

马 啸, 杨顶辉, 张锦华. 求解声波方程的辛可分 Runge-Kutta 方法. 地球物理学报, 2010, 53(8): 1993~2003, DOI: 10.3969/j.issn.0001-5733.2010.08.026

Ma X, Yang D H, Zhang J H. Symplectic partitioned Runge-Kutta method for solving the acoustic wave equation. *Chinese J. Geophys.* (in Chinese), 2010, 53(8): 1993~2003, DOI: 10.3969/j.issn.0001-5733.2010.08.026

求解声波方程的辛可分 Runge-Kutta 方法

马 啸¹, 杨顶辉^{1*}, 张锦华²

¹ 清华大学数学科学系, 北京 100084

² 昆明工业职业技术学院, 昆明 650302

摘 要 本文基于声波方程的哈密顿系统, 构造了一种新的保辛数值格式, 简称 NSPRK 方法. 该方法在时间上采用二阶辛可分 Runge-Kutta 方法, 空间上采用近似解析离散算子进行离散逼近. 针对本文发展的新方法, 我们给出了 NSPRK 方法在一维和二维情况下的稳定性条件、一维数值频散关系以及二维数值误差, 并在计算效率方面与传统辛格式和四阶 LWC 方法进行了比较. 最后, 我们将本文方法应用于声波在三层各向同性介质和异常体模型中的波传播数值模拟. 数值结果表明, 本文发展的 NSPRK 方法能有效压制粗网格或具有强间断情况下数值方法所存在的数值频散, 从而极大地提高了计算效率, 节省了计算机内存.

关键词 哈密顿系统, 辛算法, 近似解析离散, 波场模拟, 数值频散

DOI: 10.3969/j.issn.0001-5733.2010.08.026

中图分类号 P631, O29

收稿日期 2009-11-25, 2010-05-12 收修定稿

Symplectic partitioned Runge-Kutta method for solving the acoustic wave equation

MA Xiao¹, YANG Ding-Hui^{1*}, ZHANG Jin-Hua²

¹ Department of Mathematical Sciences, Tsinghua University, Beijing 100084, China

² Kunming Vocational and Technical College of Industry, Kunming 650302, China

Abstract In this paper, we develop a new symplectic numerical scheme based on Hamiltonian system of the acoustic wave equation, which is called the NSPRK method in brief. The NSPRK method uses the nearly-analytic discrete operators to approximate the high-order differential operators, and employs the second-order symplectic partitioned Runge-Kutta method to numerically solve the Hamiltonian system. For the proposed NSPRK method in this paper, we obtain the stability conditions for 1D and 2D cases, the numerical dispersion relation for the 1D case and 2D numerical errors. Meanwhile, we compare the NSPRK against the conventional symplectic method and the fourth-order LWC method in computational efficiency. Finally, we apply the NSPRK method to model acoustic wave propagating in a three-layer isotropic medium and an abnormal body model. The promising numerical results illustrate that the NSPRK method can effectively suppress the numerical dispersion caused by discretizing the acoustic-wave equation when coarse grids are used or models have large velocity contrasts between adjacent layers.

基金项目 国家杰出青年科学基金(40725012)资助.

作者简介 马 啸, 女, 1987 年生, 清华大学数学科学系博士研究生, 主要研究方向为地震波方程的数值方法及波场模拟.

E-mail: maxiao0131@gmail.com

* 通讯作者 杨顶辉, 清华大学教授, 主要从事计算地球物理、孔隙介质中的波传播理论等研究. E-mail: dhyang@math.tsinghua.edu.cn

Therefore, the NSPRK method can greatly increase the computational efficiency and save computer memory.

Keywords Hamiltonian system, Symplectic method, Nearly-analytic discretization, Wave-field simulation, Numerical dispersion

1 引言

声波在地球介质中的传播实际上是一个波动方程的正演过程,为了获取地球内部信息,正演模拟技术一直是地球物理学中非常重要的研究内容.优良的正演数值方法能够大大提高波场模拟的效率.20世纪以来,计算地球科学领域陆续出现了多种数值模拟方法,如有限差分法^[1~3]、伪谱法^[4]、有限元法^[5]、射线追踪法^[6]等,这些方法都有各自的优点和不足,这在 Yang^[7]的研究中已指出.

有限差分法因为其编程易实现、相同网格点数情况下存储量小和计算迅速、并行效率高等优点在地球物理学中得到广泛应用.但使用传统的显式差分格式进行波动方程求解时,会因为数值波速与真实波速的不同步,在粗网格情况下产生假波,引起严重的数值频散^[2,8~11],使得人们难以辨别真假波,失去了正演模拟计算的意义.为消除数值频散,通常采用的方法有两种,一是构造高阶数值格式^[2],二是加细网格.高阶数值格式虽具有高阶精度,但并不相应具有低数值频散^[8];若采用加细网格来消除频散,则会带来存储量的急剧增加;另一方面,网格点数的增多,必将导致计算时间的大量增加,并且由于空间步长减小而不得不缩短时间步长(因为受显式方法稳定性条件的限制),从而进一步导致迭代步数增多,计算耗时剧增,因此对于大尺度波场模拟计算,这种加密网格的做法是不现实的.

为了克服有限差分方法存在的数值频散问题,以适应大尺度波场模拟的要求,Yang^[9]在2003年率先将一种近似解析离散化算子^[12]引入波动方程的数值求解中.该算子是基于截断的泰勒展开以构造空间局部插值函数,并通过相邻网格点之间的连接关系,用位移及其梯度的线性组合来逼近空间高阶偏导数.在使用该离散算子的同时,结合不同的时间离散方法,可以获得具有低数值频散的数值格式.目前已经发展了 NADM^[9]、ONADM^[13]、INADM^[14]、WNADM^[15]等基于泰勒公式展开进行时间离散的数值方法,以及同时使用了三阶 Runge-Kutta 和算子级数方法的 IRK-DSM 方法^[16],这些方法均具有

良好的压制数值频散的效果.但这些方法均为非辛格式.

我们知道,地震波在地球介质中的传播,理论上是一个保守无耗散的过程,是一个单参数连续辛变换^[17].波动方程可以表述为哈密顿系统的形式,且其时间上具有辛结构.冯康^[18]认为,对于哈密顿系统的离散格式应当采用保辛的数值格式.他和他的研究小组,从哈密顿力学的数学基础——辛几何出发,给出了完整的单辛算法理论框架.辛算法能够严格保持哈密顿系统的辛结构,而且具有计算的稳健性、长时间跟踪能力^[19,20].

