辛几何算法在射线追踪中的应用*1)

陈景波 秦孟兆

(中国科学院数学与系统科学研究院计算数学与科学工程计算研究所)

RAY TRACING BY SYMPLECTIC ALGORITHM

Chen Jing-bo Qin Meng-zhao

(Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing Academy of Mathematics and Systems Sciences Chinese Academy of Sciences)

Abstract

Ray tracing is a basic aspect in tomography. To solve the caustic problem in inhomogeneous media using Maslov asymptotic theory, we need to calculate the position and slowness vector at every point. Therefore, ray tracing must rely on the ray equations in Hamiltonian form. In this paper, fourth order symplectic scheme and nonsymplectic Runge-Kutta scheme are compared in ray tracing for sinusoidal velocity model. The result indicates that ray paths obtained by two schemes are almost the same. But on keeping Hamilton quantities, the symplectic scheme is far better than the Runge-Kutta scheme. On computing travel time for Hamiltonian system with τ parameter, we use trapezoid formula for numerical integration. The result coincides with that obtained using Hamiltonian system with t parameter.

Key words: Ray tracing, Symplectic algorithm, Maslov theory.

§ 1. 引 言

我们知道,图像重建属于反问题,它所对应的正问题是在已知速度分布的条件下,求得 地震波穿过成像区域的射线路径. 在非均匀介质中,往往发生焦散现象,这时需用 Maslov 渐近理论解决焦散问题, Maslov 渐近理论需要对空间坐标进行富氏变换,即将部分空间坐 标变为慢坐标. 因此,在数值计算中,尽量保持位置和慢向量之间的关系将十分重要,而辛 几何算法正是保持它们之间关系的算法,从而辛几何算法在 Maslov 渐近理论中占有重要地 位.

设介质速度分布为 $c(x_1,x_2)$, 射线按路径 L 传播的走时为 T, 则 L 为下面变分极小问题的解 $^{[2-3]}$

$$T = \int_{L} \frac{ds}{c(x_1, x_2)} = \min_{L'} \int_{L'} \frac{ds}{c(x_1, x_2)}.$$
 (1)

^{* 1999} 年 1 月 28 日收到.

¹⁾ 国家重点基础研究项目 G1999,032800 和国家九五自然科学基金重大项目 (油储) 资助课题 49894190.

定义慢向量 $P=(p_1,p_2)=(\frac{\partial T}{\partial x_1},\frac{\partial T}{\partial x_2})$, 设 $w(T)=w(T_0)+\int_{T_0}^T c^N d\tau$, 则 (1) 等价于下面的 射线方程

$$\frac{dx_i}{dw} = c^{2-N}p_i, \quad \frac{dp_i}{dw} = -c^{-1-N}\frac{\partial c}{\partial x_i}, \quad \frac{dT}{dw} = c^{-N}.$$
 (2)

当 N=2 时, $w=\tau$ 为 τ 参数 $(dT=c^{-2}d\tau)$, 此时 (2) 变为

$$\frac{dx_i}{d\tau} = p_i, \quad \frac{dp_i}{d\tau} = -c^{-3} \frac{\partial c}{\partial x_i}, \quad \frac{dT}{d\tau} = c^{-2}.$$
 (3)

当 N=0 时,w=t 为时间参数,此时 (2) 变为

$$\frac{dx_i}{dt} = c^2 p_i, \quad \frac{dp_i}{dt} = -c^{-1} \frac{\partial c}{\partial x_i}, \quad \frac{dT}{dt} = 1.$$
 (4)

(3) 和 (4) 均为 Hamilton 系统, Hamilton 函数分别为 $H(x,p) = \frac{1}{2} \{p_1^2 + p_2^2 - 1/c^2\}, H(x,p) = \frac{1}{2}c^2(p_1^2 + p_2^2),$ 其中 (3) 为可分的 Hamilton 系统.

