

NoahPy：一个可微分的 Noah 陆面过程模型

技术文档

(Aug 28, 2025)

摘要：我们发展了一个可微陆面过程模型 (NoahPy)，将基于水热传导非线性偏微分方程的 Noah 陆面模型 (Noah LSM) 重构为过程封装式循环神经网络。该模型将以控制水热传导的非线性偏微分方程为核心的 Fortran 版本 Noah 陆面模型 (Noah LSM) 重构为可微分的 Python 版本 (NoahPy)。通过将 Noah LSM 物理方程融入 RNN 核心循环结构，NoahPy 不仅保留了改进的 Noah LSM 的物理核心机制，还通过自动微分技术实现模型参数的高效优化，从而提高模拟的准确性和效率。

代码下载： <https://doi.org/10.5281/zenodo.16530326>

作者： 田文彪，南卓铜 (南京师范大学 PermaLab 团队)

<https://permalab.science/>

nanzt@njnu.edu.cn;

<https://orcid.org/0000-0002-7930-3850>)

引用： Tian, W. & Nan, Z. (2025). wbtian/NoahPy: NoahPy v1.0.1. Zenodo.

<https://doi.org/10.5281/zenodo.16530326>

1 模型基础

Noah LSM (v3.4.1) [1]能够模拟大气-植被-土壤连续体中一维的水热交换和传输过程。在 Noah LSM 中，使用热传导控制方程来模拟土壤中热量的传输：

$$C_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T_s}{\partial z} \right) + Q \quad (1)$$

其中 T_s 表示的是土壤温度； C_s 表示的是土壤的热容； λ 为土壤的热传导； Q 为源和汇（例如冰水相变的能量）。其中 C_s 的计算过程如下：

$$C_s = \theta C_w + (1 - \theta_s) C_{soil} + (\theta_s - \theta) C_{air} \quad (2)$$

其中 θ 表示土壤液态水含量 ($\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3}$)； θ_s 表示土壤的孔隙度 ($\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3}$)； C_w 、 C_{soil} 和 C_{air} 分别代表水的热容、土壤固体热容和土壤中的空气热容 ($\text{J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}$)。

液态水运动通过理查德方程模拟：

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} \right] + \frac{\partial K(\theta)}{\partial z} + S(\theta) \quad (3)$$

其中 t 代表的是时间 (s)； D 为土壤水分扩散率 ($\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$)； K 为土壤水的传导率 ($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)； z 为土壤深度 (m)； S 代表的是土壤水源和汇（如降水量、蒸散发和径流）。在该公式中，等号右边的第一项代表土壤水分的扩散部分，受到土壤垂直水势的梯度的驱动，而公式右侧的第二项则说明是在重力的作用下引起的土壤水分传导的部分。

在我们团队的前期工作中，针对冻土从三个方面改进了原始 Noah LSM 的物理过程[2-3]。引入了一个新的针对稀疏植被的热力学粗糙度算法[4]以改进原始参数化方案对土壤热通量的低估，引入了一个新的导热系数参数化方案更适用于青藏高原的粗颗粒土壤[5]。由于地下冰对液态水运动的阻抗作用，通过添加一个与冰含量相关的经验因子约束土壤导水率的计算[6]。同时考虑土壤的垂直异质性，模拟的深度扩展至 15.2m 与多层土壤数据集 (MSTD) [7]对应。改进的 Noah LSM 已在青藏高原唐古拉冻土站 (TGL) 验证具有良好的水热模拟能力，已被用于青藏高原冻土退化相关研究[8-9]。

2 技术实现

我们使用一组常微分方程和偏微分方程以及输出方程来描述改进的 Noah LSM 的动态系统：

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} r(t) = \mathbf{H}(r(t), u(t, z), \beta^H) \\ \frac{\partial}{\partial t} s(t, z) = \mathbf{F}(s(t, z), u(t, z), \beta^F) \\ y(t, z) = \mathbf{G}(r(t), s(t, z), u(t, z), \beta^G) \end{cases} \quad (4)$$

其中 $s(t, z)$ 、 $u(t, z)$ 、 $y(t, z)$ 分别表示状态向量、输入向量和输出向量，均依赖于时间 t 和空间位置 z 。 $r(t)$ 表示常微分方程中的状态变量，依赖于时间 t 。 β^H 、 β^F 和 β^G 表示参数集。

Noah LSM 中的热传导方程和理查德方程，即方程(1)和(3)均使用相同的数值解法，根据 Pan 和 Mahrt 的空间离散方案[10]以及 Kalnay 和 Kanamitsu 的时间离散方案（隐式状态，显式系数）[11]将方程(3)离散化可得：

$$\frac{\theta_k^{t+1} - \theta_k^t}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta z_k} \left[D(\theta_{k-1}) \frac{\theta_{k-1}^{t+1} - \theta_{k-1}^t}{\Delta z_{k-1}} - D(\theta_k) \frac{\theta_k^{t+1} - \theta_k^t}{\Delta z_k} + K_{k-1} - K_k + S \right] \quad (5)$$

令 $A = -\frac{D(\theta_{k-1})\Delta t}{\Delta z_k \Delta z_{k-1}}$, $C = -\frac{D(\theta_k)\Delta t}{\Delta z_k \Delta z_k}$ 整理可得:

$$A(\theta_{k-1}^{t+1} - \theta_{k-1}^t) + B(\theta_k^{t+1} - \theta_k^t) + C(\theta_{k+1}^{t+1} - \theta_{k+1}^t) = RHS \quad (6)$$

$$RHS = \frac{S + K_{k-1} - K_k}{\Delta z_k} \cdot \Delta t + A(\theta_k^t - \theta_{k-1}^t) + C(\theta_k^t - \theta_{k+1}^t) \quad (7)$$

$$B = 1 - (A + C)$$

其中 k 和 t 分别表示土壤层和时间; Δz_k 表示第 k 层土壤的厚度; Δz_k 表示第 k 层土壤与第 $k+1$ 层土壤厚度总和的一半。公式6可使用矩阵表示为:

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & C_3 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & A_{k-2} & B_{k-2} & C_{k-2} & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & A_{k-1} & B_{k-1} & C_{k-1} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & A_k & B_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_1^{t+1} - \theta_1^t \\ \theta_2^{t+1} - \theta_2^t \\ \theta_3^{t+1} - \theta_3^t \\ \vdots \\ \theta_{k-2}^{t+1} - \theta_{k-2}^t \\ \theta_{k-1}^{t+1} - \theta_{k-1}^t \\ \theta_k^{t+1} - \theta_k^t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} RHS_1 \\ RHS_2 \\ RHS_3 \\ \vdots \\ RHS_{k-2} \\ RHS_{k-1} \\ RHS_k \end{bmatrix} \quad (8)$$

