

MODFLOW 中不同方程组求解方法差异分析

陈劲松, 万 力

(中国地质大学, 北京 100083)

摘要: MODFLOW 是目前世界范围内被广泛使用的地下水渗流模型。为分析 MODFLOW 中不同方程组求解方法及求解参数组合对计算结果精度的影响, 对同一典型水文地质模型进行了一系列模拟试验。结果表明: 对于给定条件, 选用 PCG2 法或 SIP 法 (如果求解参数组合选取恰当) 求解可得到满足精度的结果; 而选用 SSOR 法任何使用的求解参数组合均无法获得满足精度要求的结果。模拟结果同时证实, 除非水均衡误差也相当小, 否则水头变化收敛指标较小时收敛的计算也不能保证计算结果有可靠的精度。

关键词: MODFLOW; 地下水渗流; 数值模拟

中图分类号: P641.8

文献标识码: A

Abstract: MODFLOW is a model of groundwater seepage widely used in the world at present. A series of simulation tests were conducted on the same typical hydrogeologic model to analyze the impacts of different solution methods and combinations of parameters in MODFLOW. The results indicated that the solution may be accurate by using PCG2 method or SIP method for a given condition (if the combination of solution parameters is chosen properly). No accurate results can be obtained by using any combination of solution parameters by SSOR method. Verified by simulation results reliable accuracy of calculated results can not be guaranteed for small head change convergence index unless the error of water balance is small too.

Key words: MODFLOW; groundwater seepage; numerical simulation

MODFLOW (Modular Three-dimensional Finite-Difference Groundwater Flow Model) 是由美国地质调查局的 McDonald 和 Harbaugh 于 80 年代开发出来的一套专门用于孔隙介质中地下水运动数值模拟的三维有限差分计算程序。自问世以来, MODFLOW 已在全美以至全世界范围内的环境保护、水资源利用、城乡发展规划等众多行业和部门得到广泛应用, 成为最为普及的地下水运动数值模拟计算程序^[1,8]。目前流行的基于 MODFLOW 的商业软件主要有 GMS、VModflow、PModflow 等。高性能 PC 机价格下降使 MODFLOW 的普及成为可能, 也使得进行地下水运动数值模拟时无需象以往那样过分关注计算的收敛速率, 这导致容易忽视不同方程组求解方法之间的差异及其对结果的影响。但 MODFLOW 中不同的方程组求解方法及其求解参数组合均可能对模拟计算结果的精度产生影响, 收敛的计算并不等于计算结果可靠, 某些收敛的计算其结果有可能与实际情况偏离很大^[1]。一般的 MODFLOW 用户进行模拟时往往会选用程序默认的方程组求解方法及其默认求解参数组合, 为比较和探究不同方法和参数组合之间的差异及对结果的影响, 利用 MODFLOW 对同一典

型水文地质模型进行了一系列模拟试验。

1 MODFLOW 中的方程组求解方法

1.1 SIP (强隐式法)

SIP 是一种求解大型线性方程组的迭代解法。由于参数选取时无需做数据试验及高收敛速率等优点, SIP 经常被选作求解方程组的方法^[7]。多数用户一般会选用 MODFLOW 默认的 SIP 并采用默认参数组合。默认参数如下^[2]:

最大迭代次数 50
迭代参数个数 5
加速因子 1.000
水头变化收敛标准 0.01
是否由程序确定迭代种子数 (1 代表 '是')
..... 1

1.2 SSOR (分层逐次超松弛迭代法)

SSOR 也是一种求解大型线性方程组的迭代解

收稿日期: 2001-08-20

作者简介: 陈劲松 (1974-), 男 (汉族), 安徽安庆人, 在读博士。

法。MODFLOW 中的差分网格可按垂向分层(图1), SSOR 中将差分方程按计算单元所在分层进行分类组合, 每一层为一组。迭代时, 利用 Gauss 消元法直接求解每层包含的计算单元, 求得的结果为各计算单元两次迭代之间的水头变化值, 所有层都计算完后称完成一次迭代。一次迭代完成后, 将最大的水头变化与收敛指标相比较, 如果本次迭代得到的水头变化仍大于收敛指标, 则进行下一次迭代; 反之则结束迭代过程^[8]。由 Gauss 消元求得的各计算单元水头差通常要先乘以加速因子 ω 再与收敛指标比较。加速因子 ω 所起的作用是加速收敛速率, 设置 ω 与 SIP 法中设置种子数类似, 均应先做数据试验和误差分析。SSOR 的默认参数如下:

最大迭代次数.....50
加速因子.....1.0000 (通常取值范围为 0.3000 ~ 2.000)
水头变化收敛标准.....0.01

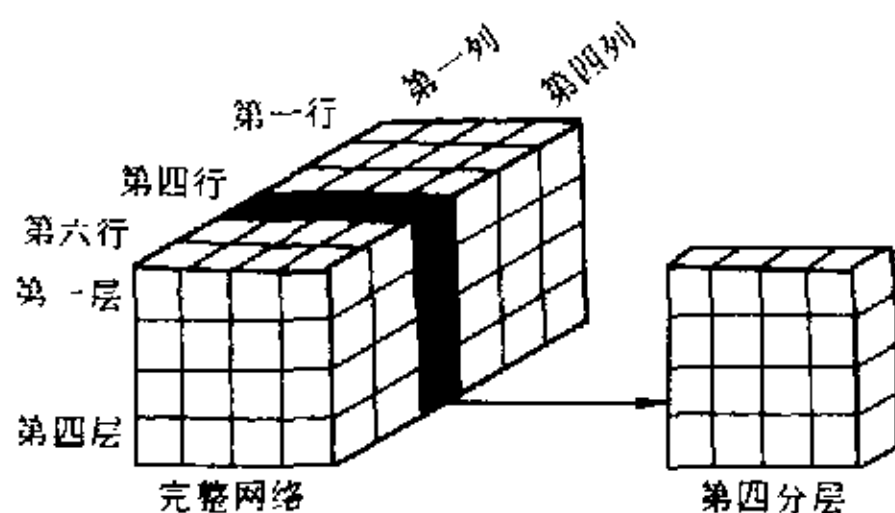


图1 MODFLOW 中差分网格按垂向分层示意

1.3 PCG2 (预条件共轭梯度法 2)

PCG (预条件共轭梯度法) 已经被广泛应用于大型线性方程组的迭代求解^[10,11]。PCG2 是 1990 年 Hill 加入 MODFLOW 中一种方程组求解方法, 1988 年版本的 MODFLOW 中不包括方法。

某些软件中 PCG2 的求解参数由程序自己计算, 用户无法自己定义。PCG 的计算效率主要取决于预条件方法和计算机类型^[6], PCG2 有两种不同的预条件方法: MIC (Modified Incomplete Cholesky Preconditioning) 和 POL (Polynomial Preconditioning), 这两种方法各有其优缺点, MIC 较适用于标量型电子计算机 (Scalar Computers), 而 POL 较适用于向量型电子计算机 (Vector Computers)。多数情况下, PCG2 比 SIP 更有效。但对于非线性问题, PCG2 又常不如 SIP, 非线性问题往往利用 Picard 迭代求解^[5]。在 PCG2 的内循环迭代过程中, 线性方程组的系数矩阵保持不变, 仅为水头本身求解。PCG2 首先根据

内循环的计算结果对系统进行调整, 然后开始新一轮内循环。如果在新一轮内循环中某次迭代的计算结果满足收敛指标, 则表示本时间段的求解收敛。否则将继续进行内循环迭代。结束内循环必须满足迭代次数达到用户在输入数据中指定的“最大内循环迭代次数”或达到收敛指标。内循环结束后, 计算转至外循环。每次外循环迭代开始时, MODFLOW 需要重新计算导水系数等参数以及系数矩阵。

另外, 值得注意的是, PCG2 法计算的收敛指标包括水头收敛指标和单元间流量收敛指标, 只有当这两个指标同时满足时, 计算才以收敛告结束。此次模拟试验所采用的 PCG2 法默认参数如下:

最大外循环迭代次数.....50 (常见取值范围为 1 ~ 100)
最大内循环迭代次数.....5 (常见取值范围为 1 ~ 100)
预条件方法选择标识 (1 或 2)1
1. MIC
2. POL
水头收敛指标.....0.0100
单元间流量收敛指标.....0.0100
MICCG 法中使用的松弛因子 1.0
(通常取值范围为 0.30 ~ 1.0)
多重调用时的分解数.....0 (通常取值范围为 0 ~ 5)

