间断有限元求解地震波动方程的研究进展

常芸凡

指导老师：杨顶辉教授

清华大学数学科学系

2021 年 1 月 9 日

1. DG 方法的基本原理及数值实验
2. 特征值摄动法提高 CFL 条件数
3. 空间滤波提高 CFL 条件数 (正在尝试)
4. 下一步工作安排

DG 方法的发展历史

间断有限元 (Discontinuous Galerkin: DG) 已经在很多领域得到了广泛的应用，近些年也引起了地球物理学家的注意。

DG 方法最早是由 [Reed and Hill, 1973] 在求解中子运输方程时提出。经众多学者的发展，目前主要有两大类 DG 方法：基于数值通量形式的 DG 方法和基于内点罚函数的 DG 方法。

基于数值通量形式的 DG 方法 (以声波方程为例)

我们以二维声波方程为例介绍基于通量函数的 DG 方法。二维声波方程的一般形式为:

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

其中 c 为声速，$f(t)$ 为震源函数。

声波方程的双曲守恒形式

引入变量 p q, 使它们分别满足:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial x} \quad , \quad \frac{\partial q}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial z}$$

则方程 (1) 积分后可改写为:

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \nabla \cdot F(W) = \hat{f}, \tag{2}$$

其中 $W = (u, p, q)^{\mathrm{T}}, F(W) = \begin{pmatrix} -c^2 p & -c^2 q \\ -u & 0 \\ 0 & -u \end{pmatrix}, \hat{f} = \begin{pmatrix} f \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

仿照 Hu et al. (1999) 中的写法，将 $F(W)$ 写成如下形式:

$$F(W) = (A_1 W, A_2 W)$$

其中:

$$A_1 = \begin{bmatrix} 0 & -c^2 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad A_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -c^2 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

弱形式

设区域为 Ω, 首先将 Ω 划分为互不相交的单元 $\{\Omega_i\}$ 。我们采用的试验函数空间为:

$$V_h = \left\{ v \in L^1(\Omega) : v|_{\Omega_i} \in P^k(\Omega_i) \right\}$$

其中 $P^k(\Omega_i)$ 表示单元 Ω_i 上至多 k 次多项式。
由变分法，我们将问题转化为

$$\int_{\Omega_i} \left(v\frac{\partial \boldsymbol{W}}{\partial t} - \boldsymbol{F}(\boldsymbol{W}) \cdot \boldsymbol{\nabla} v \right) \mathrm{d}V + \int_{\partial\Omega_i} v\hat{\boldsymbol{F}}(\boldsymbol{W}_i, \boldsymbol{W}_e, \boldsymbol{n})\,\mathrm{d}S = \int_{\Omega_i} \hat{\boldsymbol{f}} v\,\mathrm{d}V \tag{3}$$

其中 $\hat{\boldsymbol{F}}(\boldsymbol{W}_i, \boldsymbol{W}_e, \boldsymbol{n})$ 表示依赖于边界内外两侧的数值通量。
采用局部 Lax-Friedrichs 通量，

$$\hat{F}\left(W^{\text{int}}, W^{\text{ext}}, n\right) = \hat{A}^{\text{int}} W^{\text{int}} + \hat{A}^{\text{ext}} W^{\text{ext}}$$

其中 $\hat{A}^{\text{int}} = \frac{1}{2}(A_1 n_1 + A_2 n_2 + cI)$, $\hat{A}^{\text{ext}} = \frac{1}{2}(A_1 n_1 + A_2 n_2 - cI)$, $n = (n_1, n_2)^T$

我们选取 [Cockburn and Shu, 1991] 中使用的基于一维 Legendre 多项式 $\{\phi_l(x), x \in [-1,1], l=0,1,\cdots\}$, 并通过张量积形式构造基函数:

$$\{\phi_l(x)\phi_m(y) : x, y \in [-1,1]; l, m, = 0, 1, \cdots, k; l+m \leqslant k\}$$

其中 k 是基函数空间的多项式阶数。
我们以矩形单元为例，令近似解所在空间与试验函数空间相同，对方程 (3) 中的 $\boldsymbol{W}$ 在矩形单元 Ω_i 上进行基函数展开:

$$\boldsymbol{W}|_{\Omega_i} = \sum_{l=0}^{d_{loc}-1} C_l^{n,m}(t) w_l^{n,m}$$

其中 $C_l^{n,m}(t)$ 是向量值函数，$w_l^{n,m}$ 是基函数，d_{loc} 为基函数的个数。我们将上式带入方程 (3) 中，并且将 v 用 $w_{l'}^{n,m}$ 代替，可得常微分方程组:

数值求解

$$\frac{\partial C^{n,m}(t)}{\partial t} = L\left(C^{n,m}(t)\right) + \bar{F} \tag{4}$$

其中 L 表示与方程 (3) 中的通量 F 和数值通量 $\hat{F}$ 有关的算子，$\bar{F}$ 表示与震源有关的项。写成矩阵形式有

$$\begin{aligned} \boldsymbol{Q}\frac{\partial \boldsymbol{C}^{n,m}}{\partial t} &+ \frac{2}{h}\left[\boldsymbol{N}_0\boldsymbol{C}^{n,m} + \boldsymbol{N}_{-1}\boldsymbol{C}^{n-1,m} + \boldsymbol{N}_{+1}\boldsymbol{C}^{n+1,m}\right] \\ &+ \frac{