

预条件共轭梯度法求解三维地电场 有限元方程的网格分析*

王威¹, 李景富², 刘洁¹

- (1. 中山大学地球科学与工程学院//广东省地质过程与矿产资源探查重点实验室, 广东 广州 510275;
2. 广东省有色地质环境中心, 广东 广州 510060)

摘要: 为了优化预条件共轭梯度法求解三维地电场有限元方程的效率, 通过系统的网格分析, 提出在常规六面体网格基础上二次剖分得到四面体网格的方案。模型分析结果表明, 对于均匀网格, 不完全 Cholesky 共轭梯度法 (ICCG) 和超松弛预条件共轭梯度法 (SORCG) 均可成功求解; 对于非均匀网格, 六面体剖分会导致 ICCG 的预条件因子不符合条件而求解失败, 但采用新的四面体剖分 ICCG 不仅成功求解而且相对六面体网格可以节省约 50% 的内存需求。

关键词: 网格分析; 预条件共轭梯度; 有限元; 三维地电场

中图分类号: P319.1 **文献标志码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2018) 03-0001-06

The mesh analysis in solving 3D geoelectric FE equation with pre-conditioned conjugate gradient method

WANG Wei¹, LI Jingfu², LIU Jie¹

- (1. School of Earth Sciences and Engineering, Sun Yat-sen University//Guangdong Provincial Key Laboratory of Mineral Resources & Geological Processes, Guangzhou 510275, China
2. Guangdong Nonferrous Geological Environment Center, Guangzhou 510060, China)

Abstract: Mesh division scheme affects the efficiency of 3D geoelectric finite element (FE) modelling when using pre-conditioned conjugate gradient method. The tetrahedral mesh, which is derived from regular hexahedral mesh, is recommended after mesh analysis. Results from model computations reveal that the incomplete Cholesky conjugate gradient method (ICCG) and successive over-relaxation conjugate gradient method (SORCG) could succeed when employing uniform meshes. However, the non-uniform hexahedral meshes might lead to unsuccessful pre-condition matrix and ICCG might fail. In contrast, the presented tetrahedral meshes overcome this drawback and make ICCG a stable solver. Besides, the new mesh scheme could save 50% computer memories compared to traditional hexahedral mesh.

Key words: mesh analysis; pre-conditioned conjugate gradient; finite element; 3D geoelectrics

* 收稿日期: 2017-03-19

基金项目: 国家自然科学基金 (41704074, 41574087); 中国石油天然气总公司 973 项目 (2014CB239004)

作者简介: 王威 (1984 年生), 男; 研究方向: 地球电磁学数值模拟及高性能计算; E-mail: wangwei28@mail.sysu.edu.cn

通信作者: 刘洁 (1967 年生), 女; 研究方向: 多尺度地球动力学研究, 岩石微观结构与物性; E-mail: liujie86@mail.sysu.edu.cn

直流电阻率法作为经济高效的地球物理勘探方法,在矿产资源勘探,水文地质调查,工程勘察领域获得了广泛的应用^[1-6]。正演数值模拟不仅是分析特定地电结构响应特征的有效手段,而且作为反演的必要组成步骤,其求解效率直接关系到反演是否具有实用性。常用的数值模拟方法有积分方程法、有限差分法和有限元法,其中有限元法因其坚实的理论背景和灵活的模拟策略,已成为电法勘探二、三维数值模拟中广泛采用的方法^[7-11]。有限元法模拟直流电阻率问题时需要求解大型线性方程组。直接解法由于矩阵分解需要占用大量的内存,一般的个人计算机难以承受。迭代算法中的预条件共轭梯度(Pre-conditioned Conjugate Gradient)法无需分解系数矩阵,可有效减少内存需求和提升计算速度,主要有不完全 Cholesky 共轭梯度(ICCG)算法和超松弛预条件共轭梯度(SORCG)算法。

网格剖分是有限元模拟的重要课题。规则六面体网格由于剖分简单而在直流电法有限元模拟中被广泛采用。以往研究认为 ICCG 算法只适合求解三维有限差分法形成的系统方程,而不适合于三维有限元方程的求解^[12]。然而,这一结论的给出是基于六面体网格的。本文提出了一种新的四面体剖分方案,经过系统的网格对比分析,结果表明我们提出的网格剖分方案不仅可以使 ICCG 法稳定求解有限元方程,而且存储量只需采用常规六面体网格时的 50%。本研究推动了三维直流电阻率法有限元模拟的发展,为其实际应用奠定了基础。