在下一节,我们介绍辛几何算法的有关知识,然后,在第三节,以射线方程 (3) 和 (4) 为基础用辛算法进行射线追踪,并同非辛 Runge-Kutta 算法进行比较.

§ 2. 辛几何算法

先介绍辛几何的有关概念和结果^[4]. 我们知道向量空间上的欧氏结构是由一个对称的双线性型给出的,而向量空间上的辛结构是由一个反对称的双线性型给出. 欧氏几何是长度的几何学,辛几何是面积的几何学.

定义 1. 设 R^{2n} 是 2n 维的向量空间, [,] 是 R^{2n} 上的一双线性型. 如果 [,] 满足反对称 $[\xi,\eta] = -[\eta,\xi], \forall \xi,\eta \in R^{2n},$ 非退化 $[\xi,\eta] = 0, \forall \eta \Longrightarrow \xi = 0,$ 则称 [,] 为 R^{2n} 上的辛线性结构, 而 $(R^{2n}[,])$ 称为辛向量空间. [,] 也称为斜数积或辛度量.

定义 2. 设 T 是辛向量空间 R^{2n} 上的变换,我们称 T 为辛线性变换,如果 T 保持辛度量 $[T\xi,T\eta]=[\xi,\eta]$ $\forall \xi,\eta\in R^{2n}$.

定理 1. 设变换 T 的 Jacobi 矩阵为 A, 则 T 为辛变换的充要条件为

$$AJA' = J$$

$$J = \begin{pmatrix} 0 & -I_n \\ I_n & 0 \end{pmatrix}, \tag{5}$$

 I_n 为 n 阶单位矩阵. 满足 (5) 式的矩阵称为辛矩阵.

考虑 Hamilton 系统

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H(x, p)}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H(x, p)}{\partial x}.$$
(6)

系统 (6) 的一个重要性质就是它的解保持辛度量不变. 因此在数值求解系统 (6) 时也可考虑保持辛度量不变 [5]. 我们知道每一个单步格式都可以写成 $y_{n+1}=s(\tau)y_n,s(\tau)$ 为对应于该格式的算子, τ 为步长. 设 $y_{n+1}=s(\tau)y_n,y_{n+1}=(x_{n+1},p_{n+1}),y_n=(x_n,p_n)$ 为该系统的一个格式,如果 $s(\tau)$ 是一个辛变换,那么我们就称该格式为辛格式. 例如,中点格式就是辛格式.

用辛格式计算出的数值解精确地满足一扰动的 Hamilton 系统,因此总能的误差不会有很大的变化. 如果 H(x,p) = a(x) + b(p),则称相应的 Hamilton 系统为可分的. 关于可分的 Hamilton 系统,现在已建立起了构造显式的任意阶精度辛格式的一般理论. 在地震层析成像中,射线方程为一可分的 Hamilton 系统,从而我们可以用高精度辛格式进行数值求解.

下面讨论可分 Hamilton 系统辛格式的构造. 引进记号 z=(x,p), 则 Hamilton 系统 (6) 可以写为

$$\dot{z} = \{z, H(z)\},\tag{7}$$

这里 $\{,\}$ 表示 Possion 括号, $\{F,G\} = F_xG_p - F_pG_x$.

如果我们引进微分算子 $D_G:D_GF=\{F,G\}$, 那么 (7) 可以写为

$$\dot{z} = D_H z. \tag{8}$$

设 $z(t)|_{t=0}=z(0)$, 那么 (8) 的解可以写为

$$z(t) = [\exp(tD_H)]z(0) = \exp(t(D_a + D_b))z(0) = \exp(t(A + B))z(0),$$

$$A = D_b, B = D_a$$
(9)

若存在实数 $c_i, d_i, i = 1, 2, \dots, k$ 使得

$$\exp(t(A+B)) = \prod_{i=1}^{k} \exp(c_i t A) \exp(d_i t B) + O(t^{n+1}).$$
 (10)