线性方程组8最终可以通过机器学习平台 (Pytorch) 的可微求解方法[12]实现水热偏微分方程的反向传播。

循环神经网络 (RNN) 通常使用基于线性变换和非线性激活函数的状态更新方程:

$$h_t = \sigma(W_h h_{t-1} + W_x x_t + b_h) \quad (9)$$

其中 σ 表示激活函数; h_{t-1} 和 h_t 分别表示上一时刻和当前时刻的隐藏状态; W_h 和 W_x 是权重矩阵, 分别连接上一个隐藏状态和当前输入 x_t ; b_h 表示偏置。NoahPy 将 RNN 的核心循环结构与改进的 Noah LSM 相结合, 将 Noah LSM 物理方程(4), 融入 RNN 核心循环结构 (图 1) 使用 Noah LSM 模型的控制方程来更新每个时刻的状态, 使得状态变量的迭代过程严格遵守物理方程:

$$s_t = F_{Noah LSM}(s_{t-1}, x_t, \vec{\beta}) \quad (10)$$

其中, $F_{Noah LSM}$ 代表 Noah LSM 物理方程(4)的抽象表示, 其中最主要的方程为控制水热传导的偏微分方程; $\vec{\beta}$ 表示模型参数; s_{t-1} 和 s_t 分别代表上一时刻和当前时刻的状态。不同于原始 RNN 每个时间步的输入输出 h_{t-1} 和 h_t 通常为隐式的状态, 经过我们改进的模型输入输出 s_{t-1} 和 s_t 是具有明确物理意义的状态变量, 例如土壤湿度、温度等。反向传播过程依然遵循与传统 RNN 相似的方式, 采用时间反向传播算法 (BPTT) [13] 计算梯度, 其具体的微分表达式通过 Pytorch 框架的自动微分机制解析。此外, 我们将模型实现为向量化计算, 以最大限度地利用深度学习平台的并行计算能力。

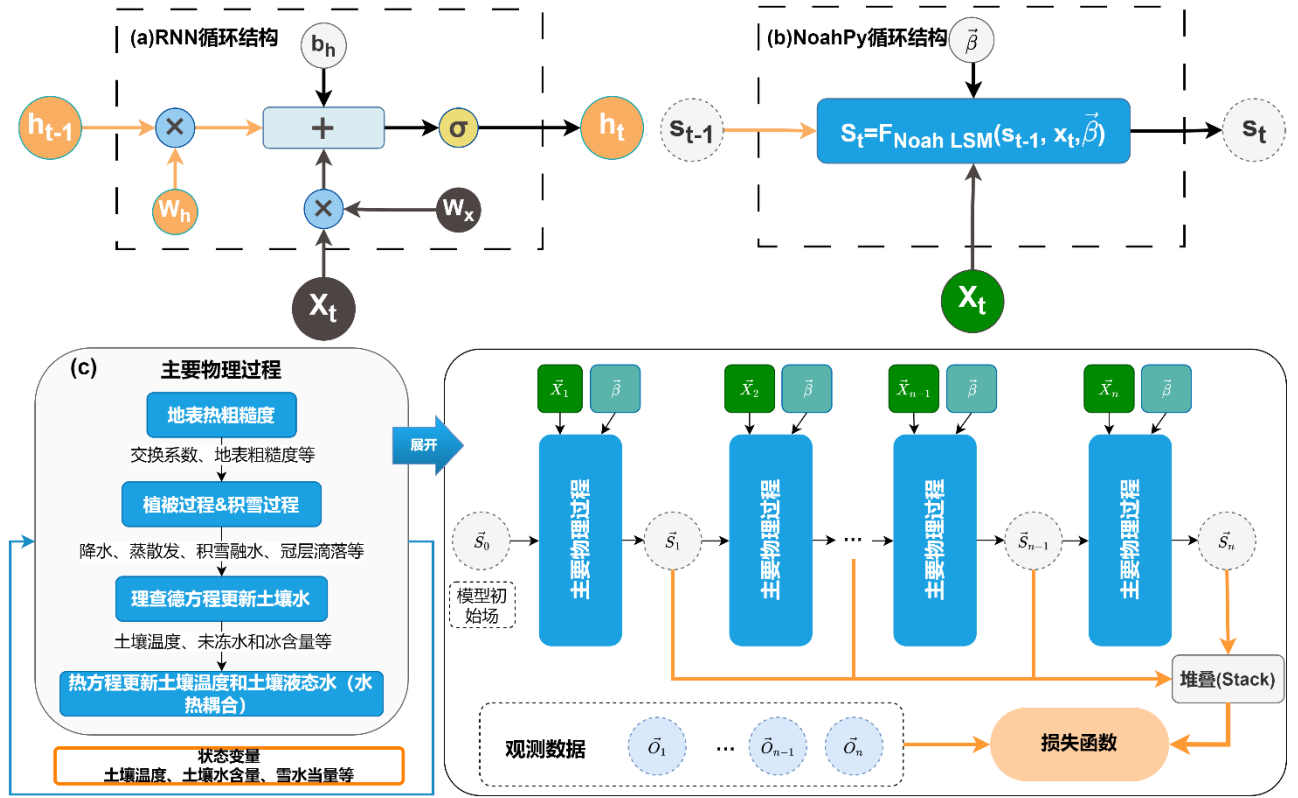


图 1 基于循环神经网络（RNN）的 NoahPy 架构。（a）一般 RNN 循环单元；（b）NoahPy 循环单元；（c）NoahPy 编码为 RNN 架构和展开的示意， \bar{X}_n 、 \bar{S}_n 和 \bar{O}_n 表示第 n 时刻的气象驱动向量、状态向量和观测向量。 $\vec{\beta}$ 表示模型参数向量。

Fig. 1 NoahPy architecture based on Recurrent Neural Network (RNN). (a) General RNN recurrent cell; (b) NoahPy recurrent cell; (c) NoahPy encoded as an RNN and its unfolded representation. \bar{X}_n 、 \bar{S}_n and \bar{O}_n represent the meteorological forcing vector, state vector, and observation vector, respectively. $\vec{\theta}$ represents the vector of model parameters.