1 直流电阻率法的有限元求解

1.1 有限元方程的构建

关于二次场电位的点源三维地电场边值问题可表示为^[13]:

$$\begin{aligned} \nabla(\sigma \nabla U_s) &= -\nabla(\sigma_s \nabla U_p) & \text{in } \Omega \\ \frac{\partial U_s}{\partial n} &= 0 & \text{in } \Gamma_s \\ \frac{\partial U_s}{\partial n} + \frac{\cos(\mathbf{r}, \mathbf{n})}{r} U_s &= 0 & \text{in } \Gamma_\infty \end{aligned} \quad (1)$$

其中 σ 为电导率,它与电阻率 ρ 互为倒数关系; U_p 是由背景电导率 σ_p 引起的背景电位, U_s 由电导率异常体 σ_s 引起的二次场电位; r 是源点到测点的向量; \mathbf{r} 是源点到测点的距离; \mathbf{n} 是求解域边界的法方向; Γ_s 、 Γ_∞ 分别是地表和计算区域剩余部分的边界。

根据变分原理,该边值问题可转换为求解泛函的极值问题:

$$F(U_s) = \int_{\Omega} \left[\frac{1}{2} \sigma (\nabla U_s)^2 + \sigma_s \nabla U_p \cdot \nabla U_s \right] d\Omega +$$

$$\int_{\infty} \left[\frac{1}{2} \frac{\sigma \cos(\mathbf{r}, \mathbf{n})}{r} U_s^2 + \frac{\sigma_s \cos(\mathbf{r}, \mathbf{n})}{r} U_p U_s \right] d\Gamma \quad (2)$$

将求解域离散为若干单元,假设每个单元内电位符合线性分布。令泛函变分为零,可得有限元方程:(具体过程可参见文献 [7])

$$K U_s = -F \quad (3)$$

其中有限元系数 K 一个稀疏对称的矩阵,与地下结构的电阻率分布有关,右端项 F 是与激发源分布有关的向量, U_s 为需要求解的各个网格结点上的二次电位值。解出 U_s 之后加上解析方法求出的一次场电位 U_p 即可得最终需要的总场电位 U 。

1.2 有限元网格分析

网格剖分是关系预条件共轭梯度法能否稳定求解的重要因素。规则六面体网格(以下简称 Hex)由于其剖分简单而获得广泛应用。规则六面体网格的内部结点只与 26 个结点相邻(图 1)。由有限元理论可知最终形成的系数矩阵 K 每行的非零元素最多只有 27 个,又由于 K 具有对称性,故每行只需存储 14 个非零元素。

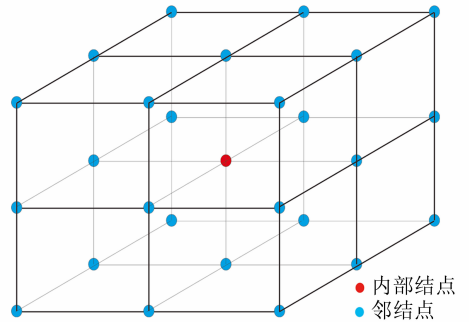


图 1 六面体网格的结点连接关系

Fig. 1 The nodes' connection of hexahedral mesh

本文提出在六面体网格基础上进行二次剖分得到四面体网格。具体方案为将每个六面体单元剖分为 5 个四面体单元,注意对邻接六面体单元进行的是两种不同的划分(图 2)。图 2(a) 中单元的结点编号分别为(1,5,4,2)、(8,4,5,7)、(3,7,2,4)、(6,2,7,5)、(4,5,7,2),图 2(b) 中单元的结点编号分别为(1,6,3,2)、(8,3,6,7)、(4,1,8,3)、(5,8,1,6)、(1,3,6,8)。如图 3 所示,这种剖分方法得到的四面体网格一半的内部结点具有 18 个邻接结点,另一半的内部结点具有 6 个邻接结点。同样,由有限元理论可知,系数矩阵平均每行只有 7 个非零元素需要存储(由于系数矩阵的对称性,只需存储下三角矩阵),故其存储需求约为采用六面体网格的 50%。

