

贺茜君, 杨顶辉, 仇楚钧等. 2021. 基于非结构网格求解三维 D'Alembert 介质中声波方程的并行加权 Runge-Kutta 间断有限元方法. 地球物理学报, 64(3):876-895, doi:10.6038/cjg202100226.

He X J, Yang D H, Qiu C J, et al. 2021. A parallel weighted Runge-Kutta discontinuous galerkin method for solving acoustic wave equations in 3D D'Alembert media on unstructured meshes. *Chinese J. Geophys.* (in Chinese), 64(3):876-895, doi:10.6038/cjg202100226.

基于非结构网格求解三维 D'Alembert 介质中声波方程的并行加权 Runge-Kutta 间断有限元方法

贺茜君¹, 杨顶辉^{2*}, 仇楚钧², 周艳杰¹, 常芸凡²

1 北京工商大学数学与统计学院, 北京 100048

2 清华大学数学科学系, 北京 100084

摘要 间断有限元方法(Discontinuous Galerkin method, 简称 DGM)在求解地震波动方程时具有低数值频散、网格剖分灵活等优点, 因此, 为适应数值模拟对模拟精度和复杂地质结构的要求, 本文提出一种新的加权 Runge-Kutta 间断有限元(weighted Runge-Kutta discontinuous Galerkin, 简称 WRKDG)方法, 用于求解三维 D'Alembert 介质中声波方程. 本文不仅详细推导了其数值格式, 特别地, 根据常微分方程理论给出了满足数值稳定性条件的一般经验公式, 并首次对该方法的数值频散和耗散进行了深入分析, 且考虑了耗散参数对结果的影响. 同时, 我们也对该方法进行了精度测试, 并分析了 3D 情形下 WRKDG 方法的并行加速比, 结果表明 3D WRKDG 方法具有良好的并行性. 最后, 我们给出了包含均匀模型、非规则几何模型以及非均匀 Marmousi 模型在内的数值模拟算例. 结果表明, 该方法不仅计算准确, 能与解析解很好地吻合, 且能有效模拟包含球体在内的非规则模型及非均匀 Marmousi 模型中的衰减声波波场. 数值模拟实验进一步验证了 WRKDG 方法在求解三维 D'Alembert 介质中声波方程时的正确性和有效性, 并获得了对于这种强衰减介质中波传播特征的规律性新认识.

关键词 间断有限元方法; 三维; 数值频散; D'Alembert 介质; 并行效率; 强衰减

doi:10.6038/cjg202100226

中图分类号 P315, P631

收稿日期 2020-06-17, 2020-12-29 收修定稿

A parallel weighted Runge-Kutta discontinuous galerkin method for solving acoustic wave equations in 3D D'Alembert media on unstructured meshes

HE XiJun¹, YANG DingHui^{2*}, QIU ChuJun², ZHOU YanJie¹, CHANG YunFan²

1 School of Mathematics and Statistics, Beijing Technology and Business University (BTBU), Beijing 100048, China

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

Abstract Discontinuous Galerkin method (DGM) is a widely used numerical algorithm. It has the advantages of high accuracy, flexibility in dealing with boundary conditions, easy parallelism, and small numerical dispersion when solving seismic wave equations. In order to satisfy the numerical simulation for accuracy and complex geological structures, in this paper, we suggest a weighted Runge-Kutta discontinuous Galerkin (WRKDG) method for solving the acoustic wave equation in three-dimensional (3D) medium with strong attenuation—D'Alembert medium on unstructured meshes. The numerical scheme is derived in detail, and the general numerical

基金项目 本研究得到国家自然科学基金面上基金(41974114)及国家自然科学基金(地震联合基金)项目(U1839206)的联合资助.

第一作者简介 贺茜君, 女, 1988 年生, 副教授, 主要研究方向为地震波动方程的数值方法及波场模拟. E-mail: hexijun111@sina.com

*** 通讯作者** 杨顶辉, 教授, 主要从事计算地球物理、孔隙介质波传播理论、地震层析成像等研究. E-mail: ydh@mail.tsinghua.edu.cn

stability conditions are presented based on the theory of ordinary differential equations. The numerical dispersion and dissipation of WRKDG method are also investigated for the first time, including the influence of dissipation parameters on the analysis results. In addition, we carry out a convergence test of this method, and analyze the parallel speedup ratio of the WRKDG method in 3D case. The results show that the 3D WRKDG method has good parallel capabilities. Finally, we present several numerical examples in complex media with strong attenuation, including an homogeneous model, an irregular geometric model, and the heterogeneous Marmousi model. The results show that the method is not only accurate and in good agreement with the analytical solution, but also can effectively simulate the acoustic wave field in irregular model including sphere and heterogeneous Marmousi model. Finally, we present several numerical examples. Numerical results further verify the correctness and effectiveness of the 3D WRKDG method in solving the scalar wave equation in D'Alembert medium, and they clearly show the wave propagation characteristics of this strong attenuation medium.

Keywords Discontinuous Galerkin method; three-dimensional; numerical dispersion; D'Alembert medium; parallel computing; strong attenuation

0 引言

基于地震波动方程的正演是计算地球物理学的重要研究内容,它不仅能为我们提供精确的波场模拟结果,而且也是基于波动方程的地震勘探和地震学的重要基础(牟永光和裴正林, 2005). 在最近几十年里,随着计算机能力的快速提升,涌现了许许多多优秀的数值算法,例如有限差分法(Finite difference method, 简称 FDM)、有限元法(Finite element method, 简称 FEM)、伪谱法(Pseudo-spectral method, 简称 PSM)、谱元法(Spectral element method, 简称 SEM)、间断有限元法(Discontinuous Galerkin method, 简称 DGM)等. 这些算法均能满足我们对于数值算法的部分要求,它们也有其独特的优势. 对于数值求解 3D 波动方程来说,这些算法都得到了广泛应用. FDM 编程简单、计算速度快,且存储量小,是求解 3D 波动方程最为常用的一种数值算法(e. g., 董良国等, 2000; Moczo et al., 2000, 2002; Zhang and Liu, 2002; Kristek and Moczo, 2003; 牟永光和裴正林, 2005; Yang et al., 2007; 张金海等, 2007; Zhang and Gao, 2009, Liu and Sen, 2009; Yang and Wang, 2010; Zhang et al., 2012; Igel, 2017; Shragge and Tapley, 2017; Wang et al., 2019a, 2019b). FEM 最早由 Feng(1965)和西方学者独立提出,它能处理复杂区域和边界条件,在求解 3D 波动方程也得到了应用(Galis et al., 2008; Moczo et al.,

2011; Igel, 2017),但是由于其计算量大且并行性差,作为单一方法用于求解波传播问题已不多见,它常与有限差分方法结合形成的混合方法(e. g., Ma et al., 2004; Galis et al., 2008). PSM 利用快速傅里叶变换(Fast Fourier transform, 简称 FFT)来处理全部波场中的空间导数,精度很高,且数值频散小,在求解波动方程领域也得到了广泛应用(Furumura et al., 1998; Igel, 1999; Klin et al., 2010; Carcione et al., 2018),但是 3D 情形的 PSM 需要利用全局数据进行 FFT,因此并行性较差(Pelz, 1991). SEM 是计算地球物理领域近十年来发展最为迅速的数值算法,它具有 FEM 的基本特征,在单元内部的基函数基于特定积分节点——Gauss-Lobatto-Legendre (GLL)点,因此在使用 GLL 积分准则的情况下质量矩阵是对角阵,SEM 的这种处理不仅使得方法的精度提高,而且并行性好,在 3D 石油勘探领域及大尺度模拟方面都有很好的表现(e. g., Komatitsch and Vilotte, 1998; Komatitsch and Tromp, 1999; Komatitsch et al., 1999; Tromp et al., 2008; Liu et al., 2017).

DGM 也是近十年来迅速发展起来的一种数值算法,它最早是由 Reed 和 Hill(1973)在求解中子输运方程时提出,其后,经过 Cockburn and Shu (1989, 2001),Rivière 和 Wheeler(2003)等人的不断发展,以基于数值通量的龙格-库塔间断有限元方法(Runge-Kutta discontinuous Galerkin method, 简称 RKDG)及基于内部罚函数的间断有限元方法(Interior penalty discontinuous Galerkin method,

简称 IP DGM)为代表的一系列 DGM 方法被提出,在计算流体力学、计算热力学、计算电磁学、计算地球物理等领域得到了广泛应用(e. g., Li, 2006; Hesthaven and Warburton, 2008; Rivière, 2008; 张铁, 2015; 孟雄等, 2015). 间断有限元方法是传统有限元方法的一种推广,它最主要的特征是未知量以及基函数是在每个网格单元上独立定义的,在其它网格单元上取值为 0,这种定义使得它具有许多良好的性质. 相对于 FDM,它的网格剖分灵活使得它可以处理任意复杂边界;相对于 FEM,它可以使用任意阶基函数从而可以达到任意阶精度,避免了 FEM 在高阶格式上构造的困难,且具有良好的并行性;相对于 SEM,它可以采用更灵活的网格剖分——非相容(non-conforming)网格. 特别地, DGM 允许变量在单元之间存在间断,因而特别适合模拟强地面运动问题,它不仅能适应非平面断层及速度反差较大的介质,而且能有效避免滑移率时间序列中存在的虚假高频振荡的影响(De La Puente et al., 2009; Pelties et al., 2012). 另外, DGM 引入的数值频散较小,且可以采用非均匀网格,因而特别适用于大尺度非均匀介质中的波场模拟. DGM 的质量和刚度矩阵可以提前计算并存储,因此在实际计算过程中不需要计算质量矩阵和刚度矩阵,这种无积分(quadrature-free)的技巧使得计算量大为减少(Atkins and Shu, 1998). 然而,尽管 DGM 可以采用无积分技巧,但是其计算量和存储量相对于 FEM 及 SEM 还是大很多,这是由于 DGM 引入了较多的自由度从而导致存储量增大,而且相比于 FEM 及 SEM 来说, DGM 需要更小的时间步长才能保持格式稳定(de Basabe et al., 2008),进一步导致了计算量的增大.

DGMs 在计算地球物理领域得到了广泛应用. 其中应用最为广泛的是由 Käser and Dumbser (2006)提出的任意阶导数的时间推进间断有限元方法(arbitrary high-order derivatives time stepping discontinuous Galerkin method, 简称 ADER-DGM),这种方法基于迎风数值通量,采用具有任意阶精度的 Lax-Wendroff 时间推进方式,从而使得时间精度和空间精度均能达到任意阶精度. ADER-DGM 及其衍生方法已被成功用于数值求解 3D 弹性、粘弹性、孔隙介质、流固耦合等模型的波传播问题及地震断层破裂数值模拟中(Dumbser and Käser, 2006; Dumbser et al., 2007; Käser and Dumbser, 2008; De La Puente et al., 2007, 2008). 此外,也涌现了

许多基于其它形式的 3D DGMs 用于求解非均匀介质、粘弹性介质、声波-弹性波界面等复杂介质的波传播模拟及偏移成像问题(Wilcox et al., 2010; Lähivaara and Huttunen, 2010; Etienne et al., 2010; Pelties et al., 2012; Minisini et al., 2013; Mu et al., 2013a, 2013b; Mulder et al., 2014; Ferroni et al., 2017; Ye et al., 2016; Lambrecht et al., 2017; Geevers et al., 2018). 由于基于通量函数的 DGM 主要针对于求解双曲方程,因此在求解地震波方程领域使用更为广泛,本研究也主要基于数值通量形式的 DGM. 另外,本文中提到的 DGM 方法均指不带限制器的 DGM,因为地震波动方程大部分是线性方程,Cockburn 和 Shu(2001)指出当双曲系统为线性系统时,可以不加限制器,但是,如果考虑的是非线性方程或者解存在间断时,必须使用限制器或者特殊的数值通量才能保证数值格式的精度(Chabot et al., 2018),这已超出本文的研究范围,在此也不作讨论.

在国内研究方面,汪文帅等(2013)、廉西猛等(2013)、薛昭等(2014)、贺茜君等(2014)最早将 DGM 应用到求解波动方程,随后 He 等(2015)、Yang 等(2016)、Meng 等(2018)、张金波等(2018)、He 等(2019a, 2019b, 2020)、Zhang 等(2019)等将其应用到 2D 各种复杂情形的模拟和分析中. 对于 3D 情形,He 等(2020)已经开始着手研究和分析工作,他们将一种加权的 DGM 推广至 3D 各向异性介质中弹性波的传播,采用了 MPI 并行策略,但是使用的是 3D 规则的六面体单元. 本研究针对 3D 非结构网格,发展了求解 3D D' Alembert 介质中的并行 WRKDG 方法. D' Alembert 介质是一种粘弹性介质,它直接对运动方程加入粘性项来刻画粘性,因而具有简洁的表达式. Li 等(2015)、Cai 等(2017)、Lähivaara 和 Huttunen(2010)等人对这种介质进行了数值模拟研究,本文的研究也是基于此. 另外,我们对并行算法的设计及编程也给出了较为详细的分析. 特别地,我们根据常微分方程理论推导了 3D D' Alembert 介质中满足数值稳定性条件的一般经验公式. 同时,由于针对基于数值通量的 DGM,目前还没有相关的数值稳定性和数值频散、耗散的分析结果,因此本文首次对该方法的数值频散和耗散进行了详细的研究,且考虑了耗散参数对结果的影响. 最后,我们给出了包含均匀模型、非规则几何模型以及非均匀 Marmousi 模型在内的数值模拟算例以说明方法的有效性.

1 WRKDG 方法

1.1 空间离散

我们考虑 3D D'Alembert 介质中声波方程(牛滨华和孙春岩, 2007; Lähivaara and Huttunen, 2010):

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + r \frac{\partial u}{\partial t} = c^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + f(t), \quad (1)$$

其中 u 是位移场, c 是声波速度, $f(t)$ 是源项, $r > 0$ 是 D'Alembert 介质中引入的耗散参数. 参数 r 与频率 ω 有如下关系式(牛滨华和孙春岩, 2007):

$$\frac{1}{Q^2} = 2 \left(\sqrt{1 + \left(\frac{r}{\omega} \right)^2} - 1 \right),$$

其中, Q 为 D'Alembert 介质纵波的品质因子. 当 $r/\omega \ll 1$ 时, 我们有 $r \approx \omega Q^{-1}$. 设 3D 求解区域为 Ω . 我们将区域 Ω 划分为不重叠的子区域 $\{\Omega_i\}$. 由于本文主要研究非结构网格, 因此主要采取四面体网格剖分. 需要指出的是, 为方便起见, 本文仅考虑相容网格的情况, 也就是不允许有“悬点”的存在.