3 Noah LSM 模拟能力复现测试

为了测试 NoahPy 具有复现改进的 Noah LSM 的模拟能力，我们使用中国气象驱动数据（ITP-forcing）[14]在青藏高原区域中随机选择了三个格网同时使用 NoahPy 和改进的 Noah LSM 进行模拟，分别为 Grid1（28.75°N，93.85°E）、Grid2（34.75°N，98.25°E）和 Grid3（37.55°N，100.55°E）。模拟时间为 2000-2010 年，使用 1999 年的数据预热 50 次，取最后一次模拟结果的最后一天数据作为正式模拟的初始场，包括了土壤温度、土壤总含水量、土壤液态水和地表温度。土壤类型使用 MSTD 数据集[7]，植被数据使用 1: 100 万中国植被类型图[15]，由于本试验仅对 NoahPy 和改进的 Noah LSM 进行对比，因此模型参数均使用植被类型和土壤类型对应的默认查找表参数。模型土壤层共设置 18 层，深度 15.2m。分别使用三个指标来评价模型模拟的性能，分别为偏差（Bias）、相关性（Corr）和纳什效率系数（NSE）：

$$\text{Bias} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - y_i^*) \quad (11)$$

$$R = \frac{\sum_{i=1}^N [(y_i - \bar{y})(y_i^* - \bar{y}^*)]}{\sqrt{\sum_{i=1}^N [(y_i - \bar{y})^2]} \sqrt{\sum_{i=1}^N [(y_i^* - \bar{y}^*)^2]}} \quad (12)$$

$$\text{NSE} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N [(y_i - \bar{y})^2]}{\sum_{i=1}^N [(y_i^* - \bar{y}^*)^2]} \quad (13)$$

其中, y_i 为 NoahPy 一个时间步长上的模拟值; \bar{y} 为 y_i 的均值; y_i^* 为改进的 Noah LSM 一个时间步长上的模拟值; \bar{y}^* 为 y_i^* 的均值; N 为总样本数。

模拟结果表明, 在 0.1m、0.4m、0.8m、1.3m 和 2.3m 这五个模拟深度上, NoahPy 模拟的土壤温度和土壤液态水含量的值与和改进的 Noah LSM 模拟的值保持一致 (图 2)。在土壤液态水的模拟方面, 相比于土壤温度, 有一些零散的点与改进的 Noah LSM 存在偏差 (图 2 b, d, f), 这可能是在数值求解中的误差所导致。此外, NoahPy 在深层土壤中依然保持与表层相当的高精度, 在 1.3m 和 2.5m 深度, 土壤温度和液态水的 NSE 系数接近 1.0 (图 2 i, j), 数值误差并未随着深度增加而放大, 这表明 NoahPy 在数值求解上具有较高的稳定性。总体来看, 不论是土壤温度还是土壤液态水的模拟, 每一层的 NSE 系数均大于 0.99, 偏差小于 0.01, 这表明 NoahPy 完全具有复现改进的 Noah LSM 的能力。

4 反向传播能力测试

为了确保 NoahPy 具有反向传播更新参数的能力, 需要对其展开验证。使用唐古拉 (TGL) 站点 2007 年 4 月 1 日到 2010 年 12 月 31 日的日尺度气象观测数据, 包括气温、风速、湿度、短波辐射、长波辐射和降水, 以驱动 NoahPy 模型; 站点的活动层观测温度和土壤液态水含量数据用于反向训练模型参数。选择 2007 年 4 月 1 日到 2009 年的观测数据用于训练, 2010 年的数据用于验证。根据观测站点所使用的土壤深度, NoahPy 模型土壤分层设置为 20 层, 包括浅层的 10 层 (0.045, 0.091, 0.166, 0.289, 0.493, 0.829, 1.2, 1.6, 2.0 和 2.4m) 和深层的 10 层 (2.8, 3.8, 4.8, 5.8, 6.8, 7.8, 8.8, 10.8, 12.8 和 14.8m), 浅层土壤比较密集以适应地表土壤温度和土壤液态水含量的快速变化。下边界深度设置为 40m, 下边界温度参考文献[2]给定。

选取前 10 层土壤 4 个与土壤液态水含量相关的敏感参数, 分别为饱和土壤导水率 (K_s)、饱和含水量 (θ_s)、饱和土壤基质势 (ψ_s) 和孔径分布系数 (b) 作为反向传播的目标参数, 这些参数的取值范围列于表 1 ([16-19]), 初始参数值在该范围内随机选取。考虑到 TGL 实际的土壤类型[3], 在不同的土壤深度的土壤性质接近, 但不完全相同, 因此在优化的过程中对于相同的土壤类型, 参数之间取值差异不应该超过 10%[20]。

