, Yang Y, Wu J F, et al. The impact of hydraulic conductivity distribution mapped by four geostatistical techniques on the groundwater contaminant movement [J]. Ground Water, 2014,36(4): 10–14.

[18] Gelhar L W, Welty C, Rehfeldt K R. A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers [J]. Water Resources Research, 1992, 28(7):1955-1974.

[19] 王 鸿,姚云琦,马建花,等.基于GMS的三维地质建模与地下水数值模拟——以永靖县黑台为例 [J]. 兰州大学学报(自然科学版), 2023,59(5):601-609+619.
Wang H, Yao Y Q, Ma J H, et al. 3D geological modeling and groundwater numerical simulation research based on GMS: a case study of the Heitai terrace, Yongjing Country [J]. Journal of Lanzhou University (Natural Sciences), 2023,59(5):601–609,619.

[20] Zhang Y, Qin X, Bian Y, et al. Sequential Gaussian simulation predicts soil liquefaction potential [J]. Marine Georesources & Geotechnology, 2025,43(4):525-534.

[21] 李富富,陈东湘,王院民,等.基于随机森林与地统计预测城市土壤 PAHs 分布 [J]. 中国环境科学, 2019,39(12):5240-5247.
Li F F, Chen D X, Wang Y M, et al. Distribution prediction of soil PAHs based on random forest and geostatistics methods in urban area. China Environmental Science, 39(12):5240-5247.

[22] Simin J, Ruicheng Z, Jinbing L, et al. Simultaneous estimation of a contaminant source and hydraulic conductivity field by combining an iterative ensemble smoother and sequential Gaussian simulation [J]. Water, 2022,14(5):757-757.

[23] Bai T, Tahmasebi P. Sequential Gaussian simulation for geosystems modeling: A machine learning approach [J]. Geoscience Frontiers, 2022,13(1):101258.

[24] 陈亚松,刘家雯,赵云鹏,等.基于机器学习的人工湿地出水水质预测与影响因素 [J]. 中国环境科学, 2025,45(6):3161-3170.
Chen Y S, Liu J W, Zhao Y P, et al. Prediction of effluent water quality and analysis of influencing factors in constructed wetlands based on machine learning [J]. China Environmental Science, 2025,45(6):3161-3170.

[25] Dai H, Liu Y, Guadagnini A, et al. Comparison assessment of two global sensitivity methods considering model and parameter uncertainty [J]. Water Resources Research, 2024,60(2):e2023WR 036096.

[26] 王开丽,黄冠华.二维强非均质含水层中渗透系数空间变异对污染物迁移的影响 [J]. 水利学报, 2010,41(4):437-445.
Wang K L, Huang G H. Effect of hydraulic conductivity on contaminant transport in highly heterogeneous two-dimensional aquifers [J]. Journal of Hydraulic Engineering, 2010,41(4):437–445.

[27] 施小清,吴吉春,吴剑锋,等.多个相关随机参数的空间变异性对溶质运移的影响 [J]. 水科学进展, 2012,23(4):509-515.
Shi X Q, Wu J C, Wu J F, et al. Effects of the heterogeneity of multiple correlated random parameters on solute transport [J]. Advances in Water Science, 2012,23(4):509–515.

作者简介：薛锦雯(2002-),女,新疆乌鲁木齐人,吉林大学硕士研究生,主要从事地下水污染源反演溯源方面的研究.1820841245@qq.com.