根据哈密顿函数的形式,波动方程可以转化为线性可分哈密顿系统.一类有效的针对可分哈密顿系统的辛格式为保辛的分部龙格库塔格式(partitioned Runge-Kutta),简称辛 PRK 格式^[18,21].孙耿^[21]在1997年的研究中指出,可分哈密顿系统的低阶显式辛格式中,二阶显式的辛 PRK Lobatto III A-III B 方法无论从工作量还是稳定性上与其他辛 PRK 格式比较,均为最优.针对波动方程的哈密顿形式构造单辛算法的传统做法是:在时间上使用辛差分离散,空间上采用二阶或者四阶精度的差分格式进行离散^[21].但应该指出的是,采用传统的空间离散方法,即目前已有的求解波动方程的辛方法不能很好地压制数值频散,因此,我们希望寻找一种合适的空间离散方法,使得辛格式在保辛的同时,能有效压制数值频散.

本文基于声波方程的哈密顿表述,在时间上采用二阶显式的辛 PRK Lobatto III A-III B 格式^[21],空间上采用近似解析的离散方法^[7,9,13~15],得到了一种时间精度为二阶,空间精度为四阶的新型辛格式.稳定性分析、数值频散分析,以及波场模拟结果表明,这种新的辛方法具有有效压制数值频散、计算快速以及低存储需求等优良性质.

2 NSPRK 方法的构造

2.1 二阶辛 PRK 方法

首先回顾可分哈密顿系统的二阶显式辛 PRK 格式的构造过程.一般的 $2n$ 维哈密顿系统

可以写成如下形式^[18,21]:

$$\begin{cases} \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = f_i(p, q), \\ \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = g_i(p, q), 1 \leq i \leq n \end{cases} \quad (1)$$

其中,满足下列条件的系统称为可分的哈密顿系统:

$$f_i(p, q) = f_i(q), g_i(p, q) = g_i(p), 1 \leq i \leq n \quad (2)$$

下面以一维波动方程:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad (3)$$

为例,说明其哈密顿系统和二阶辛 PRK 格式.

若令 $v = \partial u / \partial t$, 则可将方程(3)写成如下线性可分的哈密顿系统:

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = v, \\ \frac{dv}{dt} = Lu, \end{cases} \quad (4)$$

其中,偏微分算子 $L = c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, 系统(4)的哈密顿函数为 $H = \frac{1}{2} \int v^2 + c^2 u_x^2 dx$. 假设已将 Lu 离散化,则方程(4)可视为关于时间 t 的半离散化常微分方程组,那么可选用适当的常微分方程的数值解法进行求解. 本文采用孙耿^[19]提出的二阶对称辛可分 Runge-Kutta III A-III B 格式,将其应用到求解半离散的哈密顿系统(4)上,从而得到如下计算式:

$$V_1 = v^n + \frac{1}{2} \Delta t L u^n$$

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t V_1, \quad v^{n+1} = V_1 + \frac{1}{2} \Delta t L u^{n+1}, \quad (5)$$

其中 u^n, v^n 分别代表第 n 时间层的离散位移向量以及粒子速度向量. 依据 PRK 方法保辛的判别方法^[18,21], 容易证明该计算格式具有保辛的性质.

2.2 空间离散

在辛格式构造中,通常采用二阶或者四阶差商^[21]来逼近算子 $L = c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, 以获得空间精度为二阶或四阶的辛方法. 例如,对于具有保辛性质的辛 PRK 方法,其四阶精度的空间离散格式如下^[21]:

$$Lu_i^n = \frac{c^2}{12\Delta x^2} (-u_{i-2}^n + 16u_{i-1}^n - 30u_i^n + 16u_{i+1}^n - u_{i+2}^n). \quad (6)$$

本文拟采用近似解析离散化的思想来离散方程(4)中的空间导数. 为此,令:

$$U = \left(u, \frac{\partial u}{\partial x} \right)^T, \quad V = \left(v, \frac{\partial v}{\partial x} \right)^T, \quad (7)$$

则方程(4)可变为

$$\begin{cases} \frac{dU}{dt} = V \\ \frac{dV}{dt} = \Lambda U \end{cases}, \quad (8)$$

其中,算子矩阵定义为 $\Lambda = \begin{pmatrix} L & O \\ O & L \end{pmatrix}, L = \begin{pmatrix} L & 0 \\ 0 & L \end{pmatrix}$.

针对哈密顿系统(8),本文采用近似解析离散方法离散方程(8)中的高阶空间导数. 对于一维情况,有如下计算公式^[13]:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i^n &= \frac{2}{\Delta x^2} (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) \\ &\quad - \frac{1}{2\Delta x} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i+1}^n - \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i-1}^n \right], \quad (9a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i^n &= \frac{15}{2\Delta x^3} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) - \frac{3}{2\Delta x^2} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i+1}^n \right. \\ &\quad \left. + 8 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i^n + \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i-1}^n \right]. \quad (9b) \end{aligned}$$

对于粒子速度 v ,我们采用类似(9a)、(9b)的公式逼近. 换言之,将公式(9a)和(9b)中的 u 用 v 代替即可得到计算 v 高阶空间导数的近似公式. 对于二维情形,其高阶空间导数的计算参见附录. 为叙述方便,将本文的近似解析(Nearly analytic)辛 PRK 格式,简称为 NSPRK 格式,而空间离散若采用前述传统空间离散格式(6)所得的辛 PRK 方法,简称为 SPRK 方法. 由于 NSPRK 方法在时间上采用了辛格式,因此它在时间上具有保辛性,另一方面,由于 NSPRK 在空间上采用了近似解析离散方法,因此 NSPRK 方法具有时间保辛和弱数值频散的双重优势. 在后面,我们将通过数值实验证实这一优点.

3 稳定性条件

稳定性分析是显式差分方法的重要研究内容,因此本节将分析并给出 NSPRK 方法的稳定性条件. 为此,我们首先定义库朗数 C 如下:

一维情形: $C = c_0 \Delta t / \Delta x$

二维情形,若令 $\Delta x = \Delta z = h$, 则: $C = c_0 \Delta t / h$

c_0 为波速, Δx 与 Δz 分别为 x 和 z 方向的步长.

类似于 Yang 等人^[13]的稳定性分析方法,我们

可得 NSPRK 方法的稳定性条件如下:

对于一维情况: $\Delta t \leq 0.5163 \Delta x / c_0 \approx C_{\max} \Delta x / c_0$

对于二维情况: $\Delta t \leq 0.4588 h / c_0 \approx C_{\max} h / c_0$

其中, C_{\max} 表示最大库朗数.