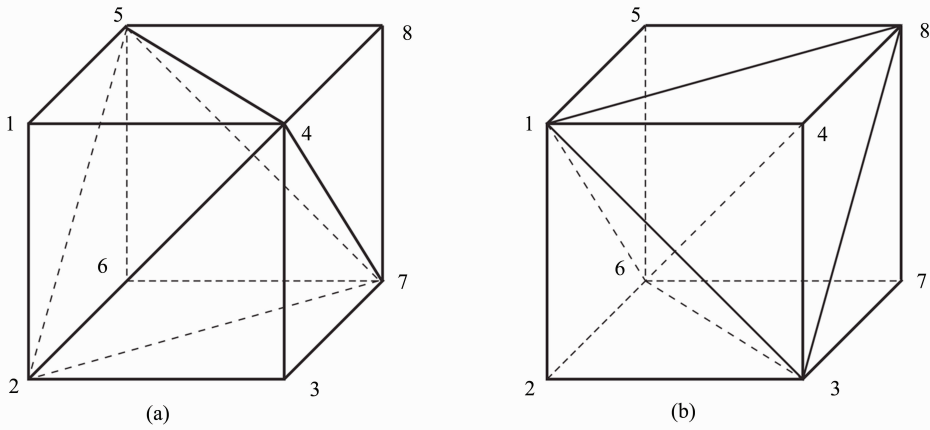


图 2 在六面体网格基础上二次剖分得到的四面体网格
Fig. 2 The tetrahedral mesh derived from hexahedral mesh

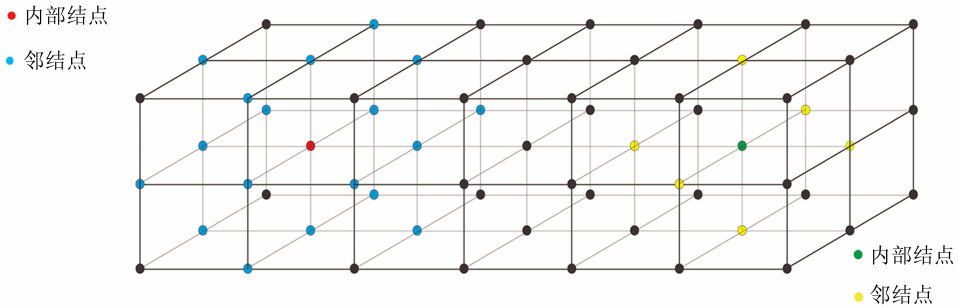


图 3 四面体网格的结点连接关系
Fig. 3 The nodes' relationship of tetrahedral mesh

1.3 预条件共轭梯度算法

直流电阻率法的有限元模拟需要求解大型线性方程组 $Ax = b$ 。预条件共轭梯度法是求解该问题的高效算法，其基本思想如下：

对于方程组：

$$Ax = b \tag{4}$$

作变换：

$$(C^{-1}A(C^T)^{-1})(C^Tx) = C^{-1}b \tag{5}$$

如果矩阵 C 满足：

$$A^{-1} \approx (CC^T)^{-1} \tag{6}$$

那么易知：

$$C^{-1}A(C^T)^{-1} = I \tag{7}$$

即变换后的线性系统 (5) 的系数矩阵近似于单位矩阵 I ，求解将快速收敛。定义 $M = CC^T$ ， M 即称为预条件矩阵。问题转化为如何寻找到合适的预条件矩阵 M 。ICCG 和 SORCG 的预条件矩阵的获取可参考文献 [7, 12]，在此不再赘述。

在以下的模型计算中，我们采用残差的 L_2 范

数作为预条件共轭梯度法的收敛准则，即 $\frac{b - Ax_i}{b - Ax_0} < 10^{-8}$ ，其中 x_0 为初始解， x_i 为第 i 步的解。