DGM 基于 Galerkin 近似, 所以我们首先需选取试验函数空间. 我们使用的试验函数空间是多项式空间 $V_h = \{v \in L^1(\Omega) : v|_{\Omega_i} \in P^\kappa(\Omega_i)\}$, 其中 $P^\kappa(\Omega_i)$ 表示区域 Ω_i 上次数不超过 κ 次的多项式. 从定义中可以看出, 测试函数 v 在 Ω_i 以外的区域上不定义或者令其为 0, 因此, 它不必在整个区域上连续, 可以在子区域 $\{\Omega_i\}$ 之间有间断, 这也是间断有限元与传统有限元最大的区别.

为了将方程(1)改写成一阶双曲系统的形式, 我们引入三个变量 p, q 和 s , 且 p, q, s 满足条件 $p_t = u_x, q_t = u_y, s_t = u_z$, 其中 u_x, u_y 和 u_z 分别表示位移 u 对空间变量 x, y 和 z 的偏导数. 则方程(1)经过一次时间积分后, 可改写成如下形式:

$$\begin{cases} p_t = u_x, \\ q_t = u_y, \\ s_t = u_z, \\ u_t + ru = c^2(p_x + q_y + s_z) + \tilde{f}(t), \end{cases} \quad (2)$$

即:

$$\begin{pmatrix} u \\ p \\ q \\ s \end{pmatrix}_t + \begin{pmatrix} ru & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} -c^2 p & -c^2 q & -c^2 s \\ -u & 0 & 0 \\ 0 & -u & 0 \\ 0 & 0 & -u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{f}(t) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

其中 $\nabla = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)$. 如果我们引入如下记号:

$$\mathbf{u} = (u, p, q, s)^T, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} r & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} -c^2 p & -c^2 q & -c^2 s \\ -u & 0 & 0 \\ 0 & -u & 0 \\ 0 & 0 & -u \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{pmatrix} \tilde{f}(t) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

则可以将 3D D'Alembert 介质中声波方程化成适用于用 DGM 求解的如下形式:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{B}\mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{u}) = \mathbf{f}, \quad (5)$$

其中 $\mathbf{F}(\mathbf{u})$ 表示通量, $\mathbf{B}$ 表示耗散项, 当 $\mathbf{B} = 0$ 时表示无耗散, 方程(5)退化为普通的声波方程. 需要指出的是, 本文发展的方法也适用于一阶速度-应力方程. 在(5)式两边同乘以试验函数 v , 并在子区域 Ω_i 上积分, 利用格林公式, 我们得到

$$\iiint_{\Omega_i} \left[v \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + v \mathbf{B}\mathbf{u} - \mathbf{F}(\mathbf{u}) \cdot \nabla v \right] dV + \iint_{\partial\Omega_i} v \mathbf{F}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} dS = \iiint_{\Omega_i} v \mathbf{f} dV, \quad (6)$$

其中 $\partial\Omega_i$ 表示区域 Ω_i 的边界, $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)^T$ 表示边界 $\partial\Omega_i$ 处的单位外法向量. 由于 $\mathbf{u}$ 在 $\partial\Omega_i$ 处有可能间断, 所以(6)式中的 $\mathbf{F}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{n}$ 没有定义, 我们将 $\mathbf{F}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{n}$ 替换为数值通量: $\mathbf{F}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{n}|_{\partial\Omega_i} = \hat{\mathbf{F}}(\mathbf{u}^{\text{int}}, \mathbf{u}^{\text{ext}}, \mathbf{n})$, 其中 $\mathbf{u}^{\text{int}}$ 表示 $\mathbf{u}$ 在区域 Ω_i 内部逼近 $\partial\Omega_i$ 处的值, $\mathbf{u}^{\text{ext}}$ 表示 $\mathbf{u}$ 在区域 Ω_i 外部逼近 $\partial\Omega_i$ 处的值. 这里我们采用一种常用通量, 即 Local Lax-Friedrichs (LLF) 通量 (Cockburn and Shu, 1989, 2001), 其表达式为

$$\hat{\mathbf{F}}(\mathbf{u}^{\text{int}}, \mathbf{u}^{\text{ext}}, \mathbf{n}) = \frac{1}{2} (\mathbf{F}(\mathbf{u}^{\text{int}}) + \mathbf{F}(\mathbf{u}^{\text{ext}})) \cdot \mathbf{n} - \frac{C_{\partial\Omega_i}}{2} (\mathbf{u}^{\text{ext}} - \mathbf{u}^{\text{int}}), \quad (7)$$

其中 $C_{\partial\Omega_i}$ 取 $\frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{u}^{\text{int}})}{\partial \mathbf{u}} \cdot \mathbf{n}$ 和 $\frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{u}^{\text{ext}})}{\partial \mathbf{u}} \cdot \mathbf{n}$ 的绝对值最大的特征值, 通常情况下可取相邻两个单元的最大速度. 将数值通量(7)代入方程(6), 我们得到 DGM 方法的弱形式:

$$\iiint_{\Omega_i} \left[v \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + v \mathbf{B}\mathbf{u} - \mathbf{F}(\mathbf{u}) \cdot \nabla v \right] dV + \iint_{\partial\Omega_i} v \hat{\mathbf{F}}(\mathbf{u}^{\text{int}}, \mathbf{u}^{\text{ext}}, \mathbf{n}) dS = \iiint_{\Omega_i} v \mathbf{f} dV. \quad (8)$$

在上式中, 由于我们考虑的是线性问题, 不妨将通量 $\mathbf{F}(\mathbf{u})$ 写成 $\mathbf{F}(\mathbf{u}) = (\mathbf{A}_1 \mathbf{u}, \mathbf{A}_2 \mathbf{u}, \mathbf{A}_3 \mathbf{u})$ 的形式 (Dumbser

and Käser, 2006), 其中

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1 &= \begin{pmatrix} 0 & -c^2 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{A}_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -c^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{A}_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -c^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{9}$$

由此我们可将数值通量 $\hat{\mathbf{F}}(\mathbf{u}^{\text{int}}, \mathbf{u}^{\text{ext}}, \mathbf{n})$ 写成下列形式:

$$\hat{\mathbf{F}}(\mathbf{u}^{\text{int}}, \mathbf{u}^{\text{ext}}, \mathbf{n}) = \hat{\mathbf{A}}^{\text{int}} \mathbf{u}^{\text{int}} + \hat{\mathbf{A}}^{\text{ext}} \mathbf{u}^{\text{ext}}, \tag{10}$$

其中,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}^{\text{int}} &= \frac{1}{2}(\mathbf{A}_1 n_1 + \mathbf{A}_2 n_2 + \mathbf{A}_3 n_3 + C_{\mathcal{A}\mathcal{I}} \mathbf{I}), \\ \hat{\mathbf{A}}^{\text{ext}} &= \frac{1}{2}(\mathbf{A}_1 n_1 + \mathbf{A}_2 n_2 + \mathbf{A}_3 n - C_{\mathcal{A}\mathcal{I}} \mathbf{I}). \end{aligned} \tag{12}$$

$\mathbf{I}$ 表示单位矩阵. 令 $\mathbf{u}$ 具有如下的基函数展开形式:

$$\mathbf{u}|_{\Omega_i}(\mathbf{x}, t) = \sum_{l=0}^{N-1} \mathbf{C}_l^i(t) \mathbf{w}_l^i(\mathbf{x}), \tag{12}$$

$$\begin{aligned} &\sum_{l=1}^N \frac{\partial C_l^i(t)}{\partial t} \iiint_{\Omega_i} w_l^i w_{l'}^i dV + \sum_{l=1}^N BC_l^i(t) \iiint_{\Omega_i} w_l^i w_{l'}^i dV - \sum_{l=1}^N A_1 C_l^i(t) \iiint_{\Omega_i} w_l^i \frac{\partial w_{l'}^i}{\partial x} dV - \sum_{l=1}^N A_2 C_l^i(t) \iiint_{\Omega_i} w_l^i \frac{\partial w_{l'}^i}{\partial y} dV \\ &- \sum_{l=1}^N A_3 C_l^i(t) \iiint_{\Omega_i} w_l^i \frac{\partial w_{l'}^i}{\partial z} dV + \sum_{l=1}^N \sum_{j=1}^4 \hat{A}^{\text{int}} C_l^i(t) \iint_{\Omega_i \cap \Omega_j} w_l^i w_{l'}^i dS + \sum_{l=1}^N \sum_{j=1}^4 \hat{A}^{\text{ext}} C_l^i(t) \iint_{\Omega_i \cap \Omega_j} w_l^i w_{l'}^i dS = \iiint_{\Omega_i} f w_{l'}^i dV \\ &l' = 1, \dots, N. \end{aligned} \tag{13}$$

本研究中采用的是无积分(quadrature-free)的 DGM(Atkins and Shu, 1998), 因此只需提前计算好参考单元上的所有质量矩阵和刚度矩阵. 我们选取如图 1 中所示的参考单元(Dumbser and Käser, 2006), 且假设参考单元内的坐标轴三分量为: ξ, η 和 ζ . 对于任意四面体单元, 均将之通过坐标变换到如图 1 所示的参考单元, 图 1a 中的顶点与图 1b 中的顶点严格对应, 具体的变换过程可参考附录 A. 我们仿照 Dumbser 和 Käser(2006)的流程计算所有的体质量矩阵和刚度矩阵, 以及面与面之间关联的质量矩阵. 具体的过程可参考附录 A.

1.2 时间离散

经过上述空间离散之后, 我们得到半离散化的

其中 $w_l^i(\mathbf{x})$ 表示 Ω_i 内的基函数, $\mathbf{C}_l^i(t)$ 表示 Ω_i 内的未知系数向量, N 表示基函数的个数. 一般来说, 基函数有两大类(de Basabe et al., 2008), 其中一类是 modal 型, 另一类是 nodal 型. modal 型的基函数只要求基函数能生成测试函数空间, 不需要在网格节点上定义; nodal 型基函数一般采用在一些特定节点上(一般是 Gauss 型积分节点)定义的 Lagrange 基函数. 一般说来, 只要数值积分的精度能得到保证, 选什么类型的基函数并不影响数值结果, 尤其是本文采用的是无积分(quadrature-free)的 DGM(Atkins and Shu, 1998), 只需要提前计算好参考单元上的所有质量矩阵和刚度矩阵, 在计算过程中不需要再计算质量矩阵等其他矩阵, 所以只需要保证参考单元上的积分是正确的即可. 例如, 我们可以采用 3D 情形下的参考单元内有序完备(order-complete)的多项式 $\{x^\alpha y^\beta z^\chi | 0 \leq \alpha + \beta + \chi \leq \kappa\}$ (Rivière, 2008) 作为基函数, 该种基函数比较简单, 此时 $N = (\kappa + 1)(\kappa + 2)(\kappa + 3)/6$. 例如, 当 $\kappa = 1$, 即空间精度为 2 阶时, N 的值是 4, 我们称该方法为 2 阶 DGM; 当 $\kappa = 2$, 即空间精度为 3 阶时, N 的值是 10, 我们称该方法为 3 阶 DGM. 当然我们也可以选择正交的基函数, 可参考 De La Puente (2008) 中的附录部分.

将(12)和(10)式代入(8)式中, 我们可以得到如下半离散化的方程:

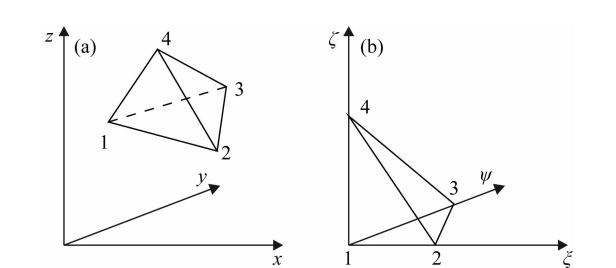


图 1 一般四面体单元变换到参考单元示意图(Dumbser andKäser, 2006), 其中参考单元内1、2、3和4这四个顶点的坐标分别是(0, 0, 0)、(1, 0, 0)、(0, 1, 0)和(0, 0, 1)
Fig. 1 Transformation from the general tetrahedron to the reference tetrahedron (Dumbser and Käser, 2006) with four vertices (0, 0, 0), (1, 0, 0), (0, 1, 0), and (0, 0, 1)

方程(13). 方程(13)是关于未知量 $\mathbf{C}_i^t(t)$ 的常微分方程,为了表述上的方便,我们令 $\mathbf{C}$ 表示所有单元上的未知量构成的向量,则方程(13)可以简写成下述形式:

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} = L(\mathbf{C}) + \bar{\mathbf{F}}, \tag{14}$$

其中 L 是方程(13)中与空间离散有关的线性算子, $\bar{\mathbf{F}}$ 是和震源相关的项. 关于求解方程(14)有许多时间离散格式,在此我们选取一种加权的 Runge-Kutta 格式(He et al., 2015; 张金波等, 2018)对方程(14)进行时间推进,其格式为

$$\begin{cases} \mathbf{K}^{(n)} = \eta \mathbf{K}_2^{(n)} + (1 - \eta) \mathbf{K}_1^{(n)}, \\ \bar{\mathbf{K}}^{(n)} = \eta \bar{\mathbf{K}}_2^{(n)} + (1 - \eta) \bar{\mathbf{K}}_1^{(n)}, \\ \mathbf{C}^{(n+1)} = \mathbf{C}^{(n)} + \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{K}^{(n)} + \bar{\mathbf{K}}^{(n)}), \end{cases} \tag{15}$$

其中 $\eta \in [0, 1]$ 是加权系数. 在下文中若无特殊说明,我们均取 $\eta = 0.5$ 进行计算. $\mathbf{K}_1^{(n)}$ 和 $\mathbf{K}_2^{(n)}$ 可以用如下公式计算:

$$\begin{cases} \mathbf{K}_0^{(n)} = L(\mathbf{C}^{(n)}), \\ \mathbf{K}_1^{(n)} = r \Delta t L(\mathbf{K}_0^{(n)}) + L(\mathbf{C}^{(n)}), \\ \mathbf{K}_2^{(n)} = r \Delta t L(\mathbf{K}_1^{(n)}) + L(\mathbf{C}^{(n)}), \end{cases} \tag{16}$$

其中 $r = (3 - \sqrt{3})/6$. 得到 $\mathbf{K}^{(n)}$ 的近似值之后,令 $\mathbf{T}^{(n)} = \mathbf{C}^{(n)} + (1 - 2r) \Delta t \mathbf{K}^{(n)}$, 按如下公式求得 $\bar{\mathbf{K}}_1^{(n)}$ 和 $\bar{\mathbf{K}}_2^{(n)}$:

$$\begin{cases} \mathbf{K}_0^{(n)} = L(\mathbf{T}^{(n)}), \\ \mathbf{K}_1^{(n)} = r \Delta t L(\mathbf{K}_0^{(n)}) + L(\mathbf{T}^{(n)}), \\ \mathbf{K}_2^{(n)} = r \Delta t L(\mathbf{K}_1^{(n)}) + L(\mathbf{T}^{(n)}), \end{cases} \tag{17}$$

将如上所得的 $\mathbf{K}_1^{(n)}$ 、 $\mathbf{K}_2^{(n)}$ 、 $\bar{\mathbf{K}}_1^{(n)}$ 和 $\bar{\mathbf{K}}_2^{(n)}$ 代入方程(15)中,形成完整的时间推进格式. 相比于传统的 Runge-Kutta 时间离散格式,加权的 Runge-Kutta 格式能提高最大库朗数,从而使得计算的时间步长增大,迭代步数减小.