4 数值频散分析

求解波动方程的有限差分方法都是用离散形式的差分方程逼近连续形式的微分方程, 因此, 会造成数值波速与真实波速的不同, 从而导致离散方法存在数值频散或称为频散误差. 为研究这种频散误差, 我们首先定义数值波速与真实波速的比率 R 如下:

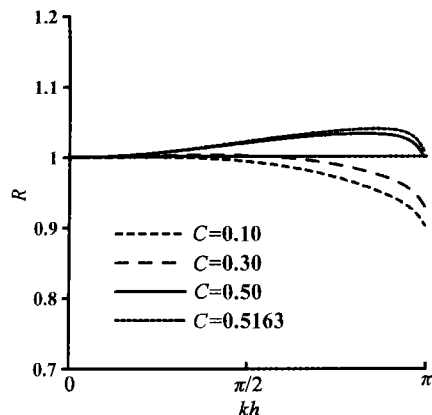


图1 NSPRK 方法的数值频散比率 R (公式(10)) 曲线图, 由下至上 4 条线分别对应库朗数: $C=0.10, 0.30, 0.50, 0.5163$

Fig.1 The numerical dispersion ratio R (formula (10)) of the NSPRK method for different Courant numbers. Four lines correspond to $C=0.10, 0.30, 0.50$, and 0.5163 , respectively

在频散关系图 1 和图 2 中, 横坐标 kh 表示波数与空间步长的乘积. 当震源确定之后, 波数 k 即可确定, 在此种情况下, 空间步长 h 越大, 表示每个波长内取的采样点越少. 从频散曲线图 1 和图 2 可看到, 随着 kh 的增大, 大多数情况下 NSPRK 与 SPRK 方法的数值频散比率 R 偏离 1 越大, 表明这两种辛方法具有相似的频散规律, 即随着 h 的增大, 数值频散越严重. 同时, 从图 1 和图 2 也可看出, 对于不同的空间采样点数和不同的库朗数, NSPRK 方法的数值频散比率 R 都在 0.90 和 1.05 之间变化, 换言之, NSPRK 方法的最大频散误差小于 10%, 特别地, 当达到最大库朗数时, NSPRK 方法的最大数值频散误差约为 3%, 而 SPRK 方法的最大频散误差为 15.4%.

5 数值误差和计算效率

由于 NSPRK 在空间上采用近似解析离散方法

$$R = \frac{c_{\text{num}}}{c_0}, \quad (10)$$

其中 c_{num} 表示数值波速, 而 c_0 为真实波速. 显然, R 越接近 1, 表示数值波速与真实波速的误差越小, 即数值频散越小, 反之, 表明数值频散越严重. 采用 Dablain^[2] 和 Yang^[13] 的数值频散分析方法, 可以得到 NSPRK 方法和 SPRK 方法在不同库朗数下的数值频散关系, 如图 1 和图 2 所示, 其中 SPRK 方法一维最大库朗数条件可参见文献[22].

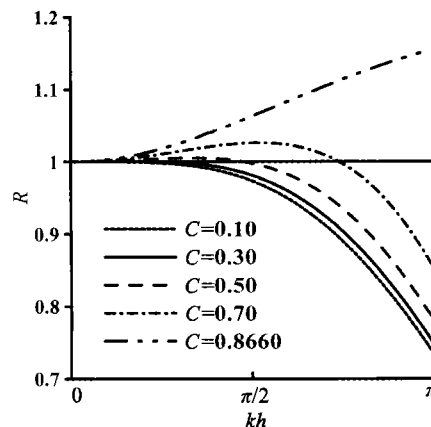


图2 SPRK 方法的数值频散比率 R (公式(10)) 曲线图, 由下至上 5 条线分别对应库朗数: $C=0.10, 0.30, 0.50, 0.70, 0.8660$

Fig. 2 The numerical dispersion ratio R (formula (10)) of the SPRK method for different Courant numbers. Five lines correspond to $C=0.10, 0.30, 0.50, 0.70$, and 0.8660 , respectively

进行离散, 而在时间上使用二阶 PRK 格式进行离散, 因此 NSPRK 方法在理论上具有四阶空间精度和二阶时间精度. 下面, 我们选取二维声波方程的初值问题进行数值计算以进一步研究其数值误差, 并与 SPRK 辛格式、二阶交错网格方法的数值误差进行比较. 本文中, 我们选取的二维声波方程初值问题如下:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c_0^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) = 0, \\ u(0, x, z) = \cos \left[-\frac{2\pi f_0}{c_0} x \cos \theta_0 - \frac{2\pi f_0}{c_0} z \sin \theta_0 \right], \\ \frac{\partial u}{\partial t}(0, x, z) = -2\pi f_0 \sin \left[-\frac{2\pi f_0}{c_0} x \cos \theta_0 - \frac{2\pi f_0}{c_0} z \sin \theta_0 \right], \end{cases} \quad (11)$$

其中 c_0 是波速, f_0 是频率, θ_0 是初始时刻声波的入射角度. 该问题有如下解析解:

$$u(t, x, z) = \cos \left[2\pi f_0 \left(t - \frac{1}{c_0} x \cos \theta_0 - \frac{1}{c_0} z \sin \theta_0 \right) \right]. \quad (12)$$

定义数值解的相对误差如下:

$$E_r(\%) = \left\{ \frac{1}{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M [u(t_n, x_i, z_j)]^2} \times \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M [u(t_n, x_i, z_j) - u_{i,j}^n]^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \times 100, \tag{13}$$

其中 $u_{i,j}^n$ 为数值解, $u(t_n, x_i, z_j)$ 为精确解. 选取网格点数 $N=M=201$, 频率 $f_0=15\text{ Hz}$, 波速 $c_0=4000\text{ m/s}$, $\theta_0=\pi/4$.

图 3 给出了三种方法在三种不同情况下的相对误差曲线, 表 1 为三种方法在不同情况下的最大相对误差. 从误差曲线图 3(a~c) 可看出, NSPRK 方法、SPRK 方法和交错网格方法在三种情况下的相对误差都呈现增长的趋势. 对于所选取的三组计算

参数, NSPRK 格式的相对误差均小于二阶交错网格和 SPRK 辛方法的相对误差. 另外, 从表 1 可以看出, NSPRK 方法的最大相对误差远远小于其他两种方法的最大相对误差. 例如, 当 $h=60\text{ m}$, $\Delta t=2\text{ ms}$ 时, NSPRK 的最大相对误差仅是二阶交错网格方法的 16.9%, 是 SPRK 方法的 13.9%.

表 1 不同计算方法在三组计算参数情况下位移 u 的最大相对误差比较

Table 1 Comparison of the maximum relative errors of the displacement u , computed by different methods for three cases

计算方法	二阶 NSPRK	二阶 SPRK	二阶交错网格
情形 1: $h=20\text{ m}$, $\Delta t=0.3\text{ ms}$	0.2786	0.7691	0.3600
情形 2: $h=40\text{ m}$, $\Delta t=1\text{ ms}$	1.1285	18.1119	13.8645
情形 3: $h=60\text{ m}$, $\Delta t=2\text{ ms}$	13.7050	98.0806	81.0421