2 模型分析

2.1 均匀网格剖分

层状介质在地球物理勘探中是十分常见的。此处计算一个两层的地电模型，第一层电阻率为 $100 \Omega \cdot m$ ，厚度为 $12 m$ ，第二层为半无限空间，电阻率为 $10 \Omega \cdot m$ 。实际模拟计算都是在有限的区域中进行，设定计算区域在 x, y, z 方向上的尺度分别为 $(-204 \sim 204) m, (-204 \sim 204) m, (0 \sim 204) m$ 。点电源在坐标原点激发，测量装置为单极 - 单极 (pole-pole)。将计算区域剖分为 $102 \times 102 \times 51$ 个单元的均匀六面体 (Hex) 网格 (单元边长为 $4 m$)，并在此基础上进行二次剖分，将单元划分为四面体 (Tet) 网格。注意这两种剖分方法并不会带来单元结点数的差异，即两者结点数均为 $103 \times 103 \times 52$ 。以下分别采用 ICCG 和 SORCG 求解，

来分析它们的求解精度和收敛效率。

图 4 为分别采用 Hex 和 Tet 网格求解的视电阻率图。方框和十字分别代表采用 Hex 网格的 ICCG 解和 SORCG 解, 菱形和圆圈分别代表采用 Tet 网格的 ICCG 解和 SORCG 解, 黑色实线表示解析解。可以看出不管采用哪种网格, ICCG 和 SORCG 都可以获得与解析解非常一致的结果, 精度均符合要求。

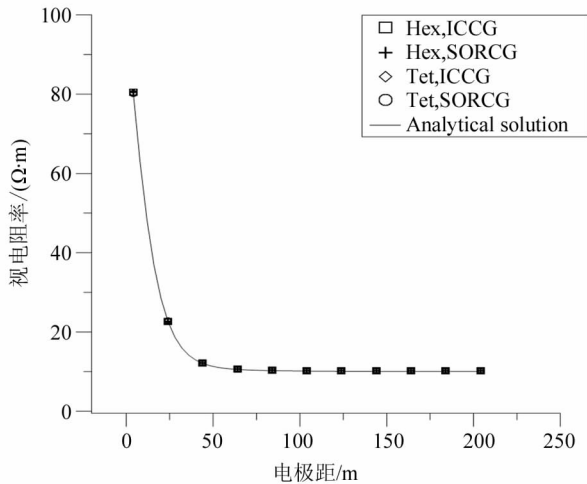


图 4 采用均匀 Hex、Tet 网格的 ICCG 和 SORCG 解

Fig. 4 Solutions from ICCG and SORCG by adopting uniform hexahedral and tetrahedral meshes

图 5 是收敛分析。横坐标为迭代次数, 纵坐标为相对残差。可以看出, 达到预设精度时 SORCG 的收敛次数要少于 ICCG, 效率相对较高, 但 ICCG 的迭代次数也没有超过 200 次。需要说明的是, SORCG 方法需要测试松弛因子 ω , 具有一定的经验性^[7], 而 ICCG 则无需人工干预其求解过程。总的来看, 两者在采用均匀网格剖分时都是较优的求解方法。

为了详细比较不同网格剖分密度时 ICCG 和 SORCG 的求解效率, 我们设计了 4 种密度的网格: $68 \times 68 \times 34$, $102 \times 102 \times 51$, $136 \times 136 \times 68$, $204 \times 204 \times 102$, 其单元边长分别为 6、4、3 和 2 m。我们统计了不同方案的计算时间 (图 6), 可以看出: 不论是用 ICCG 还是 SORCG 求解, 只要采用均匀网格, 都可以获得较高的效率。即使高达 400 万的网格结点, 在单机 (DELL T7810 工作站, CPU E5-2609, 内存 32G) 上求解时间也均不超过 20 min。

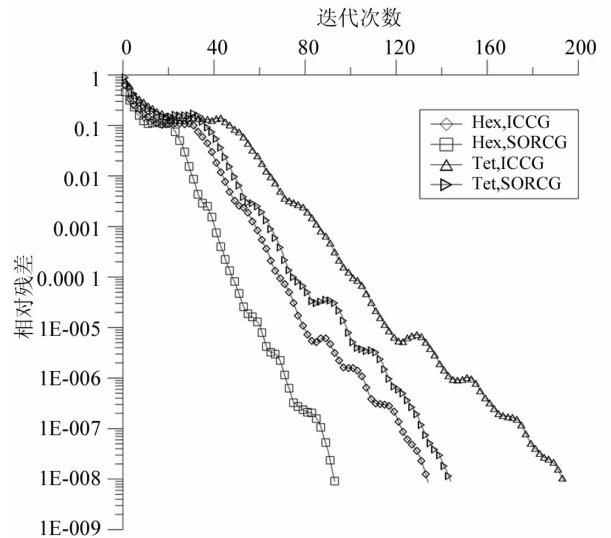


图 5 采用均匀 Hex、Tet 网格时 ICCG 和 SORCG 的收敛情况

Fig. 5 The convergence analysis of ICCG and SORCG by employing uniform hexahedral and tetrahedral meshes