令

$$z'(t) = \left[\prod_{i=1}^{k} \exp(c_i t A) \exp(d_i t B)\right] z(0), \tag{11}$$

则

$$z'(t) = z(t) + O(t^{n+1}). (12)$$

这样我们就得到一 n 阶格式 (11), 由于 $\exp(c_i tA)$, $\exp(d_i tB)$ 均为辛变换,于是 (11) 为辛格式. (11) 可写成映射的合成

$$x_{i} = x_{i-1} + tc_{i} \frac{\partial b}{\partial p}(p_{i-1}), \quad p_{i} = p_{i-1} - td_{i} \frac{\partial a}{\partial x}(x_{i}).$$

$$(13)$$

(13) 为一单步 k 阶段 n 阶显式辛格式.

由上面分析可知, 要想构造可分 Hamilton 系统的显式辛格式, 关键是确定系数 $c_i, d_i, i = 1, 2, \dots, k$, 使得 (10) 式成立. 关于确定 $c_i, d_i, i = 1, 2, \dots, k$ 的方法, Suzuki 和 Yoshida 已经建立起了一般理论, 我们只列举几个常用的格式. 详情请看 [5]-[12].

2 阶格式:
$$k=2$$
 $c_1=c_2=1/2$, $d_1=1,d_2=0$

3 阶格式:
$$k=3$$
 $c_1=7/24$, $c_2=3/4$, $c_3=-1/24$, $d_1=2/3$, $d_2=-2/3$, $d_3=1$

4 阶格式:
$$k=4$$
 $c_1=c_4=\frac{1}{(2-2^{\frac{1}{3}})},$ $c_2=c_3=\frac{1-2^{1/3}}{(2-2^{\frac{1}{3}})}$ $d_1=d_3=\frac{1}{(2-2^{\frac{1}{3}})},$ $d_2=-\frac{2^{1/3}}{(2-2^{\frac{1}{3}})},$ $d_4=0$

6 阶格式:
$$k=8$$
 $c_1=c_8=\frac{1}{2}m_3, \ c_2=c_7=\frac{1}{2}(m_2+m_3),$ $c_3=c_6=\frac{1}{2}(m_1+m_2), \ c_5=c_4=\frac{1}{2}(m_1+m_0),$ $d_1=d_7=m_3, \ d_2=d_6=m_2, \ d_3=d_5=m_1,$ $d_4=m_0, \ d_8=0,$ $m_1=-0.117767998417887E1, \ m_2=0.235573213359357E0,$ $m_3=0.784513610477560E0, \ m_0=1-2(m_1+m_2+m_3).$

§ 3. 数值计算结果

我们以正弦速度分布 $c=1-0.2\sin(3\pi x_1)\sin(0.5\pi x_2)$ 为模型,首先利用以 τ 为参数的射线方程 (3) 进行射线追踪,图 1 为用四阶显式辛几何算法计算的结果.图 2 为用四阶显式 Runge-Kutta 算法计算的结果.从图中可以看出,二者的射线轨迹基本一致.

关于走时 (相函数) 的计算, 利用公式 $T=\int_0^\tau \frac{1}{c^2}d\tau$ 进行数值积分. 本文采用梯形公式进行数值积分, 为了便于观察, 在计算走时时, 我们把速度分布变为 $c=1+0.2\sin(3\pi x_1)\sin(0.5\pi x_2)$, 以下同. 图 3 为用四阶显式辛几何算法计算的走时曲线, 图 4 为用四阶显式 Runge-Kutta 算法计算的走时曲线, 二者基本一致.