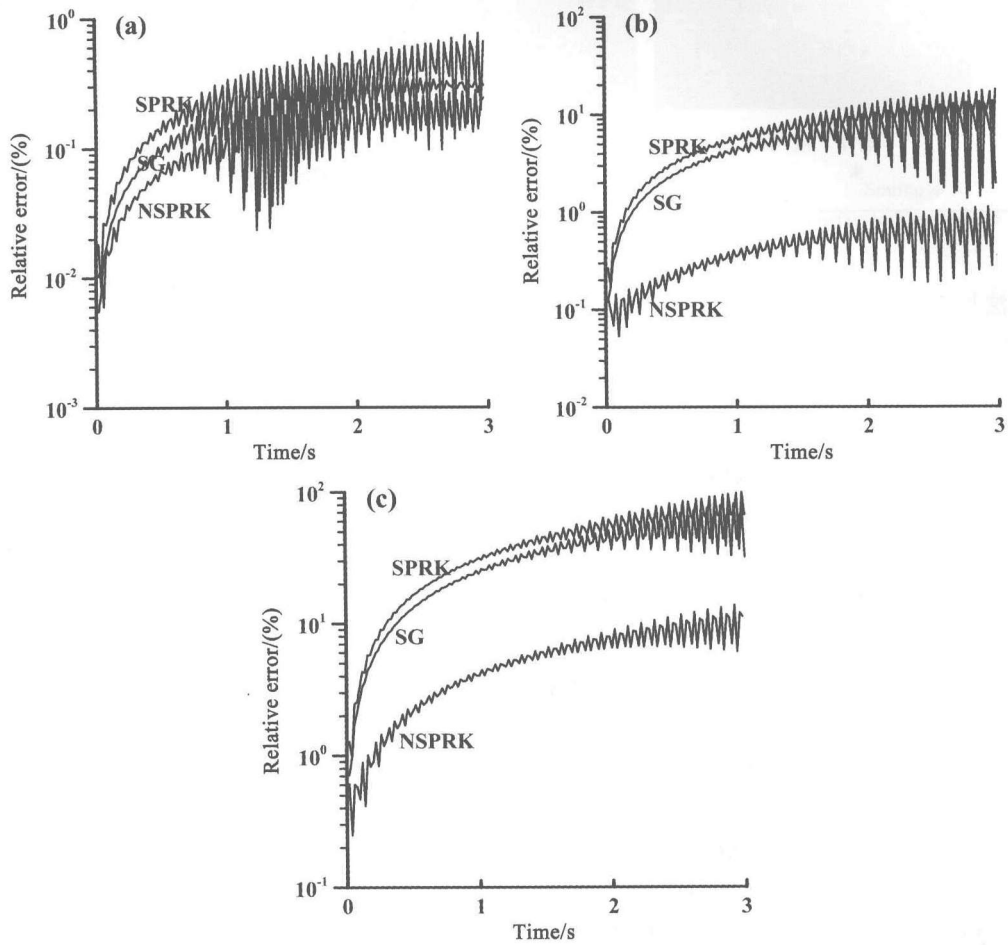


图 3 SPRK、二阶交错网格和 NSPRK 方法求解初值问题(11)时,不同网格情况下位移 u 在不同时刻相对误差的比较:

(a) $\Delta x=\Delta z=h=20\text{ m}$, $\Delta t=0.3\text{ ms}$; (b) $\Delta x=\Delta z=h=40\text{ m}$, $\Delta t=1\text{ ms}$; (c) $\Delta x=\Delta z=h=60\text{ m}$, $\Delta t=2\text{ ms}$

Fig.3 The relative errors of the displacement u , computed by the SPRK, second-order staggered-grid method, and the NSPRK measured by E_r , are shown in a semi-log scale for the 2D initial-value problem (11), corresponding the three different cases: (a) $\Delta x=\Delta z=h=20\text{ m}$, $\Delta t=0.3\text{ ms}$, (b) $\Delta x=\Delta z=h=40\text{ m}$, $\Delta t=1\text{ ms}$, (c) $\Delta x=\Delta z=h=60\text{ m}$, $\Delta t=2\text{ ms}$

下面研究 NSPRK 方法的波场模拟效果和计算效率. 为此, 我们选取如下的二维声波方程:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c_0^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) = f(t) \delta(x_s, z_s), \quad (14)$$

其中 $\delta(x_s, z_s)$ 为除点 (x_s, z_s) 外值均为 0 的 δ 函数, 点 (x_s, z_s) 表示震源位置.

在这个数值实验中, 我们选取 $c_0 = 4$ km/s, 计算中保持库朗数 $C = c_0 \Delta t / \Delta x \approx 0.285$ 不变, 计算区域为 $0 \leq x \leq 10$ km, $0 \leq z \leq 10$ km, 接收器位于点 (7.1 km, 5 km) 处; 震源位于计算区域中心, 震源

是主频为 $f_0 = 40$ Hz 的 Ricker 子波, 其随时间变化的源函数如下:

$$f(t) = -5.76 f_0^2 [1 - 16(0.6 f_0 - 1)^2] \times \exp[-8(0.6 f_0 - 1)^2]. \quad (15)$$

图 4 给出了粗网格 ($\Delta x = \Delta z = 28$ m) 情况下 $T = 1.0$ s 时刻的声波快照, 其中图 4(a~c) 分别是由四阶 Lax-Wendroff 修正 (LWC) 格式、SPRK 方法和 NSPRK 方法计算得到的波场快照. 而图 5 则分别是由这三种方法给出的在点 (7.1 km, 5 km) 处的波形记录. 图 4a、4b 和图 5a、5b 表明四阶 LWC

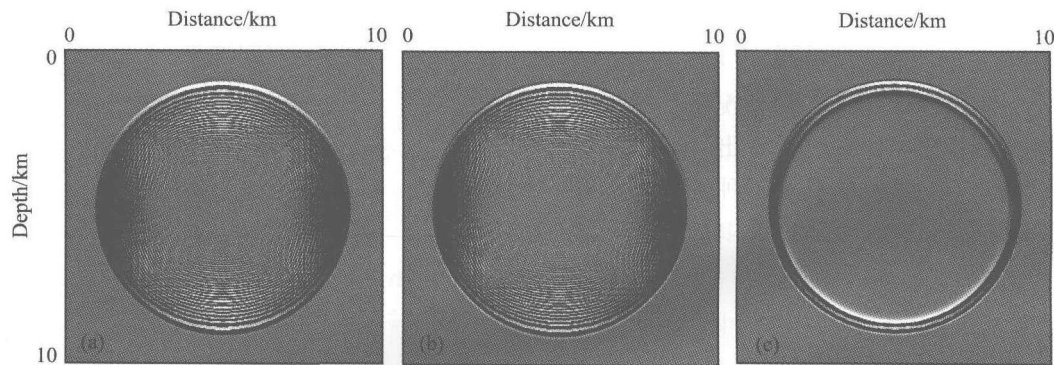


图 4 粗网格 ($\Delta x = \Delta z = 28$ m) 条件下 $T = 1.0$ s 时刻的声波场瞬时快照:

(a) 四阶 LWC 方法; (b) SPRK 方法; (c) NSPRK 方法

Fig. 4 Snapshots of acoustic wave fields at time $T = 1.0$ sec on the coarse grid ($\Delta x = \Delta z = 28$ m), generated by (a) the fourth-order LWC, (b) the SPRK method, and (c) the NSPRK method

与 SPRK 方法均有严重的数值频散, 而在相同条件下, 本文提出的 NSPRK 方法却给出了清晰的波场快照和波形 (见图 4c 和图 5c). 由此可见, 在粗网格下, 本文的 NSPRK 方法比其他两种方法能更有效地压制数值频散, 获得更加精确的波场模拟结果.