2 MODFLOW 模拟试验

通常认为, 通过对比输入 Theis 公式^[11]对应水文地质模型后的模拟结果与 Theis 公式解析解可检验模型模拟结果的可靠性。在 MODFLOW 中通过下列途径可提高计算结果的精度:

- (1) 减少收敛指标, 同时增大最大迭代次数;
- (2) 改变 SIP 法的参数组合;
- (3) 使用不同的求解方法, 如 SSOR 或 PCG2。

但水量均衡计算也是检验模型模拟结果精度的一个重要指标。多数模型如 MODFLOW, 求解线性方程组结束迭代的标志是两次计算的水头变化值满足给定的水头收敛标准, 而不管水量均衡。这样完全有可能出现水头收敛指标很小时计算收敛而水量均衡方面却存在很大差异。

为比较 MODFLOW 中不同方法及参数组合对结果精度的影响, 利用 MODFLOW 对一个典型的水文地质模型进行了一系列模拟试验。模拟试验所采用

的水文地质模型为：

【试验模型】有一承压含水层，均质等厚，各向同性，天然状态下水力坡度为 0，其导水系数 $T = 0.1 \text{ m}^2/\text{s}$ ，贮水系数 $\mu^* = 0.0001$ 。该含水层中有一口完整井进行抽水试验，抽水量 $Q = 6.3 \times 10^{-2} \text{ m}^3/\text{s}$ ，持续时间 $t = 1440 \text{ min}$ ，距抽水井 900m 处有一观测孔。求抽水井停抽时刻的距离-降深曲线以及抽水过程中观测孔的时间-降深曲线。

根据问题的实际情况，以抽水井为中心取一 $3630 \times 3630 \text{ m}^2$ 的区域作为研究对象，剖分为 121×121 的网格（x, y 方向等间距，间距为 30m）。非稳定流，所有计算单元处的初始水头设为 0，模拟时长 1440min 分为 25 个不等时的时间段，时间段递增因子为 1.2。选用不同的方程组求解方法，可分别求出对应结果。