在 Hamilton 量保持方面, 我们以 Hamilton 函数为例进行比较, 沿射线轨迹 Hamilton 函数

$$H(x,p) = rac{1}{2} \Big\{ p_1^2 + p_2^2 - rac{1}{c^2} \Big\} \equiv 0.$$

图 5 为用四阶显式辛几何算法计算的沿射线轨迹 Hamilton 函数值,图 6 为用四阶显式 Runge-Kutta 算法计算的沿射线轨迹 Hamilton 函数值. 从图中可以看出,辛算法基本上保持了 Hamilton 函数恒为 0,但 Runge-Kutta 算法在时间较长时有很大的误差.

下面利用以时间 t 为参数的射线方程 (4) 进行射线追踪. 由于 (4) 是一不可分的 Hamilton 系统, 辛算法为隐式算法. 图 7 为用四阶隐式辛几何算法计算的射线轨迹, 图 8 为用四阶显式 Runge-Kutta 算法计算的射线轨迹. 从图中可以看出, 二者基本一致.

关于走时 (相函数) 的计算,比较简单,因为 T = t. 图 9 为用四阶隐式辛几何算法计算的走时曲线、图 10 为用四阶显式 Runge-Kutta 算法计算的走时曲线。二者基本一致.

从以上分析可以看出,在利用辛几何算法进行射线追踪时,若利用以 t 为参数的射线方程进行射线追踪,辛算法为隐式的,因而需要进行迭代,从而速度比较慢,而且往往不收敛. 所以我们在利用辛几何算法进行射线追踪时,利用以 τ 为参数的射线方程,然后利用数值积分求走时. 因为数值积分所需要的 x 和 p 的值已经算出,因而数值积分将非常简单. 图 11 为利用以 τ 为参数的射线方程,用四阶显式辛几何算法和梯形积分公式计算的走时曲线. 图 12 为利用以 t 为参数的射线方程,用四阶显式 Runge-Kutta 算法计算的走时曲线,从图中可以看出,二者完全吻合.

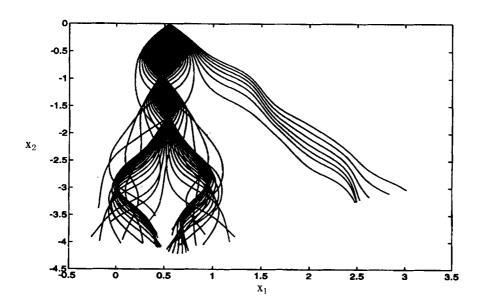


图 1 四阶显式辛几何算法计算的射线轨迹. 步长 h=0.01, 初始角从 0.87964594 到 2.236814,400 步. 初始点为 (0.55,0), 以下同.

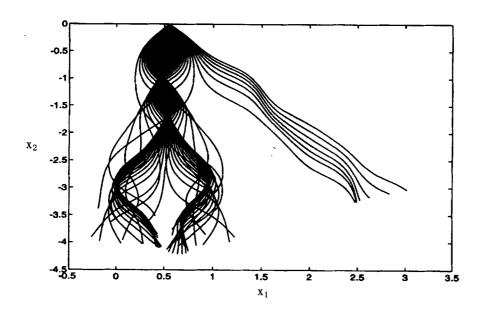


图 2 四阶显式 Runge-Kutta 算法计算的射线轨迹. 步长 h=0.01, 初始角从 0.87964594 到 2.236814,400 步.

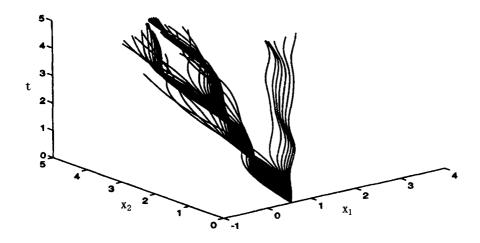


图 3 四阶显式辛几何算法计算的走时曲线. 步长 h=0.01, 初始角从 0.87964594 到 2.236814,400 步.