为了比较在消除数值频散情况下不同方法的计算效率和存储需求量, 我们分别取 $\Delta x = \Delta z = 12$ m 和 $\Delta x = \Delta z = 13$ m, 以消除 LWC 和 SPRK 方法在模拟波场 (如图 4a 和图 4b) 时的数值频散. 图 6 给出了由四阶 LWC 和 SPRK 辛格式在精细网格条件下计算出的 $T = 1.0$ s 时刻的波场快照. 比较图 6a、6b 和图 4c, 我们可以看到它们均无可见的数值频散. 但产生这些快照及波形记录的 CPU 时间和存储量是不一样的. 在 Intel (R) Core (TM) 2 Duo CPU、内存为 2 G 的计算机环境下, 用四阶 LWC 方法和 SPRK 方法分别计算得到图 6a 和图 6b 所花费的 CPU 时间分别为 262 s 和 520 s, 而用本文提出的 NSPRK 方法计算得图 4c 花费的 CPU 时间仅为 24 s, 这表明, NSPRK 方法的计算速度大约是四阶 LWC 方法的 10.9 倍、是 SPRK 方法的 21.7 倍. 从存储量

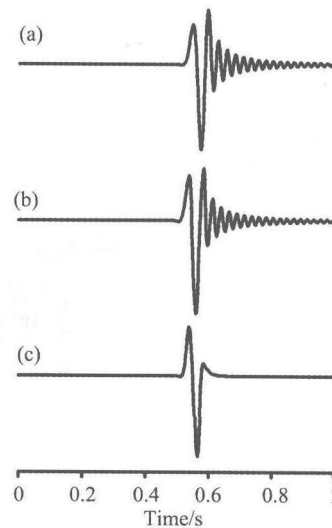


图 5 粗网格 ($\Delta x = \Delta z = 28$ m) 条件下在接收点 (7.1 km, 5.0 km) 处的波形记录: (a) 四阶 LWC 方法; (b) SPRK 方法; (c) NSPRK 方法

Fig. 5 The waveforms at the receiver R located at (7.1 km, 5.0 km) on the coarse grid ($\Delta x = \Delta z = 28$ m), generated by (a) the fourth-order LWC, (b) the SPRK method, and (c) the NSPRK method

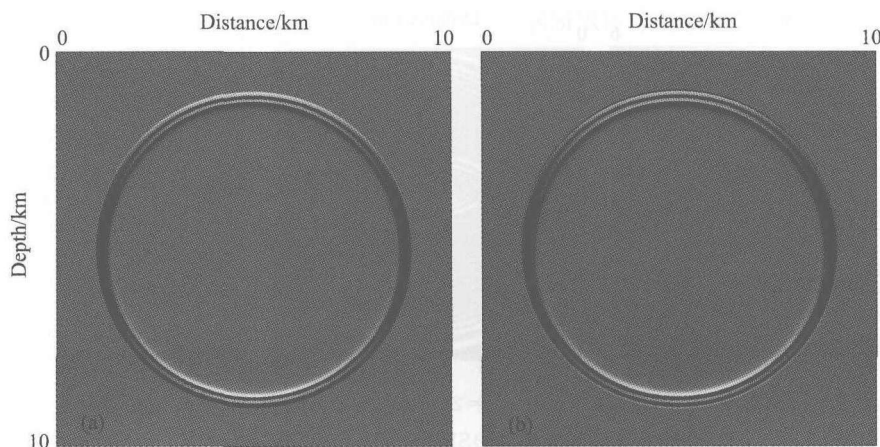


图 6 细网格条件下 $T=1.0$ s 时刻的声波场瞬时快照:

(a) 四阶 LWC 方法 ($\Delta x = \Delta z = 12$ m); (b) SPRK 方法 ($\Delta x = \Delta z = 13$ m)

Fig. 6 Snapshots of acoustic wave fields at time $T=1.0$ sec on the fine grid, generated by (a) the fourth-order LWC ($\Delta x = \Delta z = 12$ m) and (b) the SPRK method ($\Delta x = \Delta z = 13$ m)

上来看, NSPRK 方法与其余两种方法也显著不同, 四阶 LWC 方法计算得到波场快照图 6a, 需要 3 个 834×834 的存储数组, SPRK 方法计算得图 6b 需要 3 个 770×770 的存储数组, 而 NSPRK 因需要计算位移、粒子速度及其相应的空间梯度值, 需要 9 个存储数组以计算获得图 4c, 但每个数组大小仅为 358×358 . 这就意味着, NSPRK 方法需要的存储量只是四阶 LWC 方法的约 55.3%、是 SPRK 方法的约 64.9%.

6 波场模拟

为进一步研究 NSPRK 方法的计算效果, 本节我们选取两个不同的介质模型, 进行波场模拟.

6.1 三层介质模型

在这个实验中, 我们所选取的三层介质几何模型如图 7 所示, 其中, 上、中、下三层介质的声波速度分别为 3.0 km/s、2.0 km/s、4.0 km/s, 震源位于第二层介质中的点 (4 km, 3.56 km) 处 (见图 7 中所示). 实验中, 选取主频为 $f_0 = 25$ Hz 的 Ricker 子波作为震源, 震源随时间变化的函数如方程 (15) 所示. 选取空间网格步长为 $\Delta x = \Delta z = 20$ m, 时间步长为 $\Delta t = 2$ ms, 库朗数为 $C = 0.4$. 此时对应的空间采样率 (一个最小波长内的采样点个数) 为 4.

图 8 为 $T=1.0$ s 时刻分别由三种方法计算得到的波场快照. 从图 8 可以看到, 四阶 LWC 方法与 SPRK 方法的计算结果图 8a 和图 8b 均存在严重的数值频散, 而由 NSPRK 方法计算得到的波场快照图 8c 则呈现了清晰的反射和透射波. 表明 NSPRK

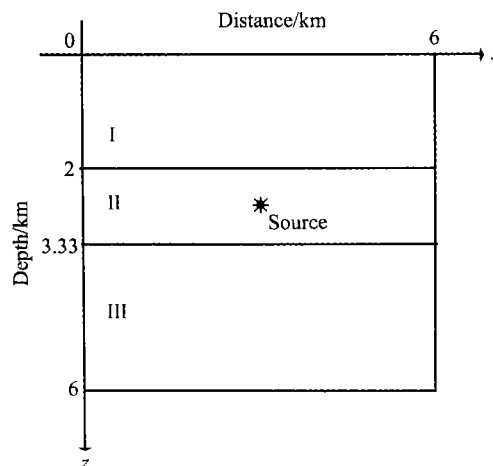


图 7 三层介质模型, 计算区域为 $0 \leq x \leq 6$ km, $0 \leq z \leq 6$ km, 在 I、II 和 III 层介质中的声波速度分别为 3.0 km/s、2.0 km/s 和 4.0 km/s, 震源位于点

$$(x_s, z_s) = (4 \text{ km}, 3.56 \text{ km})$$

Fig. 7 Geometry of the three-layer medium model, with a computational domain $0 \leq x \leq 6$ km and $0 \leq z \leq 6$ km. The velocities of acoustic wave in layer I, II and III are 3.0 km/s, 2.0 km/s, and 4.0 km/s, respectively. The source is located at $(x_s, z_s) = (4 \text{ km}, 3.56 \text{ km})$

方法在粗网格条件下对于声波在强间断层状介质中的波传播模拟也十分有效.