2 Von Neumann 分析

3D 情形下的数值稳定性、数值频散和耗散主要基于 Von Neumann 分析. 为此,假设一个简谐波传播经过 3D 区域,并假定此区域是均匀、无界区域,且方程右端为无源项. 我们主要考察四面体网格剖分,在如图 2a 中所示的规则六面体剖分的基础上(Mulder et al., 2014; Ferroni et al., 2017; He et al., 2020),在一个立方体单元内有 6 个四面体单元,如图 2b 所示,其中每个四面体及其面的顺序参

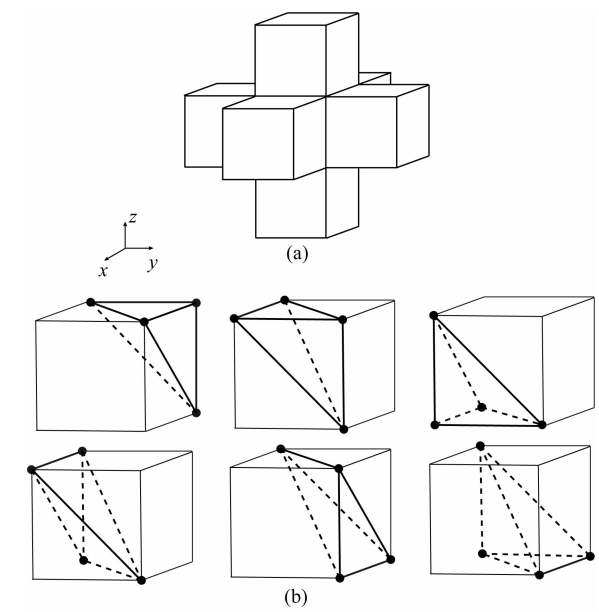


图2 Von Neumann 分析中用到的网格构型. 在(a)中所示的规则六面体剖分的基础上,每个六面体中有图(b)中所示六个四面体网格(Mulder et al., 2014)

Fig. 2 Grid configuration used in Von Neumann analysis. Based on the (a) regular hexahedral division, each hexahedron has (b) six tetrahedrons (Mulder et al., 2014)

考 Mulder 等(2014)编号. 我们假设如下平面简谐波在所考虑的区域内传播:

$$\mathbf{C}^{m,l}(t) = \mathbf{C}(t) \exp[i(k \sin \theta \cos \varphi n h + k \sin \theta \sin \varphi m h + k \cos \theta l h - i \omega t)], \tag{18}$$

其中 k 是波数, ω 是频率, h 是立方体的边长, θ 和 φ 决定了平面波的传播方向, $\theta \in [0, \pi]$ 表示波传播方向与 z 轴的夹角,而 $\varphi \in [0, 2\pi]$ 则表示波传播方向在 xy 平面内的投影与 x 轴的夹角. 将(18)式代入数值格式中,即可用于分析数值稳定性和数值频散及耗散.

2.1 数值稳定性分析

为了保持数值算法的稳定性,我们引入库朗数条件,也称 Courant-Friedrichs-Lewy(简称 CFL)条件: $\alpha = c \Delta t / h \leq \alpha_{\max}$,其中 α 是库朗数, $\alpha_{\max}$ 即是最大库朗数(也称 CFL 条件数). 不妨令 Δ 表示代入简谐波(18)之后的数值格式增长矩阵的特征值,则 Δ 与波数 k 、库朗数 α 、传播方向 θ 和 φ 有关. 要使得数值格式稳定,必须满足 $|\Delta| \leq 1$ 对所有的 $kh \in [0, 2\pi]$ 、 $\theta \in [0, \pi]$ 和 $\varphi \in [0, 2\pi]$ 都成立. 这在数学上可以用下面一个优化问题来表示:

$$\begin{aligned} & \max \alpha \\ & \text{s. t. } |\Delta(kh, \alpha, \theta, \varphi)| \leq 1 \text{ for } \forall kh \in [0, 2\pi], \\ & \theta \in [0, \pi] \text{ and } \varphi \in [0, 2\pi], \\ & \alpha \geq 0. \end{aligned} \tag{19}$$

上述求 α 的最大值问题是一个非线性优化问题,通常情况下不容易求出 $\alpha_{\max}$ 的解析表达式. 一般我们通过数值遍历算法来求其近似解,使 α 从 0 开始以小步长增长,直至 $|\Lambda(kh, \alpha, \theta, \varphi)| > 1$ 则跳出循环,获得 $\alpha_{\max}$ 的值.

在本文中,我们仅考虑基函数为 1、2 次多项式的情形,对应空间精度分别为 2、3 阶. 首先,我们考虑不带耗散的情形,即在方程(1)中 $r = 0$ 的情形. 通过数值求解上述非线性优化问题,我们得到当 $\eta = 0.5$ 时的 WRKDG 方法的最大库朗数 $\alpha_{\max}$: 对于 P^1 阶 WRKDG 方法, $c\Delta t/h \leq \alpha_{\max} \approx 0.244$; 对于 P^2 阶 WRKDG 方法, $c\Delta t/h \leq \alpha_{\max} \approx 0.144$.

以上分析给出的最大库朗数 $\alpha_{\max}$ 中所采用的网格步长 h 是图 2a 中立方体边长,若是采用图 2b 中四面体内切球体直径 d ,则此时的时间步长所需满足的条件是

$$\Delta t \leq \alpha_{\max} \frac{h}{c} \approx \frac{\alpha_{\max}}{0.3597} \frac{d}{c}, \tag{20}$$

其中因子 0.3597 是对应图 2 中,当立方体边长为 h 时,此时最小的四面体内切球体直径约为 $d \approx 0.3597h$.

对于带耗散情形,即方程(1)中 $r > 0$ 的情形,也可以根据(19)式中同样的流程进行分析,求出 3D D' Alembert 介质中的库朗数条件. 然而此时由于加入了耗散参数 r ,我们希望能得到一个包含 r 的显式的 $\alpha_{\max}$ 的表达式. 为此,在已知声波方程库朗数条件的基础上,我们进行如下分析.

我们首先注意到,经过空间离散之后形成的半离散系统(13)可以分解为两部分,一部分是无耗散的双曲型系统,另一部分则与耗散有关. 因此,相应地,我们可以将常微分方程组(14)分成两部分,忽略震源项后,写成如下形式(Carcione and Quiroga-Goode, 1995):

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} = L(\mathbf{C}) = L_1(\mathbf{C}) + L_2(\mathbf{C}), \tag{21}$$

其中,算子 L_1 对应无耗散情形的声波传播,算子 L_2 对应系统中的耗散项,实际上, L_2 只与耗散参数 r 有关. 我们将算子 L, L_1 和 L_2 对应的谱半径分别记作 λ, λ_1 和 λ_2 . 则由(21),我们可得 $\lambda \leq \lambda_1 + \lambda_2$. 对于双曲型系统:

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} = L_1(\mathbf{C}), \tag{22}$$

我们在上文中已给出关于 $\Delta t \leq \alpha_{\max} h/c$ 的结果. 利用求解常微分方程的数值分析理论(李庆杨等, 2008),我们知道对于加权的 Runge-Kutta 时间离散格式(15),当 $\eta = 0.5$ 时,要使得格式稳定,必须满足如下条件:

$$\Delta t \leq \frac{6.25}{\lambda_1}, \tag{23}$$

从而可得

$$\lambda_1 \leq \frac{6.25}{\Delta t} \approx \frac{6.25c}{\alpha_{\max} h}. \tag{24}$$

对于带耗散的系统:

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} = L_2(\mathbf{C}), \tag{25}$$

由于算子 L_2 只与矩阵耗散参数 r 有关,所以算符的谱半径等于 r ,即

$$\lambda_2 \approx r. \tag{26}$$

由于 $\lambda \leq \lambda_1 + \lambda_2$, 所以由方程(24)及(26)可得

$$\lambda \leq \frac{6.25c}{\alpha_{\max} h} + r. \tag{27}$$

因此,我们得到利用 WRKDG 方法求解 3D D' Alembert 介质中的数值稳定性条件的经验公式:

$$\begin{aligned} \Delta t \leq \frac{6.25}{\lambda} &\leq \frac{6.25}{\frac{6.25c}{\alpha_{\max} h} + r} \quad \text{或者} \\ \frac{c\Delta t}{h} &\leq \frac{6.25c}{\frac{6.25c}{\alpha_{\max}} + hr} =: (\alpha_{\max})'_{D'Ale}. \end{aligned} \tag{28}$$

方程(28)中给出的时间步长限制是保持计算稳定的充分条件,但不是必要条件. 我们在表 1 列出了当波速 $c = 1 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$, 随 hr 变化时, P^1 阶和 P^2 阶 WRKDG 方法的真实最大库朗数 $(\alpha_{\max})_{D'Ale}$ 与从经验公式(28)获得的值 $(\alpha_{\max})'_{D'Ale}$ 进行对比,从表中可以看出两者之间相差不大. 因此,在实际应用中,(28)式是一个合理的估计. 若是采用四面体内切球体直径 d ,则(28)式可写为

$$\begin{aligned} \Delta t &\leq \frac{6.25}{\frac{6.25c}{\alpha_{\max}} \frac{0.3597}{d} + r} \quad \text{或者} \\ \frac{c\Delta t}{d} &\leq 0.3597 \frac{6.25c}{\frac{6.25c}{\alpha_{\max}} + \frac{d}{0.3597} r}. \end{aligned} \tag{29}$$

表 1 3D D' Alembert 介质中 P^1 阶和 P^2 阶 WRKDG 方法的真实最大库朗数 $(\alpha_{\max})_{D'Ale}$ 与从经验公式(28)获得的值 $(\alpha_{\max})'_{D'Ale}$ 的对比

Table 1 Comparisons of the actual maximum Courant numbers $(\alpha_{\max})_{D'Ale}$ and the values $(\alpha_{\max})'_{D'Ale}$ given by empirical formula (28) for 3D P^1 and P^2 WRKDG methods in D' Alembert media

P^1			P^2		
hr	$(\alpha_{\max})_{D'Ale}$	$(\alpha_{\max})'_{D'Ale}$	hr	$(\alpha_{\max})_{D'Ale}$	$(\alpha_{\max})'_{D'Ale}$
100	0.049	0.049	100	0.043	0.043
50	0.082	0.082	50	0.067	0.066
10	0.175	0.175	10	0.120	0.117
5	0.205	0.204	5	0.133	0.129

另外,从方程(28)我们可以看出,随着耗散参数 r 的增大,时间步长减小;尤其当 r 的值很大时,此时系统(21)是一个刚性(stiff)系统,一般的时间推进方法将导致极小的时间步长,因而不适用,此时应寻找特殊的时间推进方法。

2.2 数值频散、耗散分析

在本节中,我们将讨论求解 D'Alembert 介质中声波方程的 3D WRKDG 方法的数值频散和数值耗散情况. 对于方程(18)中的简谐波表达式,当代入数值格式中,如果我们假定波数 k 是实数,则一般说来角频率 ω 是复数,不妨假设 $\omega = \omega_r - i\omega_i$, 其中实部 ω_r 表示 ω 中与频散有关的量,非负的虚部 ω_i 表示 ω 中与耗散有关的量. 数值波速可由 $c_{\text{num}} = \omega_r/k$ 估计. 我们引入采样率 $\delta = kh/(2\pi)$, 并将数值频散 R 定义为数值速度与真实物理速度之比,则 R 的表达式为

$$R = \frac{c_{\text{num}}}{c} = \frac{\omega_r}{kc} = \frac{\omega_r \Delta t}{\alpha k h} = \frac{\omega_r \Delta t}{2\pi \alpha \delta}, \tag{30}$$

其中 $\alpha = c\Delta t/h$ 是库朗数. 我们将振幅在一个时间步内的衰减记作 $S = e^{-\omega_i \Delta t}$, S 可以反映 D'Alembert

介质中的衰减情况.