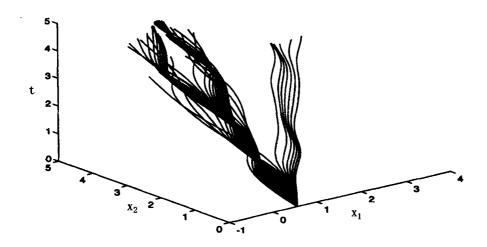


图 4 四阶显式 Runge-Kutta 算法计算的走时曲线. 步长 h=0.01, 初始角从 0.87964594 到 2.236814,400 步.

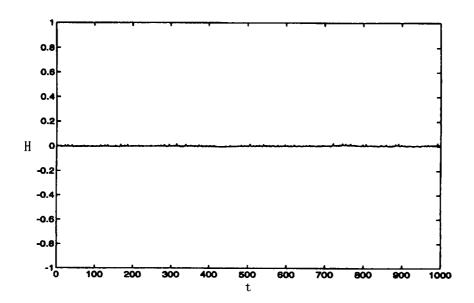


图 5 四阶显式辛几何算法计算的沿射线轨迹 Hamilton 函数值. 步长 h=0.1,10000 步.

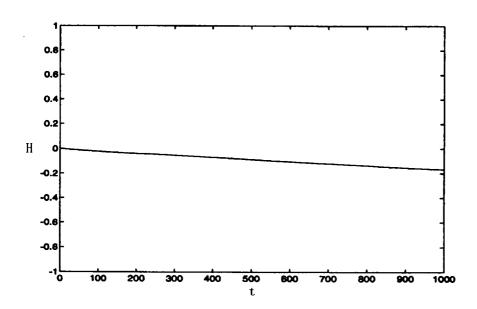


图 6 四阶显式 Runge-Kutta 算法计算的沿射线轨迹 Hamilton 函数值. 步长 h=0.1,10000 步.

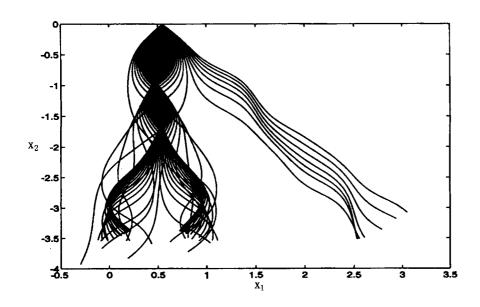


图 7 四阶隐式辛几何算法计算的射线轨迹. 步长 h=0.01,400 步.

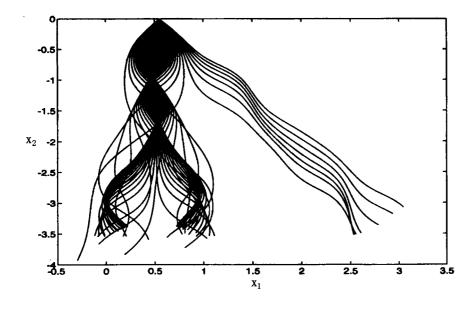


图 8 四阶显式 Runge-Kutta 算法计算的射线轨迹. 步长 h=0.01,400 步.

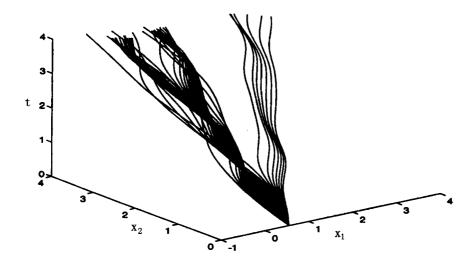


图 9 四阶隐式辛几何算法计算的走时曲线. 步长 h=0.01,400 步.

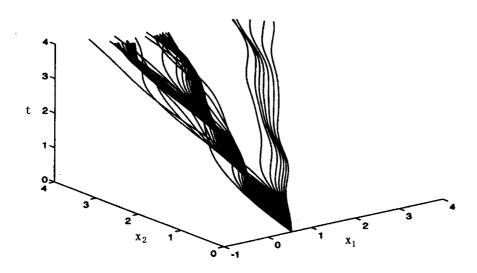


图 10 四阶显式 Runge-Kutta 算法计算的走时曲线. 步长 h=0.01,400 步.