对于图 7 所示的三层介质模型, 将震源置于近地表处的坐标点 $(x_s, y_s) = (4 \text{ km}, 0.2 \text{ km})$, 并进行地震记录合成计算, 计算参数同上. 实验中采用 Yang 等^[23]提出的四次吸收边界条件进行边界处理, 并与使用刚性边界条件的地表地震记录进行对比.

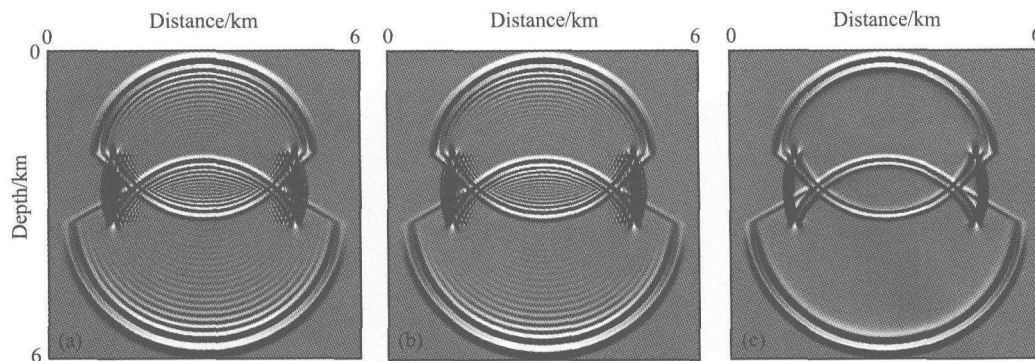


图 8 对于三层介质模型,粗网格($\Delta x = \Delta z = 20$ m)条件下 $T = 1.0$ s 时刻的声波场瞬时快照:

(a)四阶 LWC 方法;(b)SPRK 方法;(c)NSPRK 方法

Fig. 8 Snapshots of acoustic wave fields at time $T = 1.0$ sec on the coarse grid ($\Delta x = \Delta z = 20$ m) for the three-layer medium model, generated by (a) the fourth-order LWC, (b) the SPRK method, and (c) the NSPRK method, respectively

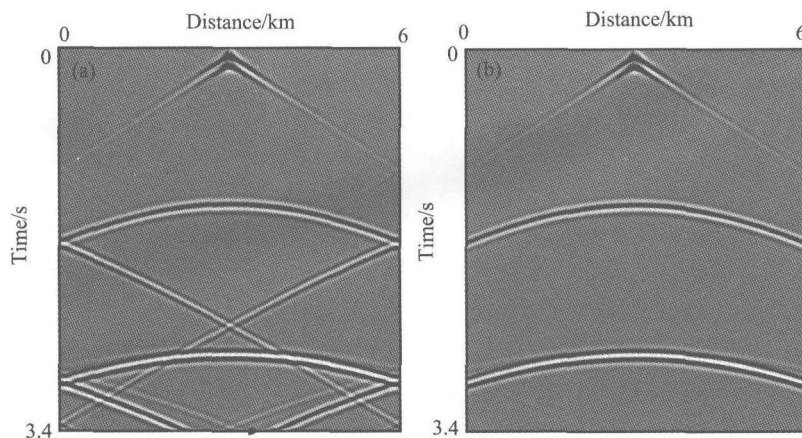


图 9 对于三层介质模型,粗网格($\Delta x = \Delta z = 20$ m)条件下由 NSPRK 方法计算得到的声波地表合成记录:

(a)使用刚性边界条件的计算结果;(b)使用四次吸收边界条件的计算结果

Fig. 9 Synthetic seismograms on the surface for the three-layer medium model, generated by the NSPRK method on the grid condition $\Delta x = \Delta z = 20$ m with (a) stiff boundary condition and (b) fourth-order absorbing boundary condition

图 9 为时间从 0 s 至 3.4 s 时刻的地表地震记录图,其中,图 9a 和图 9b 分别为采用刚性边界条件和四次吸收边界条件时的计算结果.对比图 9a 和 9b 可以看出,四次吸收边界条件具有良好的吸收效果.这说明 NSPRK 算法可以有效地与四次吸收边界条件相结合进行计算.

6.2 异常体模型

在最后的数值实验中,我们选取的地质模型是一个包含有高速异常体的介质模型,如图 10 所示.其中,异常体为边长 14.4 m 的正方形,声波在背景区域中速度是 4.0 km/s,在异常体中的速度为 5.2 km/s,具有主频 90 Hz 的 Ricker 子波源位于计算区域中心.

我们采用 NSPRK 方法进行声波场模拟,取网格步长 $\Delta x = \Delta z = 10$ m,时间步长 $\Delta t = 0.75$ ms,得

到 $T = 0.7$ s 时刻的波场快照如图 11 所示(此时对应的空间采样率为 4.4).从图 11 可以清晰地看出异常体附近的绕射波和衍射波,这说明在具有较高主频震源的波场模拟中,NSPRK 方法可以在保持一个波长内使用较少空间点的同时,得到清晰的计算结果,并且有效识别介质中的微小异常体.