图 3 给出了用 WRKDG 方法计算的数值频散情况. 我们设置参数 $c=2 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$, $h=0.05 \text{ km}$, $\alpha = c\Delta t/h = 0.1$. 在 3D 情形,数值频散 R 的大小与传播方向 θ 和 φ 有关,在图 3 中,我们仅给出了 $\theta = \pi/2$ 、 $\varphi = 0, \pi/12, \pi/4$ 情况下,WRKDG 方法的数值频散随采样率 δ 的变化图. 注意此时由于 h 固定, δ 的大小与波数成正比. 图 3 中(a—b)、(c—d)分别表示 P^1 阶、 P^2 阶 WRKDG 方法,(a)、(c)表示无耗散 $r=0$ 的情形,而(b)、(d)表示耗散参数 $r=10$ 的情形. 从图 3 中我们可以明显观察到数值频散的各向异性特征. 引起数值频散各向异性的因素较多,数值算法本身、算法精度、网格剖分方式、网格步长大小等都会影响数值频散各向异性的产生及幅度. 例如,在进行数值频散分析时,引入了方位角 θ 和 φ ,当空间网格分布存在不对称性时,会导致数值频散出现各向异性特征. 其次,不同算法精度产生的数值频散各向异性也不相同. 一般来说,减小网格的各向异性、提高算法精度、减小网格步长可以有效降低数值频散的各向异性.

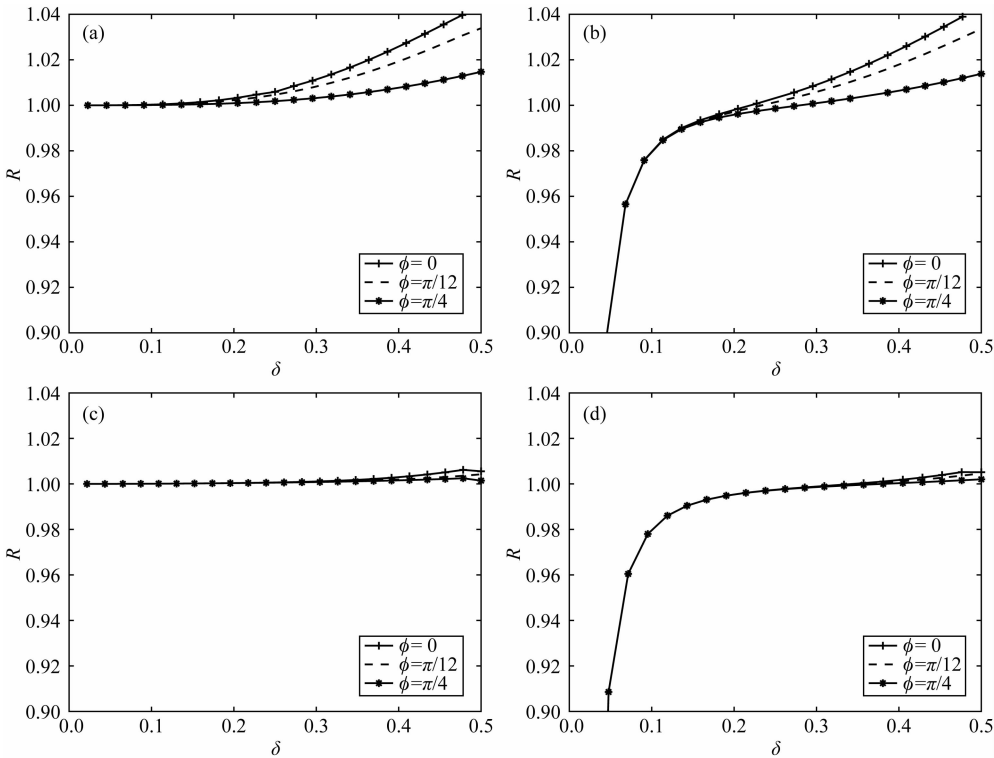


图 3 在 $\theta=\pi/2$ 时, P^1 阶和 P^2 阶 WRKDG 方法取 $\varphi=0, \pi/12, \pi/4$ 时数值频散 R 随采样率 δ 的变化情况. (a—b) P^1 阶 WRKDG 方法, (c—d) P^2 阶 WRKDG 方法, (a)、(c)对应耗散参数 $r=0$, 而 (b)、(d)对应耗散参数 $r=10$

Fig. 3 Numerical dispersion R as a function of sampling rate δ for P^1 and P^2 WRKDG methods when $\theta=\pi/2$ and $\varphi=0, \pi/12, \pi/4$. (a—b) are for P^1 WRKDG method, while (c—d) are for P^2 WRKDG method. Panels (a) and (c) show the cases for $r=0$; panels (b) and (d) show the cases for $r=10$

另外,我们从图 3b 与 3d 中发现,在 δ 较小时 D' Alembert 介质存在比较大的频散,随着 δ 的增加, R 的值接近 1,也就是说,随着 δ 的增加,频散变小.对比 $r=0$ 与 $r=10$ 这两种情形,我们可以得出下述结论:在 δ (波数)较小时, D' Alembert 介质中存在主要由耗散参数 r 引起的频散;随着 δ (波数)的增加,耗散参数引起的频散变小,而数值算法引起的数值频散占主导.

图 4 显示了振幅在一个时间步 Δt 内的耗散 $S = e^{-\omega_s \Delta t}$ 随采样率的变化图.图中参数的选取和上文中数值频散分析中相同.当 $r=0$ 时(图 4a 与图 4c), S 表示声波介质中的衰减情况,此时 S 完全由数值离散方法引起,而当 $r=10$ 时(图 4b 与图 4d), S 的大小由数值离散方法引起的数值耗散与 D' Alembert 介质中的耗散参数 r 共同决定.图 4 也体现了数值耗散的各向异性特征.在图 4 中,对比耗散因子 $r=0$ 与 $r=10$ 这两种情形,我们可以观察到 $r=10$ 时的耗散曲线有一个整体的下降,其值约为 0.9876,约等于 D' Alembert 介质中理论耗散因子 $e^{-r\Delta t/2}$,

体现了 D' Alembert 介质的衰减特性.

3 并行计算

3.1 网格准备

结构网格(六面体)和非结构网格(四面体)均可用于实际计算,一般说来,结构网格精度较高,但是对于复杂几何模型来说,生成结构网格会花费较大代价;非结构网格计算精度不如结构网格,但是其网格生成较简单.本研究中选取非结构网格——四面体网格.网格剖分可以使用开源软件或商业软件.当模型比较简单或网格量比较小的时候选择开源软件,当模型比较复杂或者问题规模较大时,优先选择商业软件.我们使用开源软件或者商业软件生成了四面体网格,获得了所有网格节点的信息以及单元连接关系矩阵,为了计算的便利性,我们还需要计算面与面之间的关联矩阵、面与单元之间的关联矩阵、每个面中第一个顶点对应的于相邻面中的局部编号矩阵.这些矩阵的计算过程可参考 Hesthaven 和 Warburton(2008)的研究.

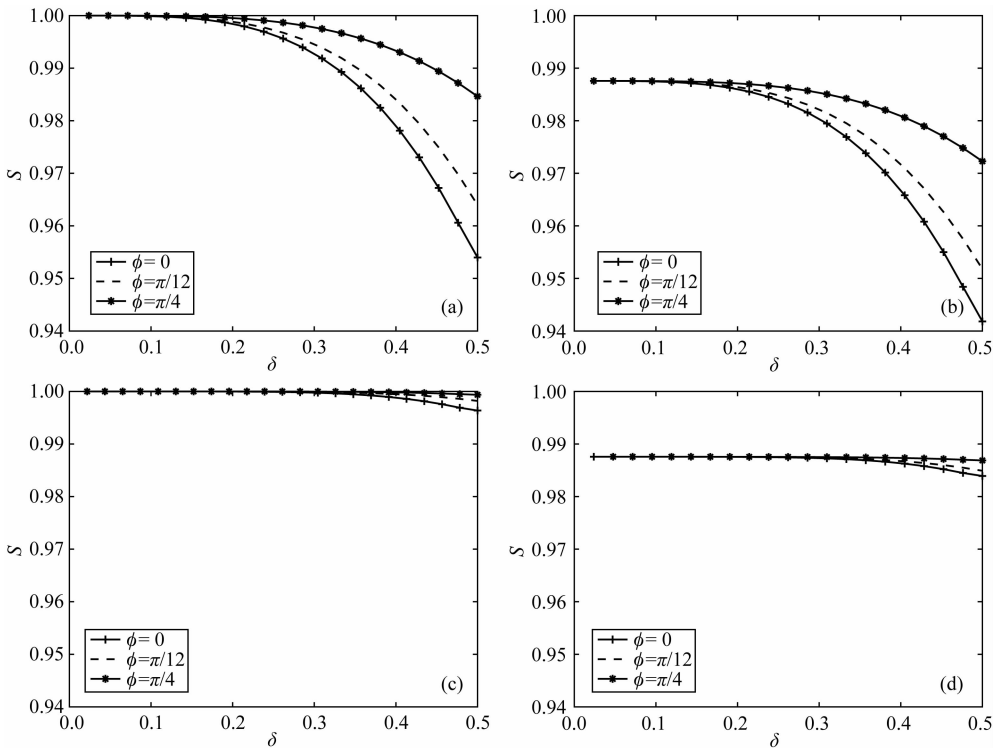


图 4 在 $\theta=\pi/2$ 时, P^1 阶和 P^2 阶 WRKDG 方法取 $\varphi=0, \pi/12, \pi/4$ 时数值耗散 S 随采样率 δ 的变化情况. (a—b) P^1 阶 WRKDG 方法, (c—d) P^2 阶 WRKDG 方法, (a), (c) 对应耗散参数 $r=0$, 而 (b), (d) 对应耗散参数 $r=10$

Fig. 4 Numerical dissipation S as a function of sampling rate δ for P^1 and P^2 WRKDG methods when $\theta=\pi/2$ and $\varphi=0, \pi/12, \pi/4$. (a—b) are for P^1 WRKDG method, while (c—d) are for P^2 WRKDG method. Panels (a) and (c) show the cases for $r=0$; panels (b) and (d) show the cases for $r=10$

3.2 网格分划

由于 3D 情形计算量和存储量均较大,所以要 进行并行处理. 在并行之前,我们需要对整体的 3D 网格进行分划,将其分给不同的进程. 我们使用开源 网格分划程序包 Metis (Karypis and Kumar, 1998). 在使用时只需要输入单元数、顶点数、单元连 接矩阵、进程数等数据,即可用一行命令对网格进行 快速分划. 例如,图 5 显示了 Metis 分划的结果,图

5a 代表将 3D 区域 $[0,2] \times [0,2] \times [0,2]$ 离散成 6000 个四面体网格,用 Metis 划分给 5 个不同的进 程,图 5b 给出了运行结果,图 5b 中不同颜色代表分 给不同进程.

3.3 并行流程

在本研究中,我们使用 Message Passing Interface (MPI)编程策略对程序进行并行化处理,整个流程 可参考图6. 在程序开始阶段,由于我们采用无积分

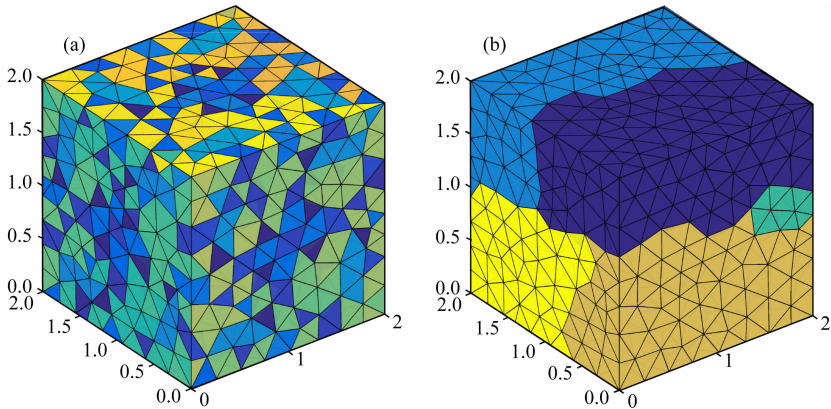


图 5 (a) 6000 个四面体网格;(b)利用 Metis 将(a)中所有网格分给 5 个进程
Fig. 5 (a) 6000 tetrahedrons; (b) Metis divides all tetrahedrons in (a) into 5 processors

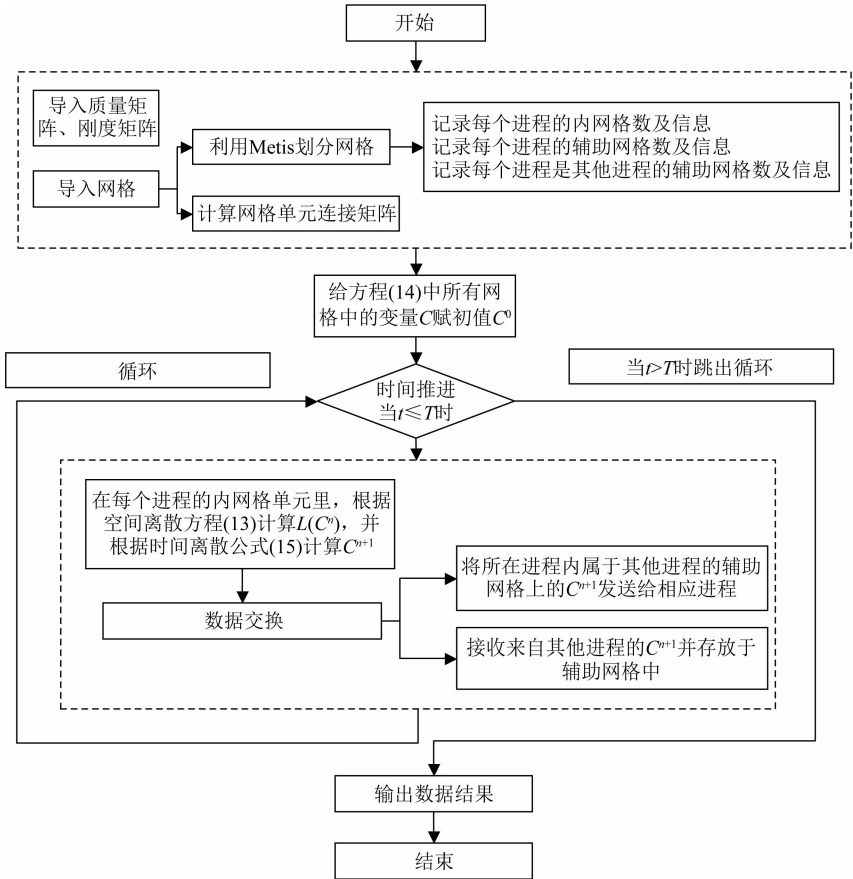


图 6 并行算法流程图
Fig. 6 Flow chart of the parallel algorithm

(quadrature-free)的 DGM,因此可将方程(13)中所需的参考单元内的质量、刚度矩阵以及四面体面积分矩阵提前计算出来,然后导入到程序中.同时,我们也将生成的网格文件导入,并利用 Metis 进行网格划分,同时需要计算出网格单元连接矩阵,以备后用.在用 Metis 进行网格划分完毕后,对于每一个进程我们需要记录三类网格及其信息.以图 7 来进行说明,第一类网格是每个进程的内网格,例如,以第一个进程为例,图 7 中蓝色区域内的网格即是第一个进程的内网格;第二类网格是该进程的辅助网格,这类网格属于其他进程的内网格,位于进程 1 所有网格的边界处,如图 7a 中的绿色网格部分(图 7b 是图 7a 的一个更清晰的展示),作用是接收来自于其

他进程更新后的变量信息;第三类网格是属于该进程内,但是作为其他进程的辅助网格,这类网格在消息传递时需要由本进程传递给其他进程使用,如图 7c 中红色网格显示.