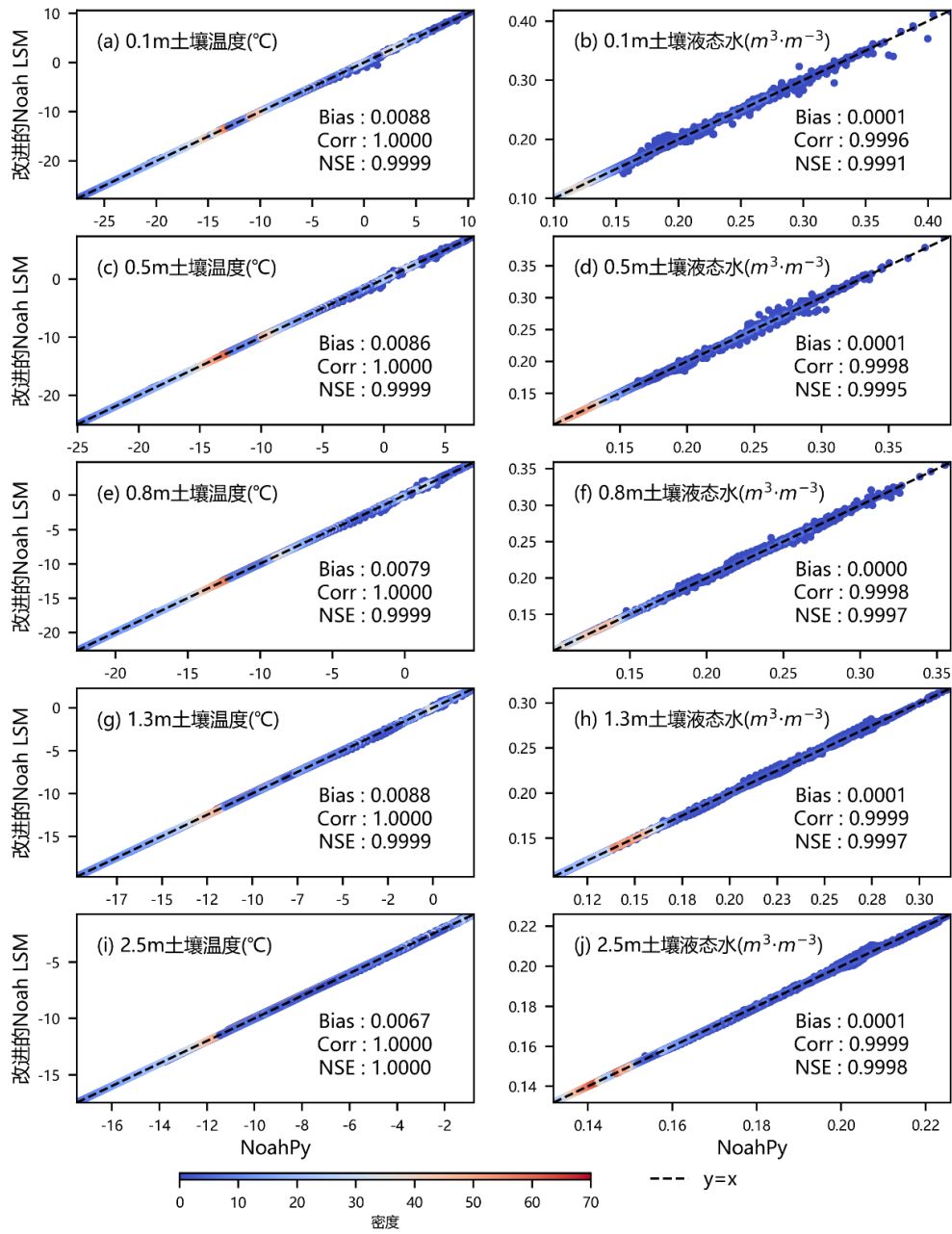


图 2 NoahPy 和改进的 Noah LSM 在三个随机选择的 0.1° 网格 ($28.75^{\circ}N, 93.85^{\circ}E$; $34.75^{\circ}N, 98.25^{\circ}E$; $37.55^{\circ}N, 100.55^{\circ}E$) 模拟结果

Fig. 2 Comparisons of soil temperature and moisture content simulations of NoahPy and the modified Noah LSM in three randomly selected grid cells ($28.75^{\circ}N, 93.85^{\circ}E$; $34.75^{\circ}N, 98.25^{\circ}E$; $37.55^{\circ}N, 100.55^{\circ}E$)

表 1 反向传播优化目标参数及其取值范围

Table 1 Target parameters to be optimized by backpropagation and their value ranges

| 参数 | 符号 (单位) | 取值范围 |
|---------|--|-----------|
| 饱和导水率 | $K_s(\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$ | 1E-7-6E-3 |
| 饱和含水量 | $\theta_s(\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3})$ | 0.3-0.65 |
| 饱和土壤基质势 | $\psi_s(\text{m}\cdot\text{m}^{-1})$ | 0.01-0.65 |
| 孔径分布系数 | $b(\text{无量纲})$ | 2.5-12 |

本研究使用的观测数据最大深度为 2.45 米，对应于模型设置的第 10 层土壤。因此，选取模型模拟的前 10 层土壤液态水含量数据，并将其插值到与实测深度一致后，计算 NSE 作为损失函数用于优化模型参数。在优化的过程中，采用广泛使用的 Adam 优化器[21]并将学习率设置为 0.0005。一阶矩衰减率和二阶矩衰减率分别使用默认值 0.9 和 0.999，这些参数设置在深度学习任务中已被广泛验证具有较好的表现。该优化器结合了动量方法和自适应学习率的思想，能够有效调整学习率并加速模型收敛的过程。此外，我们还使用了 ReduceLROnPlateau 学习率调度算法，通过监控模型在验证集上的 NSE 指标，自动调整学习率以便模型能够更好地跳出局部最优解并实现更快的收敛。最大训练 epoch 设置为 300，并配置 ReduceLROnPlateau 为在每经过 10 个 epoch 后，若验证期未有明显改善，则将学习率降低为原来的 0.1，同时设置最小学习率为 $1\text{e-}6$ ，避免学习率过低导致的训练停滞。

在参数优化的过程中，NSE 从最初的-0.2 逐步优化至 0.84（图 3），这表明了 NoahPy 具有反向传播的能力，其能够正确根据观测数据反向优化目标参数。经过反向传播优化后的参数在率定期和验证期都与观测值具有非常好的一致性，除了 2.45m 以外，所有层的土壤温度与观测值之间的 NSE 都达到了 0.9 以上，RMSE 随着土壤深度增加而减小，这是因为深层土壤的土壤温度波动相比于浅层更小。在 2008-2009 年冬季的强降雪导致的模拟的土壤温度明显低于观测值对模拟精度产生一定程度的影响（图 4 a）。NoahPy 是基于 Noah LSM 进行改进的，Noah LSM 对积雪过程处理相对简单，模拟的积雪深度低于观测值。积雪具有保温作用，较低的导热率阻止了土壤能量向温度更低的外界空气散失的过程，这使得 NoahPy 得到的温度低于实际观测的温度。在 2019 年夏季，1.05m 和 2.45m 观测土壤温度具有较大波动（图 4 d, e），根据热传导理论，深层土壤对外界温度变化的响应更慢，更不容易受到外界短期温度波动的影响，因此这可能是仪器的观测误差所导致。

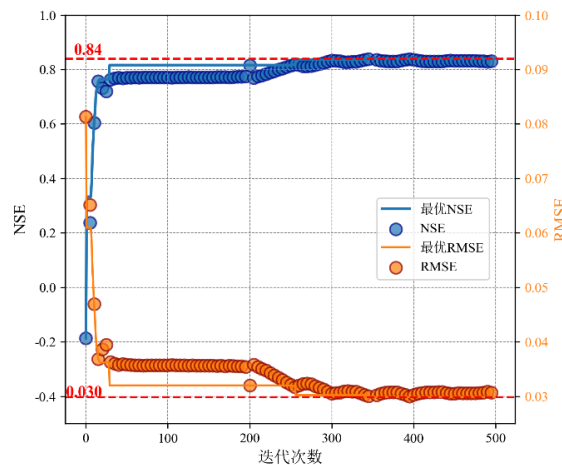


图 3 训练过程中 NSE 和 RMSE 随迭代次数的变化，红色虚线表示最优 NSE (0.84) 和最优 RMSE (0.03)。

Fig. 3 Convergence of NSE and RMSE during training. Red dashed lines indicate the most optimal NSE (0.84) and RMSE (0.03) the model achieved.