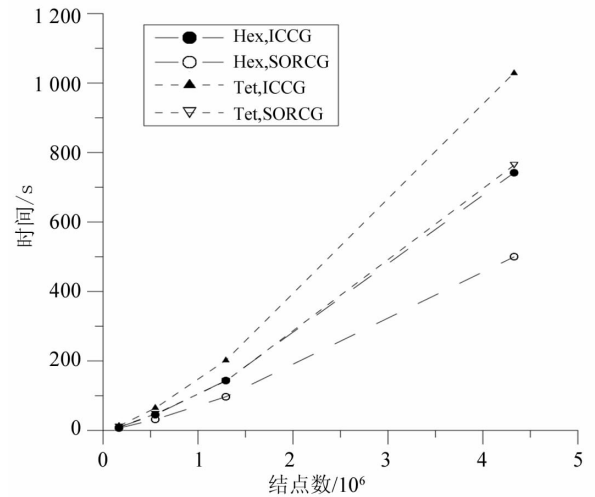


图 6 采用 4 种剖分密度的均匀 Hex、Tet 网格时 ICCG 和 SORCG 的求解时间

Fig. 6 The ICCG and SORCG solving time when employing uniform hexahedral and tetrahedral meshes of four different mesh sizes

2.2 非均匀网格剖分

网格的不均匀剖分会严重影响有限元系数矩阵的性质, 有可能引起迭代解法的失败。同样基于上述物理模型参数, 此处采用不均匀的网格剖分, 六面体单元数为 $54 \times 54 \times 29$, 在此基础上进行二次剖分为四面体, 注意两者的单元结点数一致, 均为 $55 \times 55 \times 30$ 。具体剖分如下: x, y 方向的剖分坐标均为 $(-500, -375, -275, -200, -150, -$

120, -90, -70, -55, -42.5, -30, -20, -15, -12, -9, -7, -5.5, -4.25, -3.25, -2.5, -2, -1.5, -1.2, -1, -0.8, -0.5, -0.2, 0, 0.2, 0.5, 0.8, 1, 1.2, 1.5, 2, 2.5, 3.25, 4.25, 5.5, 7, 9, 12, 15, 20, 30, 42.5, 55, 70, 90, 120, 150, 200, 275, 375, 500), z 方向 (指向地下空间为正方向) 坐标为 (0, 0.2, 0.5, 0.75, 1, 1.25, 1.5, 2, 2.5, 3, 4, 5, 7, 9, 12, 15, 20, 25, 32.5, 42.5, 55, 70, 90, 120, 150, 200, 250, 325, 400, 500), 单位: m。

计算结果如图 7 所示。我们发现, 正如已有的研究结果^[12], 采用不均匀 Hex 网格时 ICCG 的确会求解失败。究其原因, 是由于 ICCG 在构建预条件因子时, 对角矩阵 D 的元素出现了大量负数。对于此例, 统计发现 13.98% 的对角元素为负, 直接导致了 ICCG 求解失败。但是, 采用本文提出的在 Hex 基础上继续二次剖分得到的 Tet 网格形成的有限元方程, 其系数矩阵满足 ICCG 的要求, 即对角矩阵 D 的元素全部为正数, 求解成功。

比较采用 Hex 网格的 SORCG (图 7 黑色圆圈) 解、采用 Tet 网格的 ICCG 解 (菱形) 和 SORCG 解 (十字), 都与解析解 (实线) 吻合较好, 并且符合理论预期, 即小极距视电阻率趋近于第一层实际电阻率 $100 \Omega \cdot m$, 大极距视电阻率趋近于第二层 (半空间) 的实际电阻率 $10 \Omega \cdot m$ 。分析不同方案的计算结果 (图 8) 可以得出:

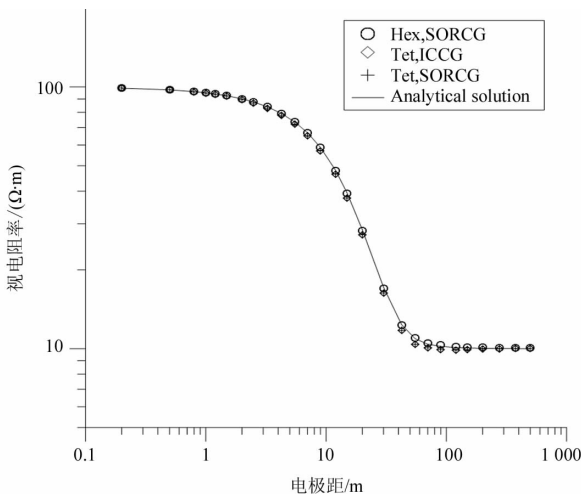


图 7 采用不均匀网格的两层模型的视电阻率
Fig. 7 The apparent resistivities of a two-layer model by employing non-uniform meshes

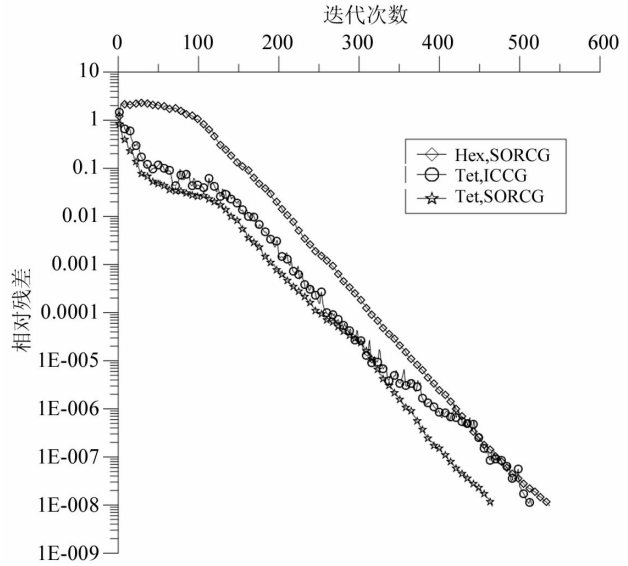


图 8 采用不均匀网格时 ICCG 和 SORCG 的收敛情况
Fig. 8 The convergence analysis of ICCG and SORCG by employing non-uniform meshes

(1) 采用 Hex 不均匀网格的 ICCG 求解失败, 但是采用本文提出的 Tet 不均匀网格的 ICCG 求解获得成功;

(2) 与均匀网格结果 (图 5) 对比发现, 采用均匀网格时的迭代解法收敛率普遍较快 (200 次左右), 而采用非均匀网格时, 收敛率较慢 (达 500 此左右), 说明网格的均匀性极大影响了收敛速率;

(3) 采用 Tet 网格可以获得和 Hex 网格相当的求解精度和效率, 但正如前文网格分析中所述, 本文提出的 Tet 网格的存储要求只需 Hex 网格的 1/2, 由此降低了对计算设备的要求。

3 结 论

ICCG 是求解直流电阻率有限差分方程的主流方法, 但在求解有限元方程有可能会失败。本文通过详细的网格分析后认为, 基于六面体网格剖分的有限元系数矩阵会严重依赖于网格剖分是否均匀, 即网格均匀, ICCG 可以求解成功, 但网格不均匀, 会引起构建预条件因子时对角矩阵元素出现大量负数而求解失败。

本文提出新的网格剖分方案, 即在六面体网格基础上进行二次剖分得到四面体网格。模型分析发现这种四面体网格即使剖分不均匀, 也可满足 ICCG 构建预条件因子的要求, 从而成功求解。不仅如此, 这种新的四面体网格相对于六面体网格还可以减少约 50% 的内存空间, 降低对计算设备的要

求。SORCG 也可高效求解直流电阻率有限元方程,但在构建预条件因子时需要额外测试选择松弛因子 ω , 需要一定的经验性^[7]。由于三维直流电阻率模拟的区域范围较大,非均匀网格剖分具有更大的现实意义。本文提出的基于四面体网格剖分的 ICCG、SORCG 算法可成功求解三维直流电阻率有限元方程。

