

文章编号: 1671-1912(2002)01-0059-04

SIP 和 PCG2 两种迭代法在地下水数值计算中的应用对比

马 驰

(西安建筑科技大学 环境与市政工程学院, 陕西 西安 710055)

摘 要: 对两种目前最受地下水工作者喜欢的数值迭代法 SIP 和 PCG2 做一对比, 主要分析了这两种方法的原理及其使用效果的差异, 并结合简单的实例进行验证, 得出结论: SIP 法在方法本身和人为操作两方面都具有难以避免的不精确, 而 PCG2 法则就这两方面而言却是一种行之有效、精确性极高的数值迭代法, 而且在地下水数值计算领域具有很高的推广价值。

关键词: SIP; PCG2; 迭代法 对比; 精确性

中图分类号: TV 139.14

文献标识码: A

0 引 言

地下水数值计算仍是当前解决地下水资源预测与评价及地下水水质问题的强有力手段。为此, 引入或创新更有效的数值方法是地下水工作者责无旁贷的任务。目前在地下水数学模型求解方面的具体数值迭代法已出现很多, 如 ADI, SOR, SSOR, SIP, PCG, PCG2 等等, 这些方法在不同的要求级别和层次上都有各自成功的地方, 解答了许多的实际问题。其中的 SIP 法是一种较早提出的数值迭代法, 一直为我国广大的地下水工作者所喜爱。PCG2 法是 90 年代美国的 Mary Hill 提出并开始应用于地下水流模型数值计算中的一种迭代方法, 鉴于此迭代法的迅速收敛和高度的精确性, 在此对 PCG2 法和 SIP 法的原理和计算效果做一分析对比, 找出两者的优缺点, 以便更优越更精确的数值迭代法尽快在我国地下水数值计算领域中推广使用。

1 SIP

SIP 即 Strongly Implicit Procedure, 亦称强隐式迭代法, 是 1968 年 H. L. Stong 提出的一种数值迭代法, 至今仍被认为是求解大型矩形网格有限差分方程组的有效方法。其原理是通过引入多余的两个未知水头(变量), 将原有的五对角系数矩阵改造成七对角系数矩阵, 从而实现原系数矩阵的 LU 分解, 再通过逐步迭代来求解有限差分方程组。SIP 法的突出特点是迭代的收敛速度对结点数目及待解问题的性质不敏感, 而且收敛速度较高^[1]。

SIP 求解过程大致分以下几个步骤

- 1) 系数矩阵分解为上三角矩阵和下三角矩阵(LU 分解);
- 2) 根据已知项、系数矩阵以及前一次迭代求得的水头值计算近似解的系统残差;
- 3) 利用向前代换和向后代换的方法求出水头残差;
- 4) 由水头残差和前一次迭代的结果得到新计算的水头值。

为减少非相邻单元的影响, SIP 法使用了一个因子 ω ($0 \leq \omega \leq 1$)。这个因子在迭代过程中可以具有几个不同的值, 并且循环使用。 ω 可以用下式计算

* 收稿日期: 2001-04-25

作者简介: 马 驰(1969—), 男, 陕西兴平人, 硕士, 主要从事地下水数值模拟、污染防治方面的研究。

$$\omega(\lambda) = \frac{1 - (WSEED)^{(\lambda-1)}}{(NPARAM - 1)} \quad (\lambda = 1, 2, \dots, NPARAM) \tag{1}$$

其中 $NPARAM$ 为 ω 值的数目; λ 为介于 1 和 $NPARAM$ 之间的正整数; $\omega(\lambda)$ 为相应的迭代参数; $WSEED$ 为迭代参数的“种子”。

选用 SIP 求解地下水数值模型时, 需要预选一组试错性参数进行试算, 具体的试错参数如下^[2]

最大迭代次数取为 50; 迭代参数的数目为 5; 加速因子为 1.000; 收敛指标为 0.010; 种子值 1 或 0 (1 表示由计算者输入种子, 0 表示由程序自行计算种子)。