开始阶段结束后,如流程图 6 中的说明,我们将变量赋初值,然后进入时间迭代.在每个时间迭代步中,首先更新每个进程内网格(即第一类网格)的变量信息.这一步结束后,我们需要进行两步消息传递:将所在进程内属于其他进程的辅助网格(即第三类网格)上的 C^{n+1} 发送给相应进程,并接收来自其他进程的 C^{n+1} 并存放于辅助网格(即第二类网格)中.这样我们就完成了一步完整的时间迭代.时间迭代结束后,输出数据结果,并利用画图软件等进行画图.

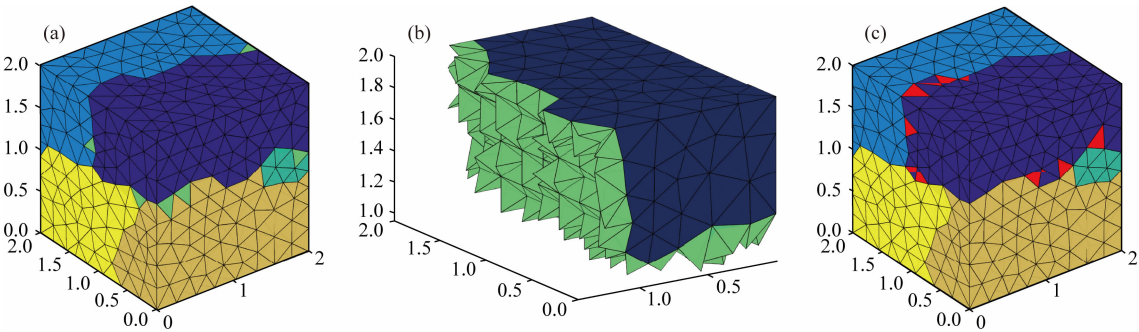


图 7 (a) 所考虑进程的辅助网格示意图,即图中绿色网格部分,这类网格属于其他进程的内网格,位于该进程所有网格的边界处;(b) 图 a 的侧面图;(c) 属于该进程内、作为其他进程的辅助网格,即图中红色网格部分

Fig. 7 (a) Illustration of the auxiliary grids of this processor (the green part in the figure). This type of grids belongs to the internal grids of other processors, and is located at the boundary of this process; (b) the side view of figure a; (c) the auxiliary grids of other processors which belongs to this processor (the red part in the figure)

4 精度测试及并行效率分析

我们考虑一个带有解析解的模型来验证该方法的正确性和收敛性.对于无源的方程(1),考虑如下解析解(Cai et al., 2017)

$$u(t,x,y,z) = e^{-\pi/2} \cos(K_1x + K_2y + K_3z - Wt), \tag{31}$$

其中 $W = \sqrt{c^2(K_1^2 + K_2^2 + K_3^2) - r^2/4}$. 相应地,对于系统(2),我们有如下解析解:

$$\begin{aligned} u(t,x,y,z) &= e^{-\pi/2} \cos(K_1x + K_2y + K_3z - Wt), \\ p(t,x,y,z) &= \\ &-K_1 \frac{-2ae^{-\pi/2} \sin(K_1x + K_2y + K_3z - Wt) + 4Wu}{r^2 + 4W^2}, \\ q(t,x,y,z) &= \\ &-K_2 \frac{-2ae^{-\pi/2} \sin(K_1x + K_2y + K_3z - Wt) + 4Wu}{r^2 + 4W^2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} s(t,x,y,z) &= \\ &-K_3 \frac{-2ae^{-\pi/2} \sin(K_1x + K_2y + K_3z - Wt) + 4Wu}{r^2 + 4W^2}. \end{aligned} \tag{32}$$

在本例中,选取计算区域为 $0 \leq x,y,z \leq 2$ km,速度 $c = 2 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$, $K_1 = K_2 = K_3 = \pi$,以 $t = 0$ s 时刻的值作为初始条件,采用周期边界条件.由于我们主要考察空间离散的误差和收敛精度,因此我们设置时间步长为 0.1 ms,此时,由时间离散引起的误差可以忽略,数值误差主要来自于空间离散.我们采用如图 2 所示的网格剖分及四面体单元,图中每个小立方体的边长为 h ,且每个立方体含有 6 个四面体单元.我们令 N 表示在 x,y 及 z 三个方向划分的立方体个数,则四面体总数目为 $6N^3$.定义 L^2 与 L^1 误差为

$$E_L^k = \|u - u_{ex}\|_{L^k} = \left(\int_{\Omega} |u - u_{ex}|^k d\Omega \right)^{\frac{1}{k}}, \quad k = 1, 2, \tag{33}$$

其中 u_{ex} 是方程(31)给出的精确解. 我们令 $N=4, 8, 10, 16, 20$, 在表 2 中列出了 $T=0.1\text{ s}$ 时刻在耗散参数 $r=1$ 以及 $r=10$ 两种情形下的数值误差和相应的收敛阶. 从表 2 可以看出, 数值误差随着空间步长的减小而减小, 说明 WRKDG 方法是收敛的. 由于我们使用了二次基函数, 因此得到了预期的三阶空间精度. 同时, 从表 2 中可以看出, 随着耗散参数 r 的增大, 误差也随之减小, 体现了 D'Alembert 介质的衰减特性.

表 2 3D D'Alembert 介质中 P^2 阶 WRKDG 的
误差及收敛阶

Table 2 Convergence rates of u for the acoustic wave in 3D D'Alembert medium					
	$h(\text{km})$	L^2 error	order	L^1 error	order
$r=1$	5.00×10^{-1}	1.430×10^{-2}	—	2.978×10^{-2}	—
	2.50×10^{-1}	1.728×10^{-3}	3.049	3.770×10^{-3}	2.982
	2.00×10^{-1}	8.127×10^{-4}	3.381	1.714×10^{-3}	3.533
	1.25×10^{-1}	1.925×10^{-4}	3.064	4.085×10^{-4}	3.051
	1.00×10^{-1}	1.009×10^{-4}	2.893	2.137×10^{-4}	2.904
$r=10$	5.00×10^{-1}	9.249×10^{-3}	—	2.091×10^{-2}	—
	2.50×10^{-1}	1.063×10^{-3}	3.121	2.386×10^{-3}	3.132
	2.00×10^{-1}	5.200×10^{-4}	3.205	1.133×10^{-3}	3.338
	1.25×10^{-1}	1.221×10^{-4}	3.082	2.675×10^{-4}	3.071
	1.00×10^{-1}	6.345×10^{-5}	2.934	1.388×10^{-4}	2.941

接下来, 为了考察 3D WRKDG 算法的并行效率, 我们将上述精度测试中 $N=20$ 的数值模拟程序进行并行化处理, 此时计算区域被离散成 48000 个四面体, 利用 Metis 将网格分别分划给 2、4、8、16、32、64 个进程, 记录运行的 CPU 时间数. 假设每个处理器的计算性能相同, 在此条件下, 并程序的加速比(speed-up)可定义为: $S_p = T_s/T_p$, 其中 T_s 是串行程序运行的时间, T_p 是并行程序在 P 个进程下运行的时间, S_p 在通常情况下总是小于 P , 因为在并行程序设计时往往会引入一些通信时间及其他管理花费. 图 8 给出了 3D WRKDG 方法的并程序加速比及理想情形下的加速比, 从图中可以看出, 当进程数比较小的时候, 加速比接近理论情形, 但是随着进程数越增大, 实际加速比越偏离理论情形, 这是由于进程数增加引起进程与进程之间的通信时间开销大大增大, 同时进程与进程之间等待的时间开销也增大, 从而降低了并行效率. 本文所使用的计算平台是国家超级计算天津中心的天河 TH-1A 高性能机群系统, 每个节点上有 12 个主频为 2.93 GHz

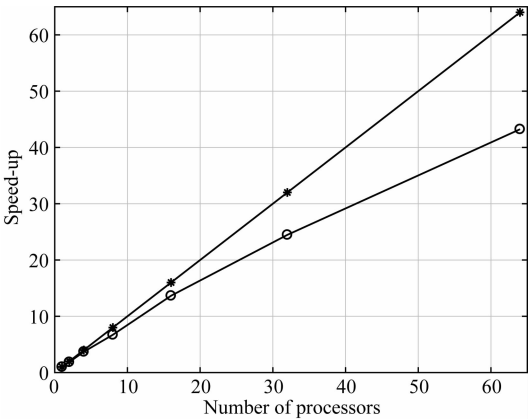


图 8 3D WRKDG 算法的并行加速比(图中线型“-o”表示). 其中横轴表示进程数, 纵轴表示并行加速比. 图中线型“-*”表示理想情形下的并行加速比

Fig. 8 Parallel speed-ups of the 3D WRKDG algorithm (see the line type “-o”). The horizontal axis is the number of processors, and the vertical axis is the parallel speed-ups. The line type “-*” in the figure represents the parallel speed-up in the ideal case

的核, 每个节点内存为 24 GB.

5 波场模拟

在本节中, 我们通过几个数值例子来说明本文所给出的 WRKDG 方法在求解 3D D'Alembert 介质中声波传播问题的有效性. 考虑到更高阶格式的库朗数条件更为严格, 且存储量和计算量也越大, 因此, 如果没有特殊说明, 在本节中我们仅使用空间精度为 3 阶的 P^2 阶 WRKDG 方法进行波场模拟.

5.1 均匀介质模型

在这个例子中, 我们考查 D'Alembert 介质中声波在 3D 均匀介质中的传播. 选取计算区域为 $0\leq x, y, z\leq 2\text{ km}$ 的立方体区域, 我们将其离散为 3072000 个四面体, 每个四面体边长平均约为 25 m. 声波速度 $c=3\text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$, 时间步长取 $\Delta t\approx 1.29\text{ ms}$. 震源函数是:

$$f(t)=-9.6f_0(0.6f_0t-1)\exp[-8(0.6f_0t-1)^2].$$

(34)

其中 $f_0=45\text{ Hz}$, 主频约为 20 Hz. 震源位于 $(0.981251, 1.00625, 1.00625)\text{ km}$ 处, 在坐标 $(1.35, 1.35, 1.35)\text{ km}$ 处设置一个接收点用于记录波形信息. 我们首先考查无耗散情形, 即 $r=0$. 图 9 给出了 $T=0.5\text{ s}$ 时刻接收点接收到的归一化的波形记录, 图中红色实线是用 Cagniard-de-Hoop 方法(Aki and Richards, 2002)计算得到的解析解, 而蓝色虚线及黑色实线分别表

示利用 P^2 及 P^1 方法得到的数值解. 从图中可以看出, P^1 方法出现少许数值频散, 而 P^2 方法与解析解吻合较好, 这说明了提高算法精度有助于降低数值频散. 图 10 给出了 P^2 方法的波场快照图, 此时波已经传至边界. 波场快照图中无明显可见数值频散.

下面考虑 D'Alembert 介质中耗散参数 $r=2$ 、4、8 和 16 时的波传播情形. 图 11 给出了此时接收点处的波形记录图, 从图中可以看出, 随着耗散参数

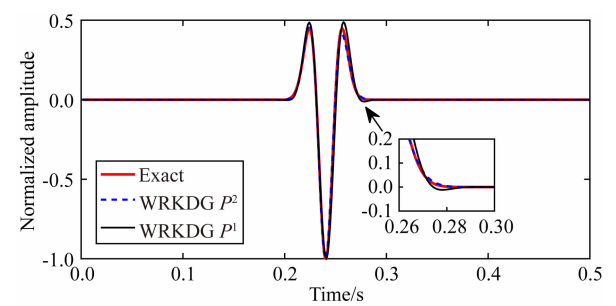


图 9 在耗散参数 $r=0$ 的 3D 均匀介质模型中, $T=0.5$ s 时刻接收点处的归一化的波形记录图, 图中红色实线代表解析解, 蓝色虚线及黑色实线分别表示利用 P^2 及 P^1 方法得到的数值解

Fig. 9 Comparisons of normalized waveforms at time $T=0.5$ s for the 3D homogeneous model with dissipation parameter $r=0$, in which the red solid line in the figure represents the analytical solution, and the blue dotted line and black solid line represent the numerical solution computed by the P^2 and P^1 methods, respectively

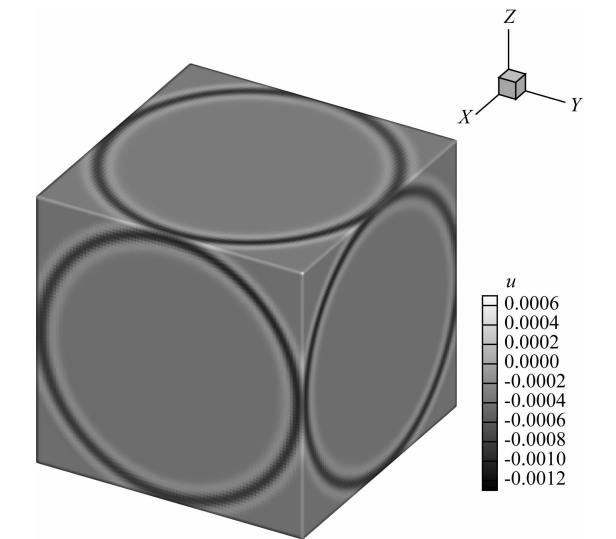


图 10 在耗散参数 $r=0$ 的 3D 均匀介质模型中, 使用 P^2 方法计算得到的 $T=0.5$ s 时刻的波场快照图

Fig. 10 Snapshots of the acoustic wave fields computed by the P^2 method at time $T=0.5$ s for the 3D homogeneous model with dissipation parameter $r=0$

r 的增大, 振幅明显变小, 这证明了 D'Alembert 介质中的强衰减效应. 为了定量地研究这种衰减效应, 我们记录了 $r=0, 2, 4, 8$ 和 16 情形下波形记录中波谷处的振幅值, 然后相应地除以 $r=0$ 时波谷振幅, 得到振幅的衰减系数. 表 3 列出了此时观测到的波谷处的振幅及衰减系数. 此外, 我们也给出了理论的衰减系数以供比较, 理论衰减系数由 $e^{-rT/2}$ 计算 (具体见第 3.2 节耗散分析), 其中 T 是声波从震源传播到接收器所需的传播时间, 容易算出本例中 $T = \frac{L}{c} = \frac{0.35\sqrt{3}}{3} \text{ s} \approx 0.2021 \text{ s}$. 从表 3 可以看出, 此时观测到的衰减系数与理论衰减系数符合得很好.

表 3 3D D'Alembert 介质中波形记录的波谷处的振幅和衰减系数

Table 3 The amplitudes and attenuation ratios at the trough at the receiver for the acoustic wave in D'Alembert medium

r	Amplitude at trough	Attenuation ratio at trough	Theoretical attenuation ratio $e^{-rT/2}$
0	-2.647×10^{-3}	—	—
2	-2.159×10^{-3}	0.816	0.817
4	-1.759×10^{-3}	0.664	0.668
8	-1.172×10^{-3}	0.443	0.446
16	-5.234×10^{-4}	0.198	0.199

5.2 非规则几何模型

在这个例子中, 我们主要利用 3D WRKDG 方法模拟波在非规则几何模型中的传播, 模型如图 12 所示, 在计算区域为 $0 \leq x, y, z \leq 2$ km 的立方体中, 有一个球状区域, 球中心坐标 $(1, 1, 0.5)$ km, 半径 0.2 km. 球内介质波速 $1.5 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$, 球外介质波速 $3 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$. 我们采用 2179529 个四面体的非均匀网格离散, 其中球外的四面体最大边长不超过 0.05 km,

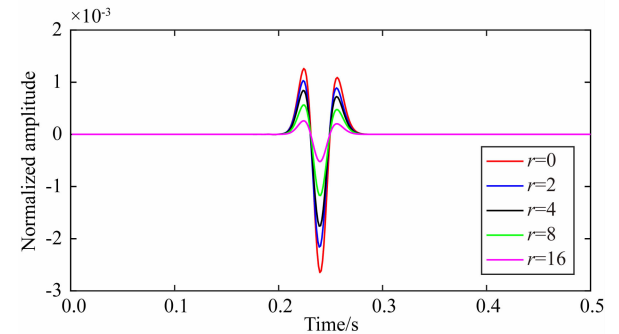


图 11 在均匀介质模型中, 不同耗散参数 $r=0, 2, 4, 8$ 和 16 对应的接收器处的声波波形记录

Fig. 11 Waveform records at the receiver with different dissipation parameters $r=0, 2, 4, 8$ and 16 for the homogeneous model

在球面上四面体最大边长不超过 0.02 km. 图 13a 给出了球体部分四面体网格的 3D 显示,图 13b 给出了清晰的 2D 剖面 $y=0$ 处的网格剖分示意图,从图中可以看出,四面体网格可以贴合内边界——球面生成,且在包裹球体的一个立方体内的网格密度大,而在远离此立方体的地方网格密度小. 时间步长取 $\Delta t \approx 0.52$ ms. 震源函数与方程(34)中相同,其中 $f_0=60$ Hz, 主频约为 25 Hz. 图 14 给出了在 $T=0.3$ s 时刻下的波场快照图,图 14a 对应于无耗散情形,而图 14b 对应于耗散参数 $r=4$. 从图中可以看出,图 14b 较图 14a 暗一些,证明了 D'Alembert 介质中的衰减效应.

5.3 Marmousi 模型

在这个例子中,我们选取 Marmousi 速度模型 (Versteeg and Grau, 1991) 以测试 WRKDG 方法在非均匀复杂介质情况下的计算效果. 为了简化 3D 模型,我们采取 2D Marmousi 模型在 z 方向进行平移得到 3D 模型,模型尺寸是 $9.216 \times 2.928 \times 2.928$ km, 其速度结构如图 15 所示. Marmousi 模型有很强的非均匀性,其速度变化范围是 $1.5 \sim 5.5$ km $\cdot$ s⁻¹. 本实验采用 2250000 个四面体,四面体平均边长为

24 m,震源函数如方程(34)所示,其中 $f_0=30$ Hz, 主频约为 13 Hz,震源位于 (4.577,0.015,1.449)km 处. 模拟中时间步长取 $\Delta t \approx 1.69$ ms, D'Alembert 介质中耗散参数 $r=2$. 图 16 给出了 $T=1.0$ s 时刻的波场快照,从图中可以看出并无明显可见的数值频散. 这说明 3D WRKDG 方法可以有效模拟复杂非均匀 D'Alembert 介质中的声波波场.

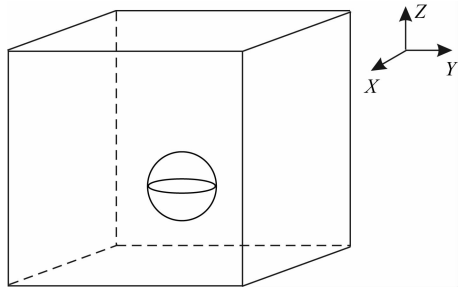


图 12 非规则几何模型示意图,在计算区域 $0 \leq x, y, z \leq 2$ km 中,有一个球状区域,球中心坐标 (1,1,0.5) km,半径 0.2 km
Fig. 12 Illustration of the irregular geometric model. In the computational domain $0 \leq x, y, z \leq 2$ km, there is a spherical area with spherical center coordinates (1,1,0.5) km and a radius of 0.2 km

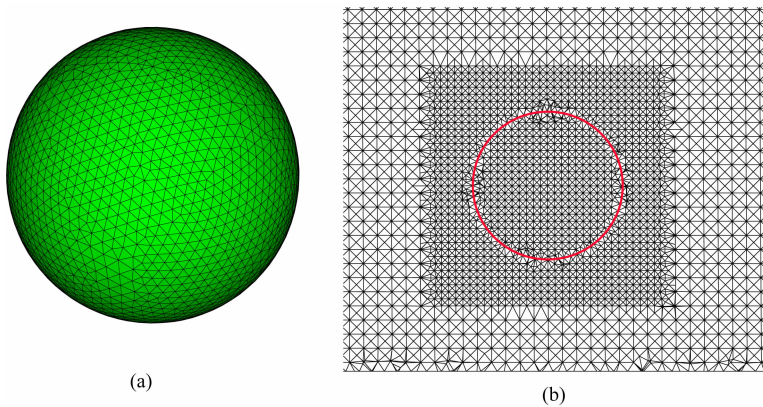


图 13 (a) 球体部分四面体网格的 3D 示意图; (b) 二维剖面 $y=0$ 处的网格剖分示意图
Fig. 13 Illustration of (a) tetrahedrons in the ball and (b) the grid division at the cross section $y=0$

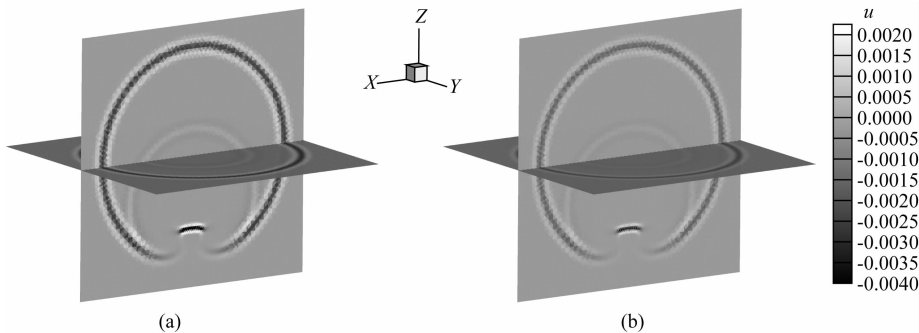


图 14 $T=0.3$ s 时刻的波场快照图,其中(a)对应于无耗散情形 $r=0$, 而(b)对应于耗散参数 $r=4$
Fig. 14 Snapshots of the seismic waves at $T=0.3$ s with dissipation parameters (a) $r=0$ and (b) $r=4$

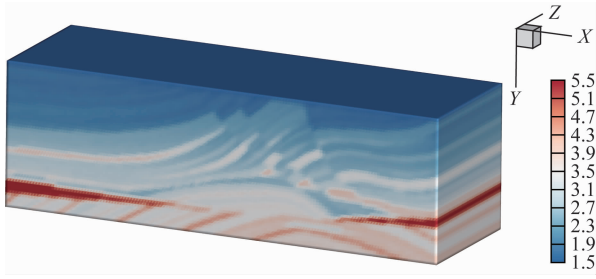


图 15 3D Marmousi 模型
Fig. 15 3D Marmousi model

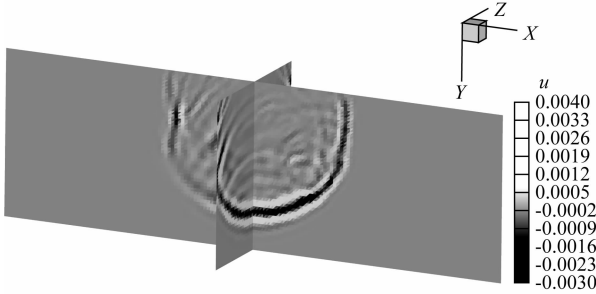


图 16 对于 3D Marmousi 模型, $T=1.0$ s 时刻的
波场快照图, 其中耗散参数 $r=2$
Fig. 16 Snapshots at $T=1.0$ s for the 3D Marmousi
model with dissipation parameter $r=2$

6 结论

本文将加权 Runge-Kutta 间断有限元 (WRKDG) 方法应用于求解 3D D' Alembert 介质中的声波方程, 空间离散采用了基于数值通量的间断有限元公式, 时间离散基于对角隐式 Runge-Kutta 方法, 我们通过两步迭代过程将其转化为显式方法, 并在时间离散化过程中引入加权因子, 最终获得了求解 3D D' Alembert 介质中声波方程的 WRKDG 新方法. 进一步, 我们详细研究了该方法的数值稳定性条件, 给出了四面体情形下的最大库朗数. 由于 D' Alembert 介质中耗散参数的引入, 我们也推导了一种带有耗散参数的数值稳定性条件经验公式. 数值试验表明, 该经验公式是一种正确的估计. 此外, 我们也深入研究了 WRKDG 方法在四面体情形下的数值频散及数值耗散, 研究表明 D' Alembert 介质中的数值频散和耗散由耗散参数 r 及数值算法共同决定, 存在一个理论耗散因子 $e^{-r\Delta t/2}$. 同时, 我们也观察到数值频散和数值耗散具有明显的各向异性特征, 这主要是由于所用网格的各向异性特征导致的.

我们通过数值模拟实验证明了 WRKDG 方法的收敛性, 给出了 3D 并行 WRKDG 算法基于 MPI

并行策略下的加速比曲线, 从中可以看出 WRKDG 算法具有良好的并行性能. 为了进一步验证 3D WRKDG 方法的正确性和有效性, 我们模拟了声波在 D' Alembert 介质中均匀、非均匀介质及非规则几何模型中的传播, 且针对均匀介质给出了理论耗散因子与观测衰减因子, 二者较为吻合. 这些结果均表明 3D WRKDG 方法能够正确且有效地模拟衰减介质中的声波传播, 能充分体现 D' Alembert 介质中波的衰减特征.

最后需要指出的是, 尽管 3D WRKDG 方法应用了并行策略能够有效节省计算时间, 但是其计算量和存储量相对于其它数值方法还是很大, 因此, 今后我们应重点考虑如何从多种途径联合提高其计算效率, 以真正实现复杂介质中大规模地震模拟、逆时偏移和基于波动方程反演成像的快速计算和实际应用, 这些都是值得我们继续深入研究的方向.

附录 A 方程 (13) 所需矩阵的具体表达式

根据方程 (13), 我们需要计算如下四面体上的体积分矩阵:

$$\begin{aligned} \{\mathbf{M}_1\}_{lm} &= \iiint_{\Omega_i} w_l^i w_m^i dx dy dz, \\ \{\mathbf{M}_2\}_{lm} &= \iiint_{\Omega_i} w_l^i \frac{\partial w_m^i}{\partial x} dx dy dz, \\ \{\mathbf{M}_3\}_{lm} &= \iiint_{\Omega_i} w_l^i \frac{\partial w_m^i}{\partial y} dx dy dz, \\ \{\mathbf{M}_4\}_{lm} &= \iiint_{\Omega_i} w_l^i \frac{\partial w_m^i}{\partial z} dx dy dz, \end{aligned} \quad (\text{A1})$$

其中, 角标 l 和 m 表示矩阵的 l 行 m 列元素, 上角标 i 表示所考虑的单元为 Ω_i . 在计算之前, 我们首先将一般的四面体单元 Ω_i 变换到如图 1 所示的参考单元 E 内. 如图 1 所示, 假设原单元四个顶点 1、2、3 及 4 的坐标分别为 (x_1, y_1, z_1) 、 (x_2, y_2, z_2) 、 (x_3, y_3, z_3) 和 (x_4, y_4, z_4) , 变换到参考单元 E 内的四个顶点坐标分别是 $(0, 0, 0)$ 、 $(1, 0, 0)$ 、 $(0, 1, 0)$ 和 $(0, 0, 1)$. 原坐标三分量是 x, y 和 z , 且假设参考单元内的坐标轴三分量为: ξ, η 和 ζ , 则任意四面体均将通过如下坐标变换成如图 1 所示的参考单元:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x - x_1 \\ y - y_1 \\ z - z_1 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 & x_4 - x_1 \\ y_2 - y_1 & y_3 - y_1 & y_4 - y_1 \\ z_2 - z_1 & z_3 - z_1 & z_4 - z_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \\ \zeta \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{J} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \\ \zeta \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A2})$$

易知: $\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z = |J| \mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta\mathrm{d}\zeta$, 其中 $|J|$ 是四面体 Ω_i 的体积, 且容易得到如下偏导数的值(Dumbser and Käser, 2006):

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \xi}{\partial x} & \frac{\partial \eta}{\partial x} & \frac{\partial \zeta}{\partial x} \\ \frac{\partial \xi}{\partial y} & \frac{\partial \eta}{\partial y} & \frac{\partial \zeta}{\partial y} \\ \frac{\partial \xi}{\partial z} & \frac{\partial \eta}{\partial z} & \frac{\partial \zeta}{\partial z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \\ \frac{\partial}{\partial \zeta} \end{pmatrix} = \mathbf{J}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \\ \frac{\partial}{\partial \zeta} \end{pmatrix}. \quad (\text{A3})$$

在(A2)所示的坐标变换下, 要计算方程(A1)中的矩阵, 只需要在参考单元中计算如下矩阵即可:

$$\begin{aligned} \{\mathbf{M}'_1\}_{lm} &= \iiint_E w_l w_m \mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta\mathrm{d}\zeta, \\ \{\mathbf{M}'_2\}_{lm} &= \iiint_E w_l \frac{\partial w_m}{\partial \xi} \mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta\mathrm{d}\zeta, \\ \{\mathbf{M}'_3\}_{lm} &= \iiint_E w_l \frac{\partial w_m}{\partial \eta} \mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta\mathrm{d}\zeta, \\ \{\mathbf{M}'_4\}_{lm} &= \iiint_E w_l \frac{\partial w_m}{\partial \zeta} \mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta\mathrm{d}\zeta. \end{aligned} \quad (\text{A4})$$

例如, 要计算原质量矩阵 $\mathbf{M}_1$, 可以利用关系式, $\mathbf{M}_1 = |\mathbf{J}| \mathbf{M}'_1$.

为了计算方程(13)中所有面上的积分, 我们引入如下四面体所有面上质量矩阵. 下面叙述的整体思路可参考 Dumbser and Käser(2006), 我们下文仅摘录关乎编程的重要细节加以阐述. 为此, 我们原封不动引用 Dumbser and Käser(2006)文中的表 1 和表 2(对应本文中表 A1 和表 A2), 分别代表四面体四个面的顺序以及在进行面积分的时候参变量对应的取值, 四面体的四个面我们不妨记作 F_1 、 F_2 、 F_3 和 F_4 , 对应的参考单元上的面分别记作 E_1 、 E_2 、 E_3 和 E_4 . 方程(13)中出现了两个面积分项, 其中第一项是 $\iint_{\Omega_i \cap \Omega_j} w_l^i w_l^j \mathrm{d}S$, 第二项是 $\iint_{\Omega_i \cap \Omega_j} w_l^i w_l^j \mathrm{d}S$, 下面我们分别来进行处理. 先看第一项 $\iint_{\Omega_i \cap \Omega_j} w_l^i w_l^j \mathrm{d}S$, 此项包含四种情况, 即 $\iint_{F_1} w_l^i w_l^j \mathrm{d}S$ 、 $\iint_{F_2} w_l^i w_l^j \mathrm{d}S$ 、 $\iint_{F_3} w_l^i w_l^j \mathrm{d}S$ 和 $\iint_{F_4} w_l^i w_l^j \mathrm{d}S$, 对照图 1 和表 A1, 在 F_1 、 F_2 、 F_3 和 F_4 上, 有

$$\begin{aligned} \iint_{F_1} w_l^i w_l^j \mathrm{d}S &= 2 |S_{F_1}| \iint_{\hat{F}} w_l(\tau, \chi, 0) w_l(\tau, \chi, 0) \mathrm{d}\chi \mathrm{d}\tau, \\ \iint_{F_2} w_l^i w_l^j \mathrm{d}S &= 2 |S_{F_2}| \iint_{\hat{F}} w_l(\chi, 0, \tau) w_l(\chi, 0, \tau) \mathrm{d}\chi \mathrm{d}\tau, \\ \iint_{F_3} w_l^i w_l^j \mathrm{d}S &= 2 |S_{F_3}| \iint_{\hat{F}} w_l(0, \tau, \chi) w_l(0, \tau, \chi) \mathrm{d}\chi \mathrm{d}\tau, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \iint_{F_4} w_l^i w_l^j \mathrm{d}S &= 2 |S_{F_4}| \iint_{\hat{F}} w_l(1 - \chi - \tau, \chi, \tau) w_l(1 - \chi - \tau, \chi, \tau) \mathrm{d}\chi \mathrm{d}\tau, \\ 0 \leq \chi \leq 1 - \tau, 0 \leq \tau \leq 1, \end{aligned} \quad (\text{A5})$$

其中, $|S_{F_i}|$ 表示 F_i 的面积, $\hat{F}$ 表示三角形区域 $\{(\chi, \tau) | 0 \leq \chi \leq 1 - \tau, 0 \leq \tau \leq 1\}$. 下面我们来处理第二项 $\iint_{\Omega_i \cap \Omega_j} w_l^i w_l^j \mathrm{d}S$ 上的积分, 注意, 这里的 j 代表的是与单元 Ω_i 相邻单元的编号. 令 $F = \Omega_i \cap \Omega_j$, Ω_i 与 Ω_j 相交的面有几种情况, 根据表 A1 规定的面的顺序, F 在 Ω_i 中有可能等于 F_1 、 F_2 、 F_3 或 F_4 , 在 Ω_j 中有可能等于 $F_{1'}$ 、 $F_{2'}$ 、 $F_{3'}$ 或 $F_{4'}$ ($F_{1'}$ 、 $F_{2'}$ 、 $F_{3'}$ 或 $F_{4'}$ 表示按照表 A1 规定的 Ω_j 中四个面的顺序). 现假设在 Ω_i 中有: $F = F_i, \forall 1 \leq i \leq 4$, 在 Ω_j 中有 $F = F_j, \forall 1 \leq j \leq 4$, 则 F_i 与 F_j 的连接根据顶点对应的不同情形又可分为三种情况, Dumbser and Käser(2006)在表 A2(b)中引入参数 h 表示这三种情况, h 表示在 F_i 中第一个顶点对应的 F_j 中顶点的局部编号, $1 \leq h \leq 3$. 于是计算 $\iint_{\Omega_i \cap \Omega_j} w_l^i w_l^j \mathrm{d}S$ 总共需要考虑 $4 \times 4 \times 3 = 48$ 种情形. 在表 A2 中简明地表达了这 48 种情形, 例如, 假如在 Ω_i 中 $F = F_1$, 在 Ω_j 中 $F = F'_2$, 且 $h = 3$, 则积分项 $\iint_{\Omega_i \cap \Omega_j} w_l^i w_l^j \mathrm{d}S$ 的计算表达式是

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega_i \cap \Omega_j} w_l^i w_l^j \mathrm{d}S &= \\ 2 |S_F| \iint_E w_l^i(\tau, \chi, 0) w_l^j(\chi', 0, \tau') \mathrm{d}\chi \mathrm{d}\tau, \\ \chi' &= \chi, \tau' = 1 - \chi - \tau, \\ 0 \leq \chi \leq 1 - \tau, 0 \leq \tau \leq 1. \end{aligned} \quad (\text{A6})$$

至此, 我们已将方程(13)中所有积分矩阵的表达式阐述完毕. 对于四面体的四个面 F_1 、 F_2 、 F_3 和 F_4 的外法向量 $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3$ 和 $\mathbf{n}_4$ 的计算, 有如下公式,

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_1 &= \mathbf{L}_{13} \times \mathbf{L}_{12}, \mathbf{n}_2 = \mathbf{L}_{12} \times \mathbf{L}_{14}, \\ \mathbf{n}_3 &= \mathbf{L}_{14} \times \mathbf{L}_{13}, \mathbf{n}_4 = \mathbf{L}_{23} \times \mathbf{L}_{24}, \end{aligned} \quad (\text{A7})$$

其中 $\mathbf{L}_{ij}$ 表示以顶点 i 为起点, j 为终点的向量.

表 A1 四面体单元所属四个面的定义顺序
(Dumbser and Käser, 2006)

Table A1 Face Definition on tetrahedrons
(Dumbser and Käser, 2006)

Face	Vertices		
1	1	3	2
2	1	2	4
3	1	4	3
4	2	3	4

表 A2 (a)三维坐标轴 ξ, η , 和 ζ 与面积分用到的参变量 χ 和 τ 之间的对应关系; (b)对于不同的 h , 在 Ω_i 中的参变量 χ 和 τ 与相邻单元 Ω_j 中参变量 χ' 和 τ' 的对应关系(Dumbser and Käser, 2006)

Table A2 (a) Relationship between the three-dimensional coordinate axes ξ, η , and ζ and the face parameters χ and τ used in the area integrals; (b) Relationship between the face parameters χ and τ in the tetrahedron Ω_i and the face parameters χ' and τ' in the adjacent tetrahedron Ω_j (Dumbser and Käser, 2006)				
Face	1	2	3	4
ξ	τ	χ	0	$1-\chi-\tau$
η	χ	0	τ	χ
ζ	0	τ	χ	τ
(a)				
h	1	2	3	
χ'	τ	$1-\chi-\tau$	χ	
τ'	χ	τ	$1-\chi-\tau$	
(b)				

References

Aki K, Richards P G. 2002. Quantitative Seismology. 2nd ed. Sausalito, California: University Science Books.

Atkins H L, Shu C W. 1998. Quadrature-free implementation of discontinuous Galerkin method for hyperbolic equations. *AIAA Journal*, 36(5): 775-782.

Cai W J, Zhang H, Wang Y S. 2017. Dissipation-preserving spectral element method for damped seismic wave equations. *Journal of Computational Physics*, 350: 260-279.

Carcione J M, Quiroga-Goode G. 1995. Some aspects of the physics and numerical modeling of Biot compressional waves. *Journal of Computational Acoustics*, 3(4): 261-280.

Carcione J M, Poletto F, Farina B, et al. 2018. 3D seismic modeling in geothermal reservoirs with a distribution of steam patch sizes, permeabilities and saturations, including ductility of the rock frame. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 279: 67-78.

Chabot S, Glinsky N, Mercerat E D, et al. 2018. A high-order discontinuous Galerkin method for 1D wave propagation in a nonlinear heterogeneous medium. *Journal of Computational Physics*, 355: 191-213.

Cockburn B, Shu C W. 1989. TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for conservation laws II: General framework. *Mathematics of Computation*, 52(186): 411-435.

Cockburn B, Shu C W. 2001. Runge-kutta discontinuous galerkin methods for convection- dominated problems. *Journal of Scientific Computing*, 16(3): 173-261.

De La Puente J, Käser M, Dumbser M, et al. 2007. An arbitrary high-

order discontinuous Galerkin method for elastic waves on unstructured meshes-IV. Anisotropy. *Geophysical Journal International*, 169(3): 1210-1228.

De La Puente J. 2008. Seismic wave simulation for complex rheologies on unstructured meshes [Ph. D. thesis]. Ludwig-Maximilians-Universität, doi: 10.5282/edoc.8074.

De La Puente J, Dumbser M, Käser M, et al. 2008. Discontinuous Galerkin methods for wave propagation in poroelastic media. *Geophysics*, 73(5): T77-T97.

De Basabe J D, Sen M K, Wheeler M F. 2008. The interior penalty discontinuous Galerkin method for elastic wave propagation: grid dispersion. *Geophysical Journal International*, 175(1): 83-93.

De La Puente J, Ampuero J P, Käser M. 2009. Dynamic rupture modeling on unstructured meshes using a discontinuous Galerkin method. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 114(B10): B10302, doi: 10.1029/2008JB006271.

Dong L G, Ma Z T, Cao J Z. 2000. A study on stability of the staggered-grid high-order difference method of first-order elastic wave equation. *Chinese Journal of Geophysics* (in Chinese), 43(6): 856-864.

Dumbser M, Käser M. 2006. An arbitrary high-order discontinuous Galerkin method for elastic waves on unstructured meshes-II: The three-dimensional isotropic case. *Geophysical Journal International*, 167(1): 319-336.

Dumbser M, Käser M, Toro E F. 2007. An arbitrary high-order discontinuous Galerkin method for elastic waves on unstructured meshes-V: Local time stepping and p-adaptivity. *Geophysical Journal International*, 171(2): 695-717.

Etienne V, Chaljub E, Virieux J, et al. 2010. An hp -adaptive discontinuous Galerkin finite-element method for 3-D elastic wave modelling. *Geophysical Journal International*, 183(2): 941-962.

Feng K. 1965. Difference schemes based on variational principle. *Journal of Applied and Computational Mathematics* (in Chinese), 2(4): 238-262.

Ferroni A, Antonietti P F, Mazzieri I, et al. 2017. Dispersion-dissipation analysis of 3-D continuous and discontinuous spectral element methods for the elastodynamics equation. *Geophysical Journal International*, 211(3): 1554-1574.

Furumura T, Kennett B L N, Takenaka H. 1998. Parallel 3-D pseudospectral simulation of seismic wave propagation. *Geophysics*, 63(1): 279-288.

Galis M, Moczo P, Kristek J. 2008. A 3-D hybrid finite-difference—finite-element viscoelastic modelling of seismic wave motion. *Geophysical Journal International*, 175(1): 153-184.