参考文献:

- [1] RUCKER D F, LOKE M H, LEVITT M T, et al. Electrical resistivity characterization of an industrial site using long electrodes[J]. *Geophysics*, 2010, 75(4): WA95-WA104.
- [2] 翁爱华,祝嗣安. 天然气水合物的近海底直流电测深响应[J]. *石油地球物理勘探*, 2010, 45(3): 458 - 461.
WENG A H, ZHU S A. Near sea-bottom DC sounding response for gas hydrate [J]. *Oil Geophysical Prospecting*, 2010, 45(3): 458 - 461.
- [3] 强建科,阮百尧,周俊杰,等. 煤矿巷道直流三极法超前探测的可行性[J]. *地球物理学进展*, 2011, 26(1): 320 - 326.
QIANG J K, RUAN B Y, ZHOU J J, et al. The feasibility of advanced detection using DC three-electrode method in coal-mine tunnel [J]. *Progress in Geophysics*, 2011, 26(1): 320 - 326.
- [4] LOKE M H, CHAMBERS J E, RUCKER D F, et al. Recent developments in the direct-current geoelectrical imaging method [J]. *Journal of Applied Geophysics*, 2013, 95: 135 - 156.
- [5] 刘洋,吴小平. 巷道超前探测的并行 Monte Carlo 方法及电阻率各向异性影响[J]. *地球物理学报*, 2016, 59(11): 4297 - 4309.
LIU Y, WU X P. Parallel Monte Carlo method for advanced detection in tunnel incorporating anisotropic resistivity effect [J]. *Chinese Journal of Geophysics*, 2016, 59(11): 4297 - 4309.
- [6] MITCHELL M A, OLDENBURG D W. Data quality control methodologies for large, non-conventional DC resistivity datasets [J]. *Journal of Applied Geophysics*, 2016, 135: 163 - 182.
- [7] 王威,吴小平. 电阻率任意各向异性三维有限元快速正演[J]. *地球物理学进展*, 2010, 25(4): 1365 - 1371.
WANG W, WU X P. Rapid finite element resistivity forward modeling for 3D arbitrary anisotropic structures [J]. *Progress in Geophysics*, 2010, 25(4): 1365 - 1371.
- [8] REN Z Y, TANG J T. A goal-oriented adaptive finite-element approach for multi-electrode resistivity system [J]. *Geophysical Journal International*, 2014, 199(1): 136 - 145.
- [9] 吴小平,刘洋,王威. 基于非结构网格的电阻率三维带地形反演[J]. *地球物理学报*, 2015, 58(8): 2706 - 2717.
WU X P, LIU Y, WANG W. 3D resistivity inversion incorporating topography based on unstructured meshes [J]. *Chinese Journal of Geophysics*, 2015, 58(8): 2706 - 2717.
- [10] 张钱江,戴世坤,陈龙伟,等. 多源条件下直流电阻率法有限元三维数值模拟中一种近似边界条件[J]. *地球物理学学报*, 2016, 59(9): 3448 - 3458.
ZHANG Q J, DAI S K, CHEN L W, et al. An approximation boundary condition for FEM-based 3-D numerical simulation with multi-source direct current resistivity method [J]. *Chinese Journal of Geophysics*, 2016, 59(9): 3448 - 3458.
- [11] 李勇,林品荣,徐宝利,等. 复杂地形三维直流电阻率有限元数值模拟[J]. *地球物理学进展*, 2009, 24(3): 1039 - 1046.
LI Y, LIN P R, XU B L, et al. FEM numerical modeling of 3-D DC resistivity under complicated terrain [J]. *Progress in Geophysics*, 2009, 24(3): 1039 - 1046.
- [12] WU X P. A 3-D finite-element algorithm for DC resistivity modelling using the shifted incomplete Cholesky conjugate gradient method [J]. *Geophysical Journal International*, 2003, 154: 947 - 956.
- [13] WANG W, SPITZER K, WU X P. Three-dimensional DC anisotropic resistivity modelling using finite elements on unstructured grids [J]. *Geophysical Journal International*, 2013, 193(2): 734 - 746.