7 讨论与结论

基于波动方程的哈密顿系统,本文采用二阶辛可分 Runge-Kutta 方法进行时间离散、近似解析离散算子近似空间微分算子,从而得到了一种具有时间保辛性和低数值频散特性的波动方程数值格式,即 NSPRK 方法,理论分析和数值计算表明,这种 NSPRK 方法时间上具有二阶精度,空间上是四

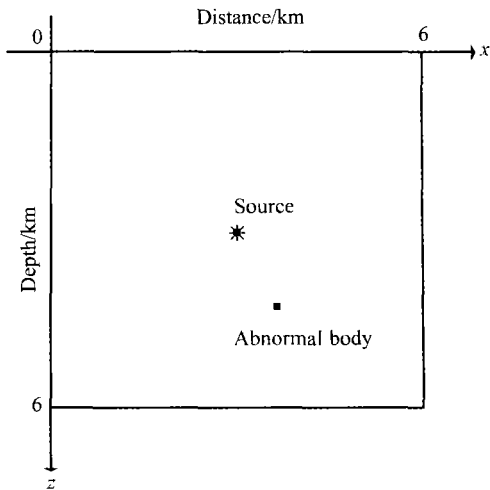


图 10 异常体模型, 计算区域为 $0 \leq x \leq 6$ km, $0 \leq z \leq 6$ km, 震源位于模型中心点 (3 km, 3 km), 模型中的黑色方块区域是一个高速异常体, 位于点 (3.4 km, 4.2 km) 处, 为边长 14.4 m 的正方形, 背景区域波速为 4.0 km/s, 异常体内波速为 5.2 km/s

Fig. 10 Geometry of the abnormal body model with a computational domain $0 \leq x \leq 6$ km, $0 \leq z \leq 6$ km. The source is located at the center of the computational domain. The square black domain with the edge of 14.4 m is a special area with high acoustic velocity and its center is located at this point (3.4 km, 4.2 km). The wave velocity in the background area and the abnormal body is 4.0 km/s and 5.2 km/s, respectively

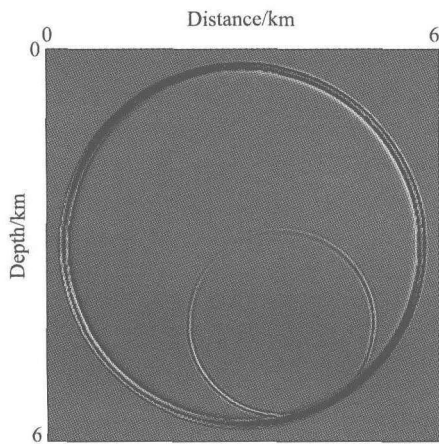


图 11 对于异常体模型, 在空间步长 $\Delta x = \Delta z = 10$ m, 时间步长 $\Delta t = 0.75$ ms 条件下, 由 NSPRK 方法计算得到的 $T = 0.7$ s 时刻瞬时声波快照

Fig. 11 The snapshot of acoustic wave fields at time $T = 0.7$ sec on the spatial increment $\Delta x = \Delta z = 10$ m and time increment $\Delta t = 0.75$ ms for the abnormal body model, generated by the NSPRK

阶精度, 数值计算误差小于同阶的交错网格方法, 也小于传统 SPRK 辛方法的计算误差。

NSPRK 辛方法具有与 Yang 等人发展的一类近似解析离散化方法^[9,13~15]相一致的特征, 即同时实现了位移、粒子速度及其空间梯度的计算, 即使是在空间采样率较低(每个波长 4 个网格点左右)的情况下, 也能有效地消除数值频散, 而传统的同阶 SPRK 辛方法或高阶 LWC 方法则必须达到每个波长具有 8 至 9 个的网格点数方可消除数值频散。另一方面, 由于本文的 NSPRK 辛格式是通过局部插值函数的外推方法来获得高阶空间偏导数近似值的, 所以 NSPRK 方法所使用的差分算子具有局部性。例如, 对于二维情况, 当计算 (i, j) 点处的高阶偏导数值时, 仅需要 (i, j) 相邻的周围 8 个点的信息即可获取空间高阶偏导数的近似计算公式(见附录中的(A1)~(A6)), 且可达到四阶精度, 而传统的有限差分格式则难以做到这一点。例如, 具有四阶精度的 LWC 方法需要 (i, j) 周围 20 个点的信息才能获得四阶精度。NSPRK 辛方法所具有的局部性质有利于计算边界的处理和并行效率的提高。同时, NSPRK 方法中局部差分算子的使用与地下介质中质点振动的局部性特征更为一致。

另外, 本文给出了 NSPRK 辛方法在一维和二维情况下的稳定性条件, 分析了 SPRK 方法和 NSPRK 方法在一维情况下的数值频散关系。结果表明, 本文提出的 NSPRK 方法即使在空间步长很大, 即一个波长仅有 2 个空间网格点时, 其最大频散误差也不超过 10%, 而此时, 传统的 SPRK 辛方法的最大频散误差达到了 15.4%, 这表明本文所提出的 NSPRK 辛方法比传统 SPRK 辛方法具有更小的数值频散。因此, 这种新的 NSPRK 方法比其他方法具有更快的计算速度和更小的计算机存储要求。数值实验表明, 这种 NSPRK 辛方法的计算速度是传统 SPRK 辛方法的约 21.7 倍, 是四阶 LWC 方法的约 10.9 倍; 而 NSPRK 方法的存储需求仅分别为 SPRK 方法的 64.9% 和四阶 LWC 方法的 55.3%。

附录 二维空间离散化近似计算公式

为了计算哈密顿系统(8)中的高阶空间偏导数, 与一类 NADM^[9,11~13]方法的处理方式一样, 引入如下插值函数:

$$G(\Delta x, \Delta z) = \sum_{r=0}^5 \frac{1}{r!} \left(\Delta x \frac{\partial}{\partial x} + \Delta z \frac{\partial}{\partial z} \right)^r u,$$

其中 $\Delta x, \Delta z$ 分别是空间 x 和 z 方向的网格步长, u 为位移函数。通过上述插值函数, 使用外推方法即可获得包含于方程(8)中高阶空间偏导数的近似计算

公式. 为方便起见, 这里列出本文中所使用的这些高阶偏导数的近似计算公式^[9]:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i,j}^n = \frac{2}{\Delta x^2} (u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n) - \frac{1}{2\Delta x} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i+1,j}^n - \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i-1,j}^n \right], \quad (\text{A1})$$

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right)_{i,j}^n = \frac{2}{\Delta z^2} (u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n) - \frac{1}{2\Delta z} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{i,j+1}^n - \left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{i,j-1}^n \right], \quad (\text{A2})$$

$$\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_{i,j}^n = \frac{15}{2\Delta x^3} (u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n) - \frac{3}{2\Delta x^2} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i+1,j}^n + 8\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j}^n + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i-1,j}^n \right], \quad (\text{A3})$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial z}\right)_{i,j}^n &= \frac{1}{2\Delta x \Delta z} \left[-\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i+1,j+1}^n - \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i-1,j-1}^n + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j+1}^n + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j-1}^n - 2\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i+1,j}^n + 4\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j}^n \right. \\ &\quad \left. - 2\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i-1,j}^n \right] + \frac{1}{(\Delta x)^2} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{i,j+1}^n - 2\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{i,j}^n + \left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{i,j-1}^n \right] \\ &\quad + \frac{1}{4(\Delta x)^2 \Delta z} [5u_{i+1,j+1}^n - 5u_{i-1,j-1}^n - u_{i+1,j-1}^n + u_{i-1,j+1}^n - 4u_{i,j+1}^n + 4u_{i,j-1}^n - 6u_{i+1,j}^n + 6u_{i-1,j}^n], \end{aligned} \quad (\text{A4})$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x \partial z^2}\right)_{i,j}^n &= \frac{1}{2\Delta x \Delta z} \left[-\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{i+1,j+1}^n - \left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{i-1,j-1}^n + \left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{i,j+1}^n + \left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{i,j-1}^n - 2\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{i+1,j}^n + 4\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{i,j}^n \right. \\ &\quad \left. - 2\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{i-1,j}^n \right] + \frac{1}{(\Delta z)^2} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j+1}^n - 2\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j}^n + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j-1}^n \right] \\ &\quad + \frac{1}{4\Delta x (\Delta z)^2} [5u_{i+1,j+1}^n - 5u_{i-1,j-1}^n - u_{i+1,j-1}^n + u_{i-1,j+1}^n - 4u_{i+1,j}^n + 4u_{i-1,j}^n - 6u_{i,j+1}^n + 6u_{i,j-1}^n], \end{aligned} \quad (\text{A5})$$