对于上述参数的选择, 应注意以下几点

- 1) 这个过程依赖于实际工作经验, 目前尚不明白为什么一组迭代参数会优于另一组迭代参数^[3];
- 2) 虽然参数的选择会影响收敛的速度, 但并不影响最终的计算结果;
- 3) 迭代参数的选择对收敛速度有很大的影响;
- 4) 有时可能一组参数的引入使模型收敛很成功, 但得到的计算水头值却与实际值相去甚远^[3]。

5) 各参数的选取有一定的相关性, 即当一个参数调整后, 必须相应地调整其他有关的参数, 如调整加速因子, 就必须相应改变收敛指标。

另外, 从模型定解条件方面考虑, 当计算水头变化较大时, 用 SIP 求解过程可能出现振荡现象, 而且可能无法收敛。但如果水头变化较小时, 求解过程虽然比较稳定, 但收敛速度比较慢, 也可能得到错误的计算结果。

2 PCG2

PCG2 即 Preconditioned Conjugate Gradient, 也称为预调共轭梯度法或预调共轭斜量法, 它也是一种对大型线性方程组迭代求解的方法。PCG2 法的实质是通过建立预优矩阵, 以减少模型的条件数, 达到简化计算提高收敛速度的目的, 其核心任务就是建立预优矩阵。根据建立预优矩阵方法的不同及在不同类型计算机上的适应情况, PCG2 法包含两种不同的修正 PCG 的算法: MICCG (Modified Incomplete Cholesky Conjugate-Gradient) 法和 POLCG (LEAST-Squares Polynomial Conjugate-Gradient) 法, 这两种方法各有其优缺点。MICCG 法较适用于标量型计算机 (Scalar Computer), 而 POLCG 较适用于向量型计算机 (Vector Computer)。限于篇幅, 这里仅对 PCG2 中的一种方法 MICCG 进行讨论。

MICCG 法的实质就是用修正的不完全 Cholesky 分解法建立预优矩阵, 再应用 PCG 法求解线性方程组。具体步骤如下^[4]:

- 1) 矩阵 A 进行形如下的不完全 Cholesky 分解。

$$A = LU + R \tag{2}$$

其中 A 为线性方程的系数矩阵; L 和 U 代表分解后的矩阵; R 为剩余矩阵。

- 2) 建立预优矩阵 $M = LU$, 应具备如下特点

- ① M 对称正定; ② M 应与 A 的稀疏性相同; ③ M^{-1} 的特征值分布“集中”。
- 3) 应用 PCG 法求解, 具体迭代过程可参考文后文献[4]。

MICCG 方法作为一个适用的迭代法, 主要具有下面的特点:

- 1) 可充分利用系数矩阵的稀疏性, 存储时只需存储系数矩阵中的非零元素即可, 从而节省了相当的存储空间;
- 2) 无须预先估计别的参数 (如加速因子、收敛指标等) 即可计算, 这一点不象 SIP 法需要大量的试算;
- 3) 其收敛的快慢依赖于系数矩阵的条件分布情况, 当的条件数很少, 或大部分集中在一点附近而仅有少数几个远离此点时, 则迭代很少几步就会得到高精度的近似解, 这亦所谓的 PCG2 超线性收敛性。

选用 PCG2 法求解地下水数值模型时, 也需要预选一组参数^[5], 最大外循环迭代次数取为 1 (对线性问题, 取值为 1; 对非线性问题, 取值大于 1); 最大内循环迭代次数为 5 (取值在 1~100 之间); 水头收敛指标为 0.010; 流量收敛指标为 0.010 (这里的流量指的是迭代计算过程中流量的残差值, 当流量残差的最大值低于流量收敛指标时, 则称解满足流量收敛指标); 松弛因子为 1 (在 MICCG 法中使用的松弛因子一般