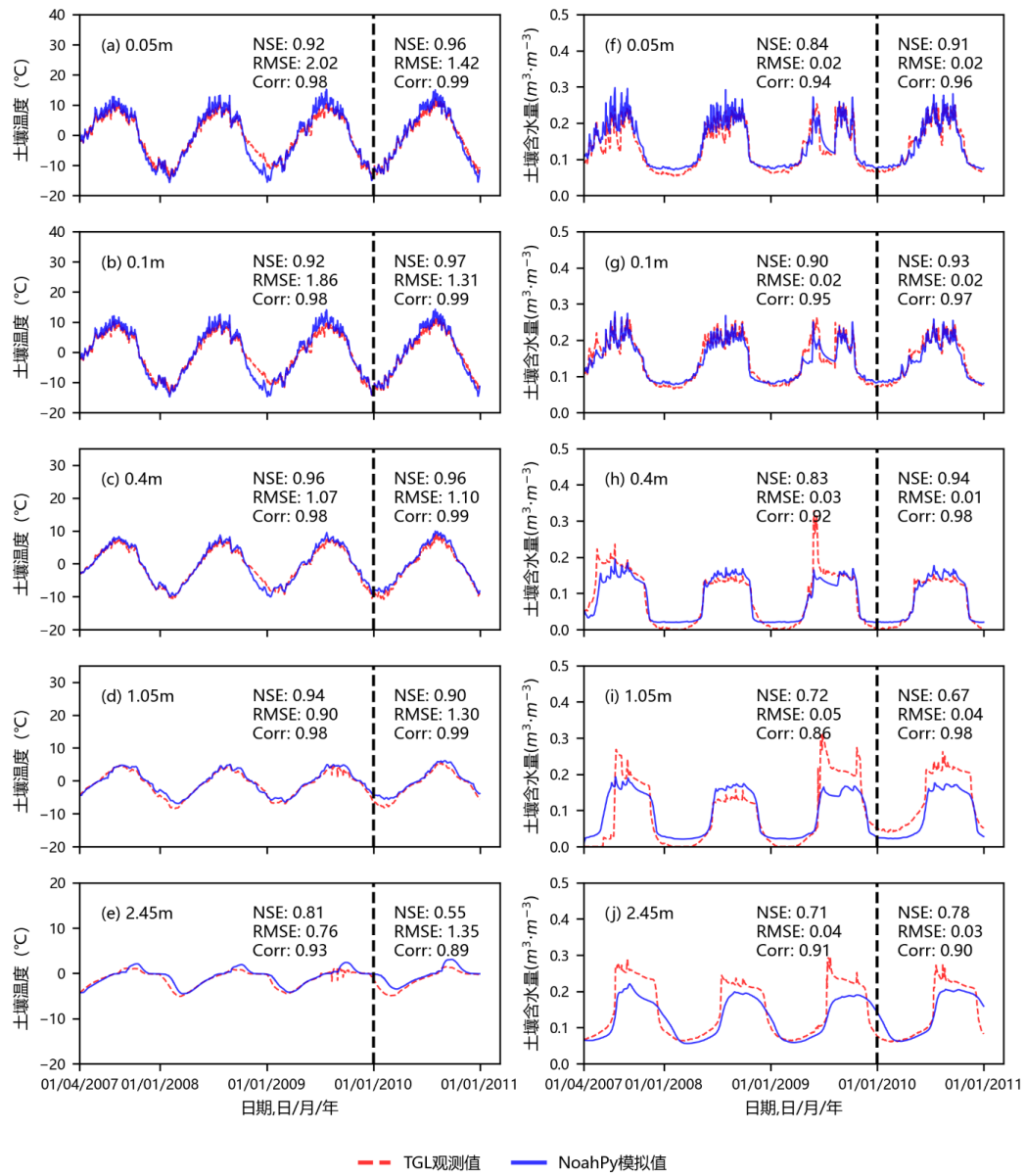


图 4 唐古拉 (TGL) 站点 0.05m、0.1m、0.4m、1.05m 和 2.45m 深度的日尺度模拟与观测地温和液态水含量。率定期为 2007 年 4 月 1 日到 2009 年 (黑色虚线左侧), 验证期为 2010 年 (黑色虚线右侧)。

Fig. 4 Simulated and observed soil temperature and liquid soil water content at various depths (daily; 0.05, 0.1, 0.4, 1.05, and 2.45m) at the Tanggula (TGL) site. The vertical black dashed lines split the calibration (4/1/2007 to 12/31/2009) and validation (1/1/2010 to 12/31/2020) periods.

土壤液态水的模拟精度要低于土壤温度的模拟, 尽管如此, NoahPy 的模拟结果精度也达到了令人满意的水平。各层的 NSE 值都达到了 0.7 以上, RMSE 在 $0.05\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$ 以内。NoahPy 基本能够捕捉到冻融过程及夏季的降水事件中土壤水分的变化。在夏季, 浅层土壤模拟的液态水分与观测值高度一致 (图 4 f, g), 模拟降水事件导致的土壤水波动与观测十分吻合, 而在深层的 1.05m 和 2.45m 则与观测值偏离的较多 (图 4 i, j)。在冬季冻结阶段, 除了在 0.4m 和 1.05m 模拟值明显高于观测值, 其余各层模拟结果同观测值较为吻合。然而, 现有的研究表明, 由于土壤颗粒同水分子间的分子间作用力, 即使在冰点温度以下, 液态水也存在于冻结的土壤中。而在 0.4m 和 1.05m, 观测到的冬季未冻水含量为 $0\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$ (图 4 h, i), 这可能是观测仪器在含水量较低时存在误差造成的。除此以外, NoahPy 中基于 Campbell 公式的土壤水力参数化方案

未能考虑冰吸力效应和有效孔隙度作用的影响。冻结锋面的冰吸力会影响土壤水的重分配，而忽略这一机制可能导致冬季液态水含量的高估[20]。在 2019 年夏季，观测到 0.4m、1.05m 和 2.45m 土壤液态水含量的剧烈增加（图 4h, i, j），而在浅层的 0.05m 和 0.1m（图 4f, g）并没有观测到对应的增加或减少，这表明水分补给并非来自上层土壤。由于研究区域地势平坦，不太可能存在侧向水流补给，因此这可能也是仪器误差所导致的。总体来说，各个深度的模拟结果都证明，经过参数的反向传播优化，NoahPy 能较好的模拟唐古拉站活动层复杂冻融循环过程中土壤温度和液态水含量的季节性变化。

5 模拟性能评估

我们使用传统地学领域广泛使用的参数优化方法 SCE-UA[22]与 NoahPy 梯度下降的方法进行了对比。SCE-UA 用于对 Noah LSM 和改进的 Noah LSM 进行参数优化，NoahPy 则使用基于梯度下降的 Adam 方法。NoahPy、Noah LSM 和改进的 Noah LSM 模型的设置以及参数率定设置如上文所述，其中 Noah LSM 没有考虑土壤异质性，因此土壤类型设置为表层土壤的类型。TGL 站点气象观测用于驱动模型，站点的活动层观测数据用于反向优化参数。最大的迭代次数设置为 500 次，并重复运行 10 次算法，并对比这三种方法的性能。为了进一步明确不同模型间的性能差距，除了 NSE，我们进一步计算模型的克林-古普塔效率（KGE）并对其性能进行了显著性检验。KGE 能够同时考虑模型预测的准确度、偏差和相关性，综合反映了模型对水热过程的模拟能力。

$$KGE = 1 - \sqrt{(\text{Corr} - 1)^2 + (\alpha - 1)^2 + (\gamma - 1)^2} \quad (14)$$

其中 Corr 表示相关性； α 表示模拟值与观测值均值之比，通常用于衡量模拟与观测之间的偏差； γ 表示模拟值与观测值变异系数之比，用于衡量模拟与观测的波动差异。使用 Friedman 检验评估模型的在所有深度的水热 KGE 值是否存在统计上的显著差异。若 $p < 0.05$ ，说明至少有一个模型的性能显著不同。为进一步确定具体哪些模型之间存在差异，我们进行了 Dunn 事后检验，当 $p < 0.05$ 时，表明这两个模型在统计上具有显著的性能差异。