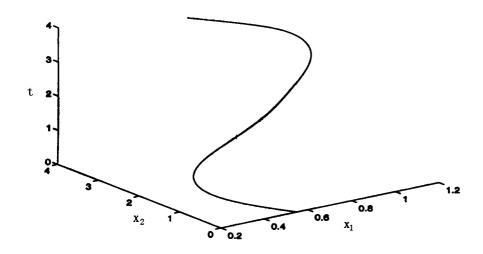


图 11 利用以 au 为参数的射线方程,用四阶显式辛几何算法和梯形积分公式计算的走时曲线. 步长 h=0.01,400 步. 初始角为 2.1865485

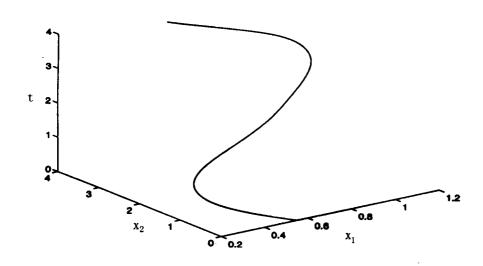


图 12 利用以 t 为参数的射线方程,用四阶显式 Runge-Kutta 算法计算的走时曲线. 步长 h=0.01,400 步. 初始角为 2.1865485

§ 4. 结论

本文以正弦速度分布为模型,进行了辛几何算法和 Runge-Kutta 算法的比较,计算结果表明:在取同样步长情况下,二者的射线轨迹基本一致,运算速度辛几何算法稍快于 Runge-

Kutta 算法,但在 Hamilton 量保持方面,在时间较长时,辛几何算法要远远优于 Runge-Kutta 算法. 但利用以 t 为参数的射线方程时,辛算法为隐式的,此时我们可以利用以 τ 为参数的射线方程,然后利用数值积分求走时,数值计算结果表明,这种方法是切实可行的.

参考文献

- Maslov. V.P. Semi-classical approximation in quantum mechanics. D. Reidel, Hingham, Mass, 1981.
- [2] 尹峰, 李幼铭, 反演二维非均匀介质背景中速度扰动的波动方程层析成像方法, 应用地震层析成像, 地质出版社, 1993.
- [3] 刘家琦,走时地震层析成像的方法技术,应用地震层析成像,地质出版社。 1993.
- [4] V.I. Arnold, Mathematical methods of classical mechanics. Springer-Verlag, 1978.
- [5] Feng kang, On difference scheme and symplectic geometry, proceedings of the 1984 Beijing symposium on differential geometry and differential equations, Feng kang, Science press, Beijing, 1985,42-58.
- [6] Qin Mengzhao Wang Daoliu and Zhang Meiqing, Explicit symplectic difference schemes for separable hamiliton system, JCM 9:3 (1991),211-221.
- [7] Ruth R.D.A canonical integration techinque, IEEE trans on nuclear sciences 1983, NS-30: 2669-2671.
- [8] M.Suzuki, Phys. Lett. A 165(1992) 387.
- [9] Haruo Yoshida, Construction of higher order sympletic integrators, Phys. Lett. A 150(1990), 262-269.
- [10] Qin Mengzhao, Zhu Wenjie, Construction of Higher Order Symplectic schemes by composition, Computing 47, 309-321 (1991).
- [11] Qin Mengzhao, Zhang Meiqing: Symplectic Runge-Kutta schemes for Hamilton systems. preprint 1998 Computing center, Aca. Sin. Beijing.
- [12] Qin Mengzhao, Zhu Wenjie, Zhang Meiqing, Construction of a three-stage difference scheme for ordinary differential equations, Preprint 1990 Computing center, Aca. Sin. Beijing.