等于 1, 有些情况下使用稍小于 1 的松弛因子可以加快收敛过程)。

对于以上参数说明如下: ① PCG2 法规定的收敛指标不仅仅指水头, 还包括计算单元间的流量。只有当这两个指标同时得到满足时, 计算才以收敛结束^[6]; ② 这组参数的选择以具体的模拟计算精度要求、收敛速度等因素决定, 与 SIP 法中的试错参数意义完全不同。

3 算例及分析

3.1 算例设计

建立如下井流模型

含水层承压、均质各向同性, 厚度相等, 底板水平, 四周为矩形隔水边界, 范围为 3 627. 12 m×3 627. 12 m, 以 30. 48 m 为网格距将计算区分为 119×119 个单元, 完整单井位于结点 (60, 60) 的中心, 以 1. 2 为等比将抽水时段 (一整天) 划分为 25 个不同的时间步长; 完整单井定流量抽水, $Q=C=5\,437.93\text{ m}^3/\text{d}$ (1 000 gpm); 无越流补给; 初始承压水头面水平; 井径无限小, 忽略井壁内外水头差。

渗流方程为
$$s = s_p + s_i = \frac{Q}{4\pi T} [W(u_p) + W(u_i)] = \frac{Q}{4\pi T} \sum W(u) \tag{3}$$

式中 $u = \frac{r^2 S}{4\pi t}$; s 为总的水头降深; p, i 等下标分别代表抽水井和虚拟井; Q 为抽水量; r 为计算点 (观测点) 到抽水井的距离; t 为抽水时间; $W(u)$ 为井函数; 含水层导水系数 $T=9\,290\text{ m}^2/\text{d}$, 贮水系数 $S=0.000\,1$ 。

3.2 结果分析

由图 1 可看出 SIP 和 PCG2 计算的结果与真实水头降深值历时曲线的拟合情况, 不难发现, SIP 计算的结果与真实水头降深值历时曲线拟合的差异较大, 其中加速因子为 1. 0, 收敛指标为 0.000 1 时拟合最差, 加速因子为 1. 8, 收敛指标为 0.000 1 时拟合较好, 而 PCG2 计算的结果在图中表现为拟合很好。在这幅图中还不能很明显地得出 SIP 和 PCG2 究竟哪个方法更优的结论。在表 1 中通过数据显示, 就很明显地看出, PCG2 法计算的结果最佳。

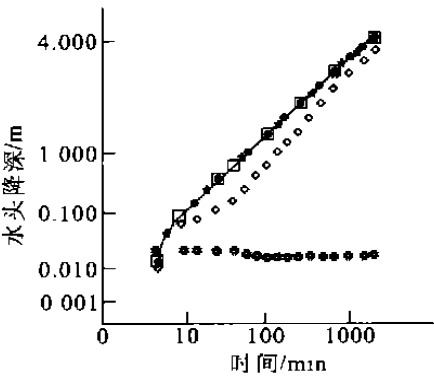


图 1 水头降深与时间的对数关系曲线
Fig. 1 Log-log plot of drawdown values versus time

表 1 观测点的水头降深值水均衡差异的对比

Tab. 1 Comparison of drawdown values and water balance discrepancies

	收敛指标 ¹	迭代参数	水均衡情况 ² / %	计算点的水头降深 ³ /m
模型解析解 (真实值)	—	—	—	4. 157
SIP 加速因子=1. 0	0. 01	5	—198. 08	0. 012
SIP 加速因子=0. 3	0. 000 1	5	—33. 79	2. 970
SIP 加速因子=1. 5	0. 000 1	5	—1. 29	4. 116
SIP 加速因子=1. 8	0. 000 1	5	—0. 38	4. 154
PCG2 ⁴	0. 01~0. 000 001	—	0. 01	4. 159

注: 1 为允许有效终止的最小收敛指标; 2 为 25 个模拟时间段水均衡差异的合计; 3 为观测点上 1 440 min 后的水头降深值; 4 为从 0. 1 至 1. 0 之间的松弛因子不影响计算结果, 但当松弛因子大于 1. 0 时模拟不收敛。