基于梯度下降的优化方法展现了强大的能力，在优化的初期，NoahPy 结合 Adam 优化器利用自适应调整学习率的机制，能够快速收敛，显著降低目标函数值，使得模型在迭代 100 次时已经达到较高的精度（图 5）。传统的 SCE-UA 率定 Noah LSM 和改进的 Noah LSM 虽然能够提供较为稳定的优化路径，但其收敛速度相对较慢。SCE-UA 方法的全局搜索能力在面对复杂的优化空间时具有优势，能够避免陷入局部最优解，但在较大维度的参数空间中，其优化过程可能会显得更加缓慢（图 5），需要更多的迭代次数获得到最优解。

从土壤温度来看，经过率定后的三个模型模拟的结果均具有较小的不确定性，在 0.05m（图 6 a, d, g）和 0.4m（图 6 b, e, h）的深度上，三种模型模拟的 NSE 值均在 0.9 以上。然而，在深层（2.45m）土壤温度模拟，虽然三个模型的相关系数仍保持在 0.9 以上，表明它们能够反映温度波动的趋势，但原始的 Noah LSM 模型表现出明显的低估偏差。具体而言，Noah LSM 的均方根误差（RMSE）达到了 1.68°C （图 6 i），显著高于 NoahPy 的 0.51°C （图 6 c）和改进 Noah LSM 的 0.85°C （图 6 f）。这种偏差可能部分源于原始 Noah LSM 未能充分考虑土壤垂直异质性的影响——土壤类型不同，其土壤热力学和水力学性质差异显著，从而影响了土壤中能量的传输过程。尤其在深层，由于能量需要更长时间传递至下层土壤，热力学性质的差异影响对深层土壤影响更大。

从土壤液态水模拟结果来看，NoahPy 和改进的 Noah LSM 均具有较好的模拟结果，三层的 RMSE 均小于 $0.05\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3}$ 。土壤液态水含量的季节性波动能够正确模拟，在冻结和融化的过度时期，土壤水发生相变，液态水含量的迅速变化也与观测一致。相比而言，原始的 Noah LSM 无法模拟夏季由于降水导致的土壤水波动，同时对于冬季的液态水含量也存在显著的模拟误差，在深层（2.45m）NSE 出现了负值-0.09（图 7 i），模拟的土壤水融化过程与实际相比存在严重的低估。总体而言，原始的 Noah LSM 在土壤水的

模拟方面具有较低的精度，在深层土壤存在显著偏差，这与先前的研究一致[3]。

Friedman 对所有模型水热 KGE（表 2）检验 p 值接近 0，这表明了不同模型间存在显著的性能差异。Dunn 的检验进一步表明 NoahPy 和改进的 Noah LSM 相比原始 Noah LSM 有明显的性能差异，其 p 值分别为 0.0004 和 0.0317 均小于 0.05。NoahPy 与改进的 Noah LSM 之间的 p 值为 0.1659，未达到显著性水平。从各层的模拟精度来看，NoahPy 在所有土层上的表现均优于其他模型。尽管 NoahPy 与改进的 Noah LSM 采用相同的物理过程和参数化方案，其性能差异主要源于所使用的参数优化算法。基于梯度下降的 Adam 优化算法相较于 SCE-UA 算法具有更快的收敛速度。在 500 次迭代的过程中，Adam 算法仅需约 100 次迭代即可接近最优解，而 SCE-UA 算法则需要更多的迭代才能逐步收敛到最优解。同时，在参数优化过程中，基于梯度下降的优化算法也展现出了更高的稳定性，在收敛的过程中具更小的不确定性（图 5）。从优化得到的模拟结果来看，在所有的深度上 NoahPy 模拟的不确定性相比改进的 Noah LSM 更小，尤其是在浅层（0.05m）和深层（2.45m）冬季的液态水模拟中（图 7 a, c），不确定性远小于改进的 Noah LSM（图 7 d, f）。

表 2 NoahPy、率定后 Noah LSM、改进 Noah LSM 在 TGL 站点不同深度的土壤温度和土壤液态水的 KGE 值

Table 2 KGE values of soil temperature and soil liquid water at various depths at the TGL site using NoahPy, the calibrated

Noah LSM, and the calibrated modified Noah LSM

| 深度 (m) | | NoahPy | 改进 Noah LSM | 原始 Noah LSM |
|-----------|------|--------|----------------|----------------|
| 土壤 温度 | 0.05 | 0.83 | 0.79 | 0.79 |
| | 0.1 | 0.86 | 0.81 | 0.8 |
| | 0.4 | 0.93 | 0.91 | 0.74 |
| | 1.05 | 0.89 | 0.85 | 0.57 |
| | 2.45 | 0.93 | 0.83 | 0.28 |
| 土壤 液态水 | 0.05 | 0.91 | 0.82 | 0.51 |
| | 0.1 | 0.95 | 0.88 | 0.69 |
| | 0.4 | 0.64 | 0.51 | 0.23 |
| | 1.05 | 0.64 | 0.52 | 0.31 |
| | 2.45 | 0.8 | 0.56 | 0.27 |

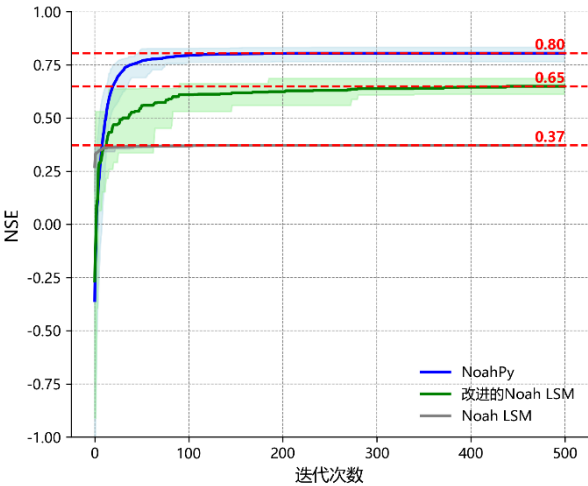


图 5 NoahPy、改进 Noah LSM 和 Noah LSM 优化迭代过程最佳 NSE 变化。阴影表示最佳 NSE 值的 95%分位数区间。

Fig. 5 Convergence of NoahPy, the modified Noah LSM, and the original Noah LSM in terms of NSE. The shaded area represents the 95% quantile range.