由于四周边界隔水，可使用虚井模拟边界对观测井处降深的影响^[4]。观测井处的降升曲线反映了实井和所有虚井共同作用的结果。总降升 s 由下式确定^[3]：

$$s = s_p + s_i = \frac{Q}{4\pi T} [W(u_p) + W(u_i)]$$

$$= \frac{Q}{4\pi T} \sum W(u)$$

式中 p, i ——代表抽水和注水井； s ——观测点处总降升； $u = r^2 u^* / 4Tt_0$ 。

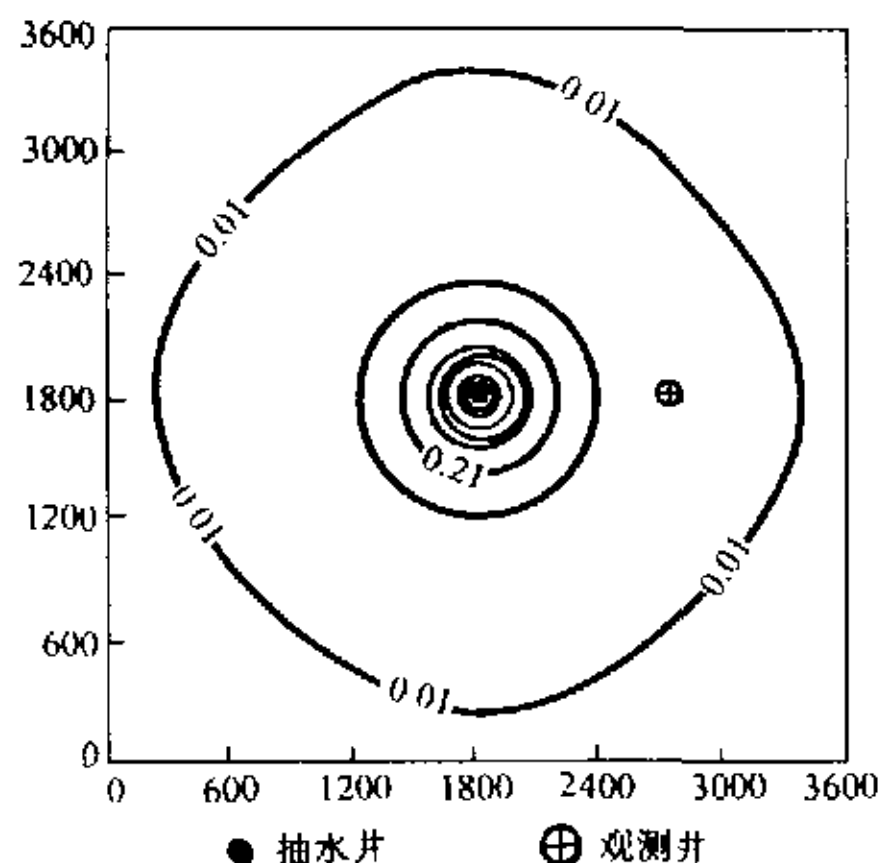


图 2 利用 SIP 默认参数计算的水头降深等值线及模型网格

图 2 所示为利用前述 SIP 法默认参数，MODFLOW 模拟计算抽水 1d (1440min) 后的水头降深等值线。值得一提的是，当 SIP 的参数“收敛指标”设为 0.001 或 0.0001，“最大迭代次数”设为 1000 时，MODFLOW 的计算无法收敛。为比较不同求解

方法的精度，通过调整迭代参数、加速因子、种子数等参数，对于完全相同的模型输入，利用 SIP、SSOR 及 PCG2 计算得到了一系列不同的解。数值计算结果与 Theis 公式^[19]求得的解析解如图 3 所示。