4 结 论

理论分析和实例验证表明, 选用 PCG2 法, 特别是对于复杂的地下水数值计算, 具有更大的优越性, 主要表现在: ① 相对于 SIP 法, PCG2 法具有更高的收敛速度; ② 能够节省工作量和计算机机时; ③ 具有更高的精确性。

总之, SIP 和 PCG2 是优于其他数值迭代法, 但对于条件复杂、精确度要求高的地下水数值计算, SIP 法在方法本身和人为操作两方面都具有难以避免的不精确, 而 PCG2 法则就这两方面而言却是一种行之有效、精确性极高的数值迭代法, 宜尽快地将这一高效的迭代法在我国地下水数值计算领域推广。

参考文献:

[1] Trescott P C, Pinder G F, Larson S P. Finite-different model for aquifer simulation in two dimensions with results of numerical experiments. Techniques of Water Resources[R] . Investigations of the U. S. Geol. Surv. Book 7, ChapteC1, 1976. 116—123.

[2] Andersen P F. PREMOD (a preprocessor for MODFLOW) GeoTrans[M] . Inc. Reston, VA, 1988. 521—529.

[3] McDonald M G, Harbaugh A W. A modular three-dimensional finite-difference ground-water flow mode[R] . Techniques of Water Resources Investigations of the U. S. GeoSurv. Chapter A1, Book 6, 1988. 239—243.

[4] 胡健伟, 汤怀民. 微分方程数值方法[M] . 北京: 科学出版社, 1999. 142—150.

[5] Meyer P D, Valocchi A J, Ashby S F, et al. A numerical investigation of the conjugate gradient method of applied to three-dimensional ground-water flow problem in randomly heterogeneous porous media[J] . Water-Resources Research. 1989, 25 (6): 1 440-1 446.

[6] Hill M C. Preconditioned conjugate-gradient 2 (PCG2). A computer program for solving ground-water flow equations[R] . U. S. Geol. Surv. Water-Resources Investigations Report. 1990. 4 043-4 048.

Contrasting the application of the SIP and PCG2 methods for groundwater matrix numerical solution

MA Chi

(School of Environmental and Civic Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China)

Abstract: SIP and PCG2 are the most accepted iterative methods of groundwater matrix solution. The two methods' rational and effects are analyzed, and a series of simulations was performed with SIP and PCG2 methods while adjusting the matrix solution parameters sequentially one at a time. The analysis and simulation results show that an accurate result would be made with PCG2, but an inaccurate result would be made with SIP. A conclusion is made that PCG2 is the most effective and most accurate iterative method, and the method would be popularized in the field of groundwater matrix numerical solution.

Key words: SIP; PCG2; contrasting of iterative methods; accuracy

(上接第 55 页)

参考文献:

[1] 汪晓平, 吴勇强, 张宏林, 等. ASP 网络开发技术[M] . 北京: 人民邮电出版社, 2000. 4—5; 189—190.

[2] 杨国才. 基于 Web 的远程自学型教学系统的设计与实现[J] . 计算机应用, 2000, 20(4): 61—63.

[3] 惠晓实, 王凯航, 陆舟, 等. 一种基于 Web 技术的网络数据库系统的设计[J] . 计算机应用研究, 2000, 17(1): 84—86.

[4] 陈会安. ASP3.0 与 IIS4/5 网站架设彻底研究[M] . 北京: 中国青年出版社, 2001. 330—331.

Application of ASP technique in network examination system

ZHANG Xiao-yan, GONG Shang-fu

(Dept. of computer, Xi'an University of Science and Technology, Xi'an 710054, China)

Abstract: Network examination system is one of the main aspects of remote education software designing based on Intranet/Internet. Furthermore, the ASP technique is the main method of implementing the system. The paper analyses the designing principle and the implementation step of ASP in view of examination problem of remote education. It also gives a good example for utilizing database on web.

Key words: ASP; ADO; network examination system