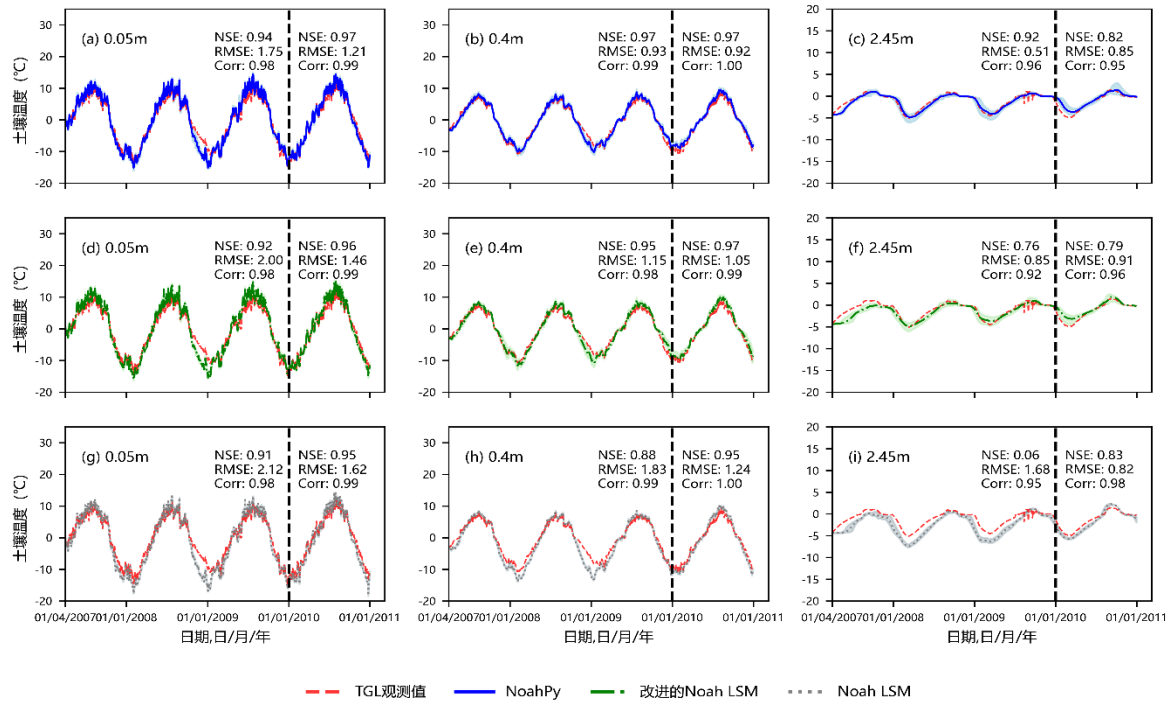


图 6 NoahPy、率定后 Noah LSM、改进 Noah LSM 在 TGL 站点不同深度 (0.05、0.4、2.45m) 土壤温度的日尺度模拟结果。阴影表示 95%模拟不确定性。率定期为 2007 年 4 月 1 日到 2009 年 (黑色虚线左侧), 验证期为 2010 年 (黑色虚线右侧)。

Fig. 6 Simulated daily soil temperature variations at various depths (0.05, 0.4, and 2.45m) at the TGL site using NoahPy, the calibrated Noah LSM, and the calibrated modified Noah LSM. Noah LSM and the modified Noah were both calibrated by the SCE-UA method. The shaded area represents 95% uncertainty. The black dashed lines delineate calibration (4/1/2007 to 12/31/2009) and validation (1/1/2010 to 12/31/2010) periods.

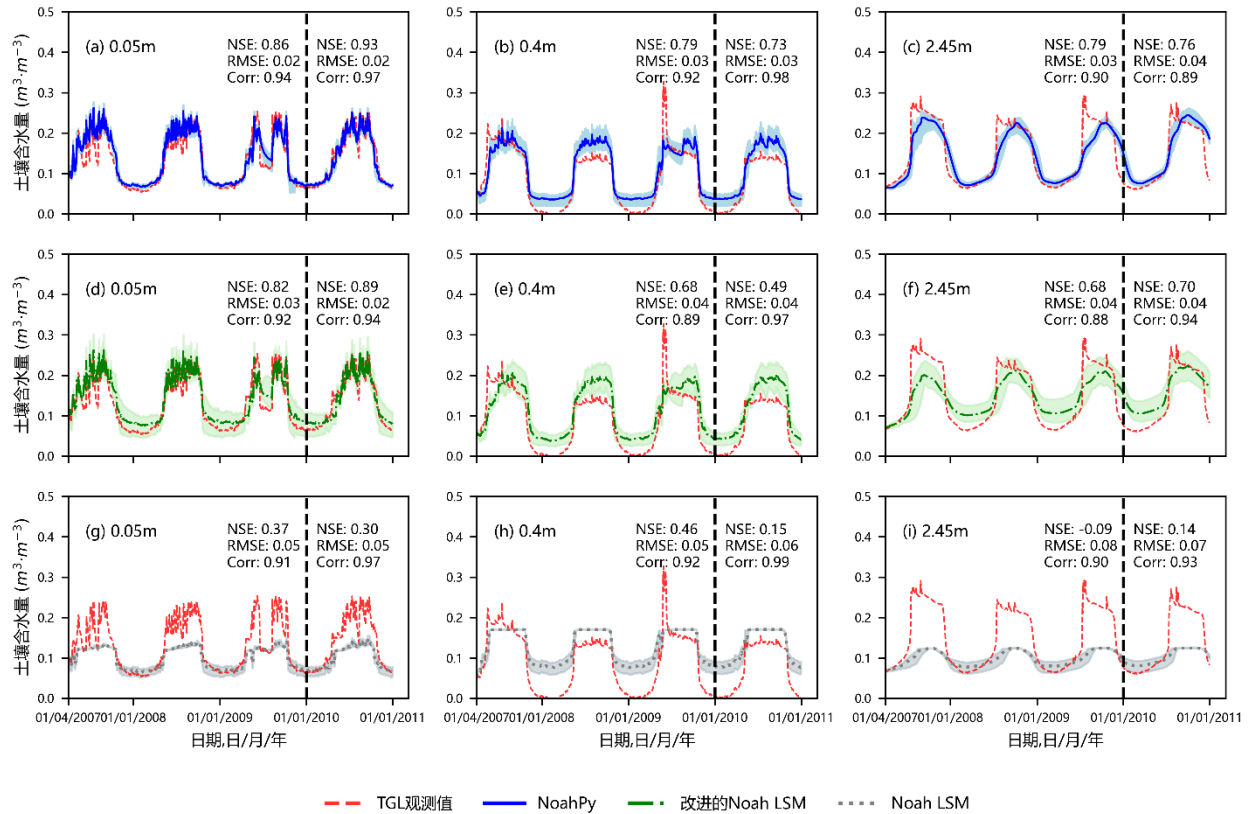


图 7 NoahPy、率定后 Noah LSM、改进 Noah LSM 在 TGL 站点不同深度 (0.05、0.4、2.45m) 土壤液态水的日尺度模拟结果。阴影部分表示 95%模拟不确定性。率定期为 2007 年 4 月 1 日到 2009 年 (黑色虚线左侧), 验证期为 2010 年 (黑色虚线右侧)。

Fig. 7 Simulated daily liquid soil water dynamics at various depths (0.05, 0.4, and 2.45m) at the TGL site using NoahPy, the calibrated Noah LSM, and the calibrated modified Noah LSM. Noah LSM and the modified Noah were both calibrated by the SCE-UA method. The shaded area represents 95% uncertainty. The black dashed lines delineate calibration (4/1/2007 to 12/31/2009) and validation (1/1/2010 to 12/31/2010) periods.