$$\left(\frac{\partial^3 u}{\partial z^3}\right)_{i,j}^n = \frac{15}{2\Delta z^3} (u_{i,j+1}^n - u_{i,j-1}^n) - \frac{3}{2\Delta z^2} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{i,j+1}^n + 8\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{i,j}^n + \left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{i,j-1}^n \right]. \quad (\text{A6})$$

用 v (v 为粒子速度) 代替上述公式中的 u , 即可得到关于 v 的高阶空间偏导数的近似公式, 此处略去。

参考文献 (References)

- [1] Kelly K R, Wave R W, Treitel S. Synthetic seismograms: a finite-difference approach. *Geophysics*, 1976, **41**: 2~27
- [2] Dablain M A. The application of high-order differencing to the scalar wave equation. *Geophysics*, 1986, **51**: 54~66
- [3] 董良国, 马在田, 曹景忠等. 一阶弹性波方程交错网格高阶差分法. *地球物理学报*, 2000, **43**(3): 411~419
Dong L G, Ma Z T, Cao J Z, et al. A staggered-grid high-order difference method of one-order elastic wave equation. *Chinese J. Geophys.* (in Chinese), 2000, **43**(3): 411~419
- [4] Komatitsch D, Vilotte J P. The spectral element method: an efficient tool to simulate the seismic responses of 2D and 3D geological structures. *Bull. Seism. Soc. Am.*, 1998, **88**: 368~392
- [5] Chen K H. Propagating numerical model of elastic wave in anisotropic in homogeneous media-finite element method. *Symposium of 54th SEG*, 1984, **54**: 631~632
- [6] Cervený V, Fírbas P. Numerical modeling and inversion of travel-time seismic body waves in inhomogeneous anisotropic media. *Geophys. J. R. Astr. Soc.*, 1984, **76**: 41~51
- [7] Yang D H, Song G J, Lu M. Optimally accurate nearly analytic discrete scheme for wave-field simulation in 3D anisotropic media. *Bull. Seism. Soc. Am.*, 2007, **97**(5): 1557~1569
- [8] Fei T, Larner K. Elimination of numerical dispersion in finite difference modeling and migration by flux-corrected transport. *Geophysics*, 1995, **60**: 1830~1842
- [9] Yang D H, Teng J W, Zhang Z J, et al. A nearly-analytic discrete method for acoustic and elastic wave equations in anisotropic media. *Bull. Seism. Soc. Am.*, 2003, **93**(2): 882~890
- [10] Zhang Z J, Wang G J, Harris J M. Multi-component wave-field simulation in viscous extensively dilatancy anisotropic media. *Phys. Earth Planet. Inter.*, 1999, **114**: 25~38
- [11] Zheng H S, Zhang Z J, Liu E. Non-linear seismic wave propagation in anisotropic media using flux-corrected transport technique. *Geophys. J. Int.*, 2006, **165**: 943~956
- [12] Kondoh Y, Hosaka Y, Ishii K. Kernel optimum nearly-analytical discretization algorithm applied to parabolic and hyperbolic equations. *Computers Math. Appl.*, 1994, **27**(3): 59~90
- [13] Yang D H, Peng J M, Lu M, et al. Optimal nearly analytic discrete approximation to the scalar wave equation. *Bull. Seism. Soc. Am.*, 2006, **96**(3): 1114~1130
- [14] Yang D H, Song G J, Chen S, et al. An improved nearly analytical discrete method: an efficient tool to simulate the seismic response of 2-D porous structures. *J. Geophys.*

- Eng. , 2007, **4**: 40~52
- [15] 王 磊,杨顶辉,邓小英. 非均匀介质中地震波应力场的 WNAD 方法及其数值模拟. 地球物理学报, 2009, **52**(6): 1526~1535
Wang L, Yang D H, Deng X Y. A WNAD method for seismic stress-field modeling in heterogeneous media. *Chinese J. Geophys.* (in Chinese), 2009, **52**(6): 1526~1535
- [16] Yang D H, Wang N, Chen S, Song G J. An explicit method based on the implicit Runge-Kutta algorithm for solving the wave equations. *Bull. Seism. Soc. Am.*, 2009, **99**(6): 3340~3354
- [17] 罗明秋,刘 洪,李幼铭. 地震波传播的哈密顿表述及辛几何算法. 地球物理学报, 2001, **44**(1): 120~127
Luo M Q, Liu H, Li Y M. Hamiltonian description and symplectic method of seismic wave propagation. *Chinese J. Geophys.* (in Chinese), 2001, **44**(1): 120~127
- [18] 冯 康,秦孟兆. 哈密顿系统的辛几何算法. 杭州:浙江科学技术出版社, 2003. 185~206, 271~278
Feng K, Qin M Z. Symplectic Geometric Algorithms for Hamiltonian Systems (in Chinese). Hangzhou: Zhejiang Science & Technology Press, 2003. 185~206, 271~278
- [19] Ruth R D. A canonical integration technique. *IEEE Trans. Nucl. Sci.* 1983, NS-30, No. 4: 2669~2671
- [20] 曾文平,孔令华. 辛算法的发展历史与现状. 华侨大学学报(自然科学版), 2004, **25**(2): 113~117
Zeng W P, Kong L H. History and present state of symplectic algorithm. *J. Huaqiao Univ. (Nat. Sci.)* (in Chinese), 2004, **25**(2): 113~117
- [21] 孙 耿. 波动方程的一类显式辛格式. 计算数学, 1997, **1**: 1~10
Sun G. A class of explicitly symplectic schemes for wave equations. *Comput. Math.* (in Chinese), 1997, **1**: 1~10
- [22] Qin M Z, Zhang M Q. Multi-stage symplectic schemes of two kinds of Hamiltonian systems for wave equations. *Computers Math. Applic.*, 1990, **19**: 51~62
- [23] Yang D H, Wang S Q, Zhang Z J, et al. N-times absorbing boundary conditions for compact finite-difference modeling of acoustic and elastic wave propagation in the 2D TI medium. *Bull. Seism. Soc. Am.*, 2003, **93**(6): 2389~2401

(本文编辑 何 燕)