Geevers S, Mulder W A, Van Der Vegt J J W. 2018. Dispersion properties of explicit finite element methods for wave propagation modelling on tetrahedral meshes. *Journal of Scientific Computing*, 77(1): 372-396.

He X J, Yang D H, Wu H. 2014. Numerical dispersion and wave-field simulation of the Runge-Kutta discontinuous Galerkin

- method. *Chinese Journal of Geophysics* (in Chinese), 57(3): 906-917, doi: 10.6038/cjg20140320.
- He X J, Yang D H, Wu H. 2015. A weighted Runge-Kutta discontinuous Galerkin method for wavefield modelling. *Geophysical Journal International*, 200(3): 1389-1410.
- He X J, Yang D H, Ma X, et al. 2019a. Dispersion-dissipation analysis of the triangle-based discontinuous Galerkin method for scalar wave equation. *Geophysical Journal International*, 218(2): 1174-1198.
- He X J, Yang D H, Ma X, et al. 2019b. Symplectic interior penalty discontinuous Galerkin method for solving the seismic scalar wave equation. *Geophysics*, 84(3): T133-T145.
- He X J, Yang D H, Ma X. 2020. A weighted Runge-Kutta discontinuous Galerkin method for 3D acoustic and elastic wave-Field modeling. *Communications in Computational Physics*, 28(1): 372-400.
- Hesthaven J S, Warburton T. 2008. Nodal Discontinuous Galerkin Methods: Algorithms, Analysis, and Applications. New York: Springer.
- Igel H. 1999. Wave propagation in three-dimensional spherical sections by the Chebyshev spectral method. *Geophysical Journal International*, 136(3): 559-566.
- Igel H. 2017. Computational Seismology: A Practical Introduction. Oxford: Oxford University Press.
- Karypis G, Kumar V. 1998. Multilevelk-way partitioning scheme for irregular graphs. *Journal of Parallel and Distributed Computing*, 48(1): 96-129.
- Käser M, Dumbser M. 2006. An arbitrary high-order discontinuous Galerkin method for elastic waves on unstructured meshes—I: The two-dimensional isotropic case with external source terms. *Geophysical Journal International*, 166(2): 855-877.
- Käser M, Dumbser M. 2008. A highly accurate discontinuous Galerkin method for complex interfaces between solids and moving fluids. *Geophysics*, 73(3): T23-T35.
- Klin P, Priolo E, Seriani G. 2010. Numerical simulation of seismic wave propagation in realistic 3-D geo-models with a Fourier pseudo-spectral method. *Geophysical Journal International*, 183(2): 905-922.
- Komatitsch D, Vilotte J P. 1998. The spectral element method: an efficient tool to simulate the seismic response of 2D and 3D geological structures. *Bulletin of the Seismological Society of America*, 88(2): 368-392.
- Komatitsch D, Tromp J. 1999. Introduction to the spectral element method for three-dimensional seismic wave propagation. *Geophysical Journal International*, 139(3): 806-822.
- Komatitsch D, Vilotte J P, Vai R, et al. 1999. The spectral element method for elastic wave equations—application to 2-D and 3-D seismic problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 45(9): 1139-1164.
- Kristek J, Moczo P. 2003. Seismic-wave propagation in viscoelastic media with material discontinuities: A 3D fourth-order staggered-grid finite-difference modeling. *Bulletin of the Seismological Society of America*, 93(5): 2273-2280.
- Lähivaara T, Huttunen T. 2010. A non-uniform basis order for the discontinuous Galerkin method of the 3D dissipative wave equation with perfectly matched layer. *Journal of Computational Physics*, 229(13): 5144-5160.
- Lambrecht L, Lamert A, Friederich W, et al. 2017. A nodal discontinuous Galerkin approach to 3-D viscoelastic wave propagation in complex geological media. *Geophysical Journal International*, 212(3): 1570-1587.
- Li B Q. 2006. Discontinuous Finite Elements in Fluid Dynamics and Heat Transfer. New York, NY: Springer Science & Business Media.
- Li X F, Lu M W, Liu S L, et al. 2015. A symplectic method for structure-preserving modelling of damped acoustic waves. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 471(2183): 20150105.
- Lian X M, Zhang R X. 2013. Numerical simulation of seismic wave equation by local discontinuous Galerkin method. *Chinese Journal of Geophysics* (in Chinese), 56(10): 3507-3513, doi: 10.6038/cjg20131025.
- Liu S L, Yang D H, Dong X P, et al. 2017. Element-by-element parallel spectral-element methods for 3-D teleseismic wave modeling. *Solid Earth*, 8(5): 969-986.
- Liu Y, Sen M K. 2009. An implicit staggered-grid finite-difference method for seismic modelling. *Geophysical Journal International*, 179(1): 459-474.
- Ma S, Archuleta R J, Liu P C. 2004. Hybrid modeling of elastic P-SV wave motion: A combined finite-element and staggered-grid finite-difference approach. *Bulletin of the Seismological Society of America*, 94(4): 1557-1563.
- Meng W J, Fu L Y. 2018. Numerical dispersion analysis of discontinuous Galerkin method with different basis functions for acoustic and elastic wave equations. *Geophysics*, 83(3): T87-T101.
- Meng X, Shu Q W, Yang Y. 2015. Superconvergence of discontinuous Galerkin methods for time-dependent partial differential equations. *Scientia Sinica Mathematica*, 45(7): 1041-1060.
- Minisini S, Zhebel E, Kononov A, et al. 2013. Local time stepping with the discontinuous Galerkin method for wave propagation in 3D heterogeneous media. *Geophysics*, 78(3): T67-T77.
- Moczo P, Kristek J, Halada L. 2000. 3D fourth-order staggered-grid finite-difference schemes; stability and grid dispersion. *Bulletin of the Seismological Society of America*, 2000, 90(3): 587-603.
- Moczo P, Kristek J, Vavryčuk V, et al. 2002. 3D heterogeneous staggered-grid finite-difference modeling of seismic motion with volume harmonic and arithmetic averaging of elastic moduli and densities. *Bulletin of the Seismological Society of America*, 92(8): 3042-3066.
- Moczo P, Kristek J, Galis M, et al. 2011. 3-D finite-difference, finite-element, discontinuous-Galerkin and spectral-element schemes analysed for their accuracy with respect to P-wave to S-wave speed ratio. *Geophysical Journal International*, 187(3): 1645-1667.

- Mou Y G, Pei Z L. 2005. Seismic Numerical Modeling for 3-D Complex Media (in Chinese). Beijing: Petroleum Industry Press.
- Mu D W, Chen P, Wang L Q. 2013a. Accelerating the discontinuous Galerkin method for seismic wave propagation simulations using multiple GPUs with CUDA and MPI. *Earthquake Science*, 26(6): 377-393.
- Mu D W, Chen P, Wang L Q. 2013b. Accelerating the discontinuous Galerkin method for seismic wave propagation simulations using the graphic processing unit (GPU)—single-GPU implementation. *Computers & Geosciences*, 51: 282-292.
- Mulder W A, Zhebel E, Minisini S. 2014. Time-stepping stability of continuous and discontinuous finite-element methods for 3-D wave propagation. *Geophysical Journal International*, 196(2): 1123-1133.
- Niu B H, Sun C Y. 2007. Half-Space Homogeneous Isotropic—Viscoelastic Medium and Seismic Wave Propagation (in Chinese). Beijing: Geological Publishing House.
- Pelties C, De La Puente J, Ampuero J P, et al. 2012. Three-dimensional dynamic rupture simulation with a high-order discontinuous Galerkin method on unstructured tetrahedral meshes. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 117(B2): B02309, doi: 10.1029/2011JB008857.
- Pelz R B. 1991. The parallel Fourier pseudospectral method. *Journal of Computational Physics*, 92(2): 296-312.
- Reed W H, Hill T R. 1973. Triangular mesh methods for the neutron transport equation. Los Alamos Scientific Laboratory Report. LA-UR, 473-479. Los Alamos Scientific Laboratory, N. Mex, USA.
- Rivière B. 2008. Discontinuous Galerkin methods for solving elliptic and parabolic equations; theory and implementation. // *Frontiers in Applied Mathematics*. Houston, Texas: Rice University.
- Rivière B, Wheeler M F. 2003. Discontinuous finite element methods for acoustic and elastic wave problems. *Contemporary Mathematics*, 329: 271-282, doi: 10.1090/conm/329.
- Shragge J, Tapley B. 2017. Solving the tensorial 3D acoustic wave equation: a mimetic finite-difference time-domain approach. *Geophysics*, 82(4): T183-T196.
- Tromp J, Komatitsch D, Liu Q Y. 2008. Spectral-element and adjoint methods in seismology. *Communications in Computational Physics*, 3(1): 1-32.
- Versteeg R J, Grau G. 1991. The Marmousi Experience. // 61st Ann. Internat Mtg., Soc. Expi. Geophys., Expanded Abstracts.
- Wang J, Yang D H, Jing H, et al. 2019a. Full waveform inversion based on the ensemble Kalman filter method using uniform sampling without replacement. *Science Bulletin*, 64(5): 321-330.
- Wang N, Li J H, Borisov D, et al. 2019b. Modeling three-dimensional wave propagation in anelastic models with surface topography by the optimal strong stability preserving Runge-Kutta method. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 124(1): 890-907.
- Wang W S, Zhang H, Li X F. 2013. Review on application of the discontinuous Galerkin method for modeling of the seismic wavefield. *Progress in Geophysics* (in Chinese), 28(1): 171-179.
- Wilcox L C, Stadler G, Burstedde C, et al. 2010. A high-order discontinuous Galerkin method for wave propagation through coupled elastic-acoustic media. *Journal of Computational Physics*, 229(24): 9373-9396.
- Xue Z, Dong L G, Li X B, et al. 2014. Discontinuous Galerkin finite-element method for elastic wave modeling including surface topography. *Chinese Journal of Geophysics* (in Chinese), 57(4): 1209-1223, doi: 10.6038/cjg20140418.
- Yang D, Song G, Lu M. 2007. Optimally accurate nearly analytic discrete scheme for wave-field simulation in 3D anisotropic media. *Bulletin of the Seismological Society of America*, 97(5): 1557-1569.
- Yang D H, Wang L. 2010. A split-step algorithm for effectively suppressing the numerical dispersion for 3D seismic propagation modeling. *Bulletin of the Seismological Society of America*, 100(4): 1470-1484.
- Yang D H, He X J, Ma X, et al. 2016. An optimal nearly analytic discrete-weighted Runge-Kutta discontinuous Galerkin hybrid method for acoustic wavefield modeling. *Geophysics*, 81(5): T251-T263.
- Ye R C, De Hoop M V, Petrovitch C L, et al. 2016. A discontinuous Galerkin method with a modified penalty flux for the propagation and scattering of acousto-elastic waves. *Geophysical Journal International*, 205(2): 1267-1289.
- Zhang J B, Yang D H, He X J, et al. 2018. Discontinuous Galerkin method for solving wave equations in two-phase and viscoelastic media. *Chinese Journal of Geophysics* (in Chinese), 61(3): 926-937, doi: 10.6038/cjg2018L0095.
- Zhang J F, Liu T L. 2002. Elastic wave modelling in 3-D heterogeneous media: 3-D grid method. *Geophysical Journal International*, 150(3): 780-799.
- Zhang J F, Gao H W. 2009. Elastic wave modelling in 3-D fractured media: an explicit approach. *Geophysical Journal International*, 177(3): 1233-1241.
- Zhang J H, Wang W M, Zhao L F, et al. 2007. Modeling 3-D scalar waves using the Fourier finite-difference method. *Chinese Journal of Geophysics* (in Chinese), 50(6): 1854-1862.
- Zhang W, Zhang Z G, Chen X F. 2012. Three-dimensional elastic wave numerical modelling in the presence of surface topography by a collocated-grid finite-difference method on curvilinear grids. *Geophysical Journal International*, 190(1): 358-378.
- Zhang Y J, Gao J H, Han W M, et al. 2019. A discontinuous Galerkin method for seismic wave propagation in coupled elastic and poroelastic media. *Geophysical Prospecting*, 67(5): 1392-1403.

附中文参考文献

- 董良国, 马在田, 曹景忠. 2000. 一阶弹性波方程交错网格高阶差分解法稳定性研究. *地球物理学报*, 43(6): 856-864.
- 贺茜君, 杨顶辉, 吴昊. 2014. 间断有限元方法的数值频散分析及其波场模拟. *地球物理学报*, 57(3): 906-917, doi: 10.6038/cjg20140320.
- 李庆扬, 王能超, 易大义. 2008. 5 版. 数值分析. 北京: 清华大学出版社.
- 廉西猛, 张睿璇. 2013. 地震波动方程的局部间断有限元方法数值模拟. *地球物理学报*, 56(10): 3507-3513, doi: 10.6038/

cjg20131025.

孟雄, 舒其望, 杨扬. 2015. 发展型偏微分方程间断有限元方法的超收敛性 献给林群教授 80 华诞. 中国科学: 数学, 45(7): 1041-1060.

牟永光, 裴正林. 2005. 三维复杂介质地震数值模拟. 北京: 石油工业出版社.

牛滨华, 孙春岩. 2007. 半无限空间各向同性黏弹性介质与地震波传播. 北京: 地质出版社.

汪文帅, 张怀, 李小凡. 2013. 间断的 Galerkin 方法在地震波场数值模拟中的应用概述. 地球物理学进展, 28(1): 171-179.

薛昭, 董良国, 李晓波等. 2014. 起伏地表弹性波传播的间断 Galerkin 有限元数值模拟方法. 地球物理学报, 57(4): 1209-1223, doi: 10.6038/cjg20140418.

张金波, 杨顶辉, 贺茜君等. 2018. 求解双相和黏弹性介质波传播方程的间断有限元方法及其波场模拟. 地球物理学报, 61(3): 926-937, doi: 10.6038/cjg2018L0095.

张金海, 王卫民, 赵连锋等. 2007. 傅里叶有限差分法三维波动方程正演模拟. 地球物理学报, 50(6): 1854-1862.

张铁. 2015. 间断有限元理论与方法. 北京: 科学出版社.

(本文编辑 胡素芳)