参考文献 (References):

- [1] CHEN F, JANJÍČ Z, MITCHELL K. Impact of Atmospheric Surface-layer Parameterizations in the new Land-surface Scheme of the NCEP Mesoscale Eta Model. *Boundary-Layer Meteorology*, 1997, 85(3): 391-421. doi: 10.1023/A:1000531001463.
- [2] CHEN H, NAN Z, ZHAO L, et al. Noah Modelling of the Permafrost Distribution and Characteristics in the West Kunlun Area, Qinghai-Tibet Plateau, China. *Permafrost and Periglacial Processes*, 2015, 26(2): 160-174. doi: 10.1002/ppp.1841.
- [3] WU X, NAN Z, ZHAO S, et al. Spatial modeling of permafrost distribution and properties on the Qinghai-Tibet Plateau. *Permafrost and Periglacial Processes*, 2018, 29(2): 86-99. doi: 10.1002/ppp.1971.
- [4] YANG K, KOIKE T, ISHIKAWA H, et al. Turbulent Flux Transfer over Bare-Soil Surfaces: Characteristics and Parameterization. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 2008, 47(1): 276-290. doi: 10.1175/2007JAMC1547.1.
- [5] CÔTÉ J, KONRAD J M. A generalized thermal conductivity model for soils and construction materials. *Canadian Geotechnical Journal*, 2005, 42(2): 443-458. doi: 10.1139/t04-106.
- [6] ZHANG X, SUN S, XUE Y. Development and Testing of a Frozen Soil Parameterization for Cold Region Studies. *Journal of Hydrometeorology*, 2007, 8: 690-701. doi: 10.1175/JHM605.1.
- [7] WU X, NAN Z. A multilayer soil texture dataset for permafrost modeling over Qinghai-Tibetan Plateau. 2016 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS). Beijing, China: IEEE, 2016: 4917-4920. doi:

10.1109/IGARSS.2016.7730283.

- [8] JI H, NAN Z, HU J, et al. On the Spin-Up Strategy for Spatial Modeling of Permafrost Dynamics: A Case Study on the Qinghai-Tibet Plateau. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 2022.doi: 10.1029/2021MS002750.
- [9] ZHANG G, NAN Z, HU N, et al. Qinghai-Tibet Plateau Permafrost at Risk in the Late 21st Century. *Earth's Future*, 2022, 10(6): e2022EF002652. doi: 10.1029/2022EF002652.
- [10] PAN H L, MAHRT L. Interaction between soil hydrology and boundary-layer development. *Boundary-Layer Meteorology*, 1987, 38(1-2): 185-202. doi: 10.1007/BF00121563.
- [11] KALNAY E, KANAMITSU M. Time Schemes for Strongly Nonlinear Damping Equations. *Monthly Weather Review*, 1988, 116(10): 1945-1958. doi: 10.1175/1520-0493(1988)116<1945:TSFSND>2.0.CO;2.
- [12] PASZKE A, GROSS S, MASSA F, et al. PyTorch: an imperative style, high-performance deep learning library. *Proceedings of the 33rd International Conference on Neural Information Processing Systems*. Red Hook, NY, USA: Curran Associates Inc., 2019.
- [13] WERBOS P J. Backpropagation through time: what it does and how to do it. *Proceedings of the IEEE*, 1990, 78(10): 1550-1560. doi: 10.1109/5.58337.
- [14] HE J, YANG K, TANG W, et al. The first high-resolution meteorological forcing dataset for land process studies over China. *Scientific Data*, 2020, 7(1): 25. doi: 10.1038/s41597-020-0369-y.
- [15] ZHANG X S. *Vegetation map of the People's Republic of China (1:1 000 000)*. Geology Press, 2007. [张新时. 中华人民共和国植被图 (1:1 000 000) . 地质出版社, 2007]
- [16] ROSERO E, YANG Z L, GULDEN L E, et al. Evaluating Enhanced Hydrological Representations in Noah LSM over Transition Zones: Implications for Model Development. *Journal of Hydrometeorology*, 2009, 10(3): 600-622. doi: 10.1175/2009JHM1029.1.
- [17] STUURUP J C, VAN DER ZEE S E A T M, VOSS C I, et al. Simulating water and heat transport with freezing and cryosuction in unsaturated soil: Comparing an empirical, semi-empirical and physically-based approach. *Advances in Water Resources*, 2021, 149: 103846. doi: 10.1016/j.advwatres.2021.103846.
- [18] LI P, WANG D M, DING C, et al. Distribution characteristics of soil saturated hydraulic conductivity and soil bulk density in a small watershed in the alpine zone of the Loess Plateau. *Science of Soil and Water Conservation*, 2019, 17(4): 9-17. [李平, 王冬梅, 丁聪, 等. 黄土高寒区小流域土壤饱和导水率和土壤密度的分布特征. 中国水土保持科学, 2019, 17(4): 9-17.]
- [19] WANG Z W, SHAO M A, HUANG L M, et al. Distribution and Influencing Factors of Soil Saturated Hydraulic Conductivity Under Different Land Use Patterns in Eastern Qinghai Province. *Journal of Soil and Water Conservation*, 2021, 35(3): 150-155. [王紫薇, 邵明安, 黄来明, 等. 青海省东部不同土地利用方式下土壤饱和导水率分布及其影响因素. 水土保持学报, 2021, 35(3): 150-155.]
- [20] ZHAO Y, NAN Z, CAO Z, et al. Evaluation of Parameterization Schemes for Matric Potential in Frozen Soil in Land Surface Models: A Modeling Perspective. *Water Resources Research*, 2023, 59(6): e2023WR034644. doi: 10.1029/2023WR034644.
- [21] KINGMA D P, BA J. Adam: A Method for Stochastic Optimization. *arXiv:1412.6980*. (2017-01-30)[2025-05-08]. <http://arxiv.org/abs/1412.6980>.
- [22] DUAN Q, SOROOSHIAN S, GUPTA V K. Optimal use of the SCE-UA global optimization method for calibrating watershed models. *Journal of Hydrology*, 1994, 158(3-4): 265-284. doi: 10.1016/0022-1694(94)90057-4.