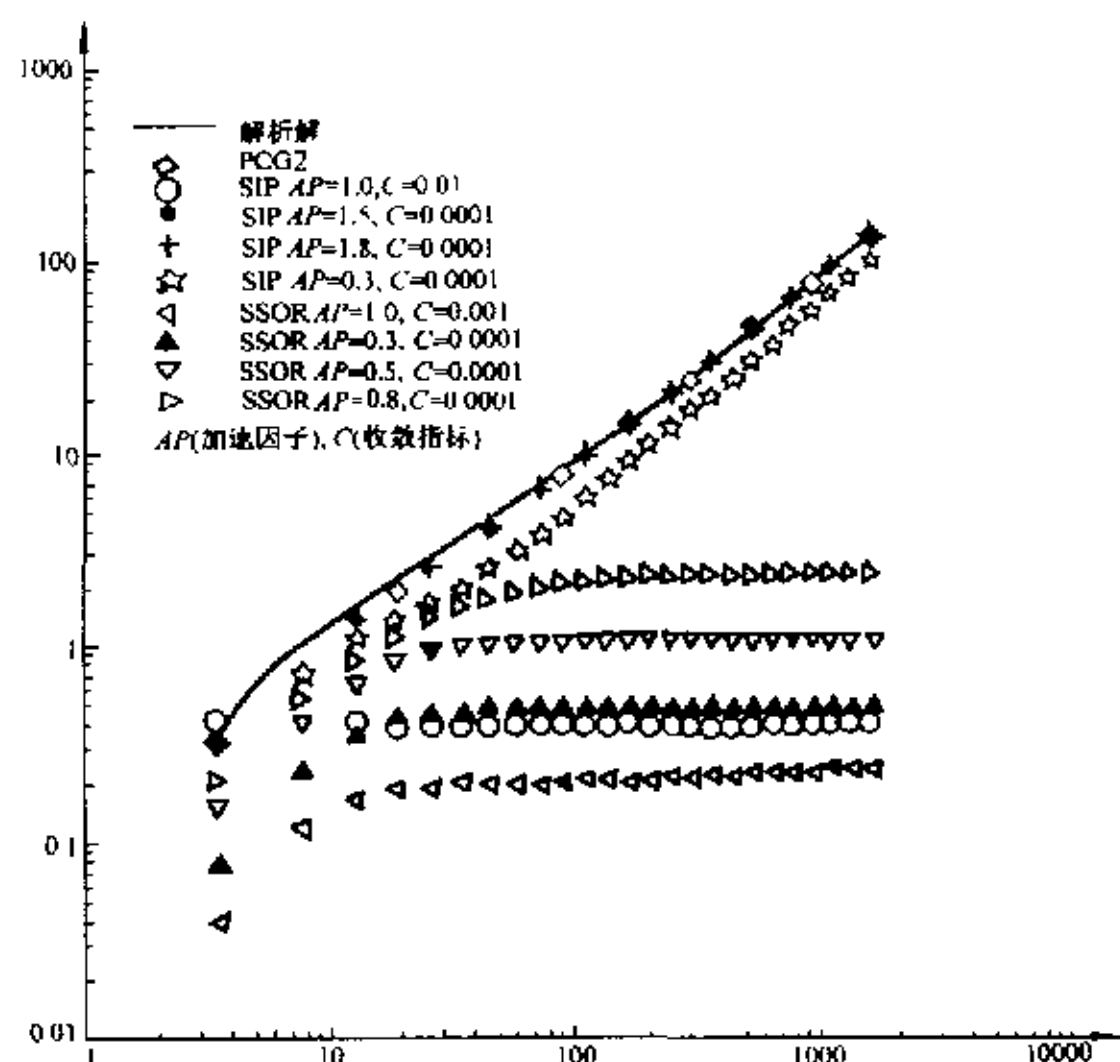


图 3 双对数坐标系下不同求解方法（参数组合）计算的观测井处降深-时间关系

从图 3 中可以看出，使用 SIP 求解时，加速因子等于 1.5 和 1.8 时得到的结果基本相同；不过，表 1 中所列出的水均衡和水头降升数据表明加速因子等于 1.8 时得到的结果更为精确；SSOR 法计算的结果精度较差。测试 PCG2 法与测试 SIP 法和 SSOR 法类似，使用的松弛因子取值范围为 0.1 ~ 1.0，水头变化和流量收敛指标为 0.01 ~ 0.000001，但与 SIP、SSOR 不同的是，PCG2 在不同的参数组合情况下均取得了非常精确的近乎完全相同的结果。PCG2 法的计算结果精确到小数点后 4 位，表明 PCG2 法对所选用的方程组求解参数和收敛指标不是十分敏感。

对比图 3 和表 1 可知，在 MODFLOW 中如果选用 SIP 法且使用恰当的参数组合，或选用 PCG2 法均能得到相当满足精度的结果。

同时还可以看出：同等情况下，SIP 法优于 SSOR 法，PCG2 法最好。模拟结果还表明，MODFLOW 中水均衡计算是检验同等条件下计算结果精度的一个很好指标。表 1 中累积水均衡差小于 1% 的计算结果具有相当高的精度。诚然，要想取得最小水均衡误差，需进行大量的模拟试验和误差分析，以获取适合给定条件的方程求解参数组合。

（下转第 32 页）

下水系统内的煤矿疏干排水和供水一样也是主要集中在第Ⅱ决策区和第Ⅲ决策区,因此,在第Ⅱ和第Ⅲ决策区应充分发挥以供代排优化管理模式,避免局部地段地下水的集中式开采引起地下水位的不均匀下降,力争做到在2008年底内各水源地水位标高在85m以上,以免造成水源地由承压状态向无压状态转化。

4 结语

邯邢水文地质南单元岩溶地下水系统已属于超量开采,是一负均衡水源地,地下水位处于逐年下降趋势,因此,再增加地下水系统新的开采量将导

致地下水位的急剧下降。到2008年12月底,地下水位标高约束在85m,要在第Ⅲ决策区内满足邯峰电厂一期工程水源地 $10.8 \times 10^4 \text{ m}^3/\text{d}$ 的开采量,需关闭王凤煤矿 $6.36 \times 10^4 \text{ m}^3/\text{d}$ 的矿井疏干排水量,且不宜再采用大型集中式开采。区内煤矿疏排水的位置和供水水源地的位置相对较为集中,应充分发挥以供代排的优化管理模式,邯峰电厂二期工程水源地宜规划在第Ⅰ决策区内,地下水开采的优化决策要求各决策区对地下水的开采在面上分散进行,尽量避免集中式大流量开采地下水,造成局部地段地下水位的大幅度下降,引起新的环境地质问题。

(上接第27页)

不同求解方法(参数组合)计算的水位降深与解析解的比较

表1

	收敛 ¹ 指标	平均种 ² 子数	迭代 参数	水均衡 ³ 差(%)	水位降升 ⁴ (cm)
解析解	-	-	-	-	34.6456
PCG2 ⁵	0.01~ 0.000001	-	-	0.011	34.6608
SIP加速因子1.0	0.01	0.00016	5	-198.96	0.10414
SIP加速因子0.3	0.001	0.00016	5	-33.80	24.7523
SIP加速因子1.5	0.001	0.00016	5	-1.30	34.3001
SIP加速因子1.8	0.001	0.00016	5	-0.37	34.6151
SSOR加速因子1.0	0.01	-	-	199.25	0.06096
SSOR加速因子0.3	0.001	-	-	-198.87	0.127
SSOR加速因子0.5	0.001	-	-	-197.85	0.26416
SSOR加速因子0.8	0.001	-	-	-194.46	0.61468

注:1.最小的收敛指标可使计算收敛;2.种子数由MODFLOW决定;3.整个(25个时间步长)计算时间段内累积的水均衡差;4.1440min后观测井处的水位降升;5.松弛因子(取值范围0.1~1.0)不影响计算结果,松弛因子大于1.0后MODFLOW的计算将不收敛。

3 结论

(1)水头变化收敛指标较小时模型收敛并不能保证计算结果精度较高。在SIP和SSOR中选取恰当的矩阵求解参数组合只是其中的一个因素,影响模型结果精度还有许多其他因素。

(2)当收敛指标等于0.0001(或更小)时,大部分参数组合,使SIP和SSOR的计算无法收敛。PCG2不同参数组合产生的计算结果几乎完全相同。

(3)通过不断试验缩小水均衡误差可以找到SIP和SSOR的恰当参数组合,使MODFLOW可以得到精确度非常高的结果,否则模拟计算结果可能非常不精确。

(4)对前述试验模型而言,PCG2是精确度最高的求解方法,试验结果同时表明PCG2法对选用的松弛因子和收敛指标不敏感。

参 考 文 献

[1] McDonald, M. G. and A. W. Harbaugh. 1988. A modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model. Techniques of Water-Resources Investigations of the U. S. Geol. Surv. Chapter A1, Book 6.

[2] Andersen, P. F. 1988. PREMOD (a Preprocessor for MODFLOW). GeoTrans, Inc., Reston, VA.

[3] Domenico, P. A. and F. W. Schwartz. 1990. Physical and Chemical Hydrogeology. John Wiley & Sons, New York. 824 pp.

[4] Ferris, J. G., D. B. Knowles, R. H. Brown, and R. W. Stallman. 1962. Theory of aquifer tests. U. S. Geol. Surv. Water-Supply Paper 1536-E. 174 pp.

[5] Hill, M. C. 1990. Preconditioned Conjugate-Gradient 2 (PCG2), a computer program for solving ground-water flow equations. U. S. Geol. Surv. Water-Resources Investigations Report 90-4048. 43 pp.

[6] Meyer, P. D., A. J. Valocchi, S. F. Ashby, and P. E. Saylor. 1989. A numerical investigation of the conjugate gradient method as applied to three-dimensional groundwater flow problems in randomly heterogeneous porous media. Water Resources Research. v. 25, no. 6, pp. 1440-1446.

[7] Trescott, P. C., G. F. Pinder, and S. P. Larson. 1976. Finite-difference model for aquifer simulation in two dimensions with results of numerical experiments. Techniques of Water-Resources Investigations of the U. S. Geol. Surv. Book 7, Chapter C1, 116 pp.

[8] 吴剑锋, 朱学愚. 由MODFLOW浅谈地下水流数值模拟软件的发展趋势. 工程勘察, 2000, (2): 12~15.

[9] 薛禹群. 地下水动力学原理. 北京: 地质出版社, 1986.

[10] Verga, R. S., 1962. Matrix iterative analysis. Prentice Hall, Englewood Cliffs, N. J., 322p.

[11] 李荣华, 冯果忱. 微分方程数值解. 北京: 人民教育出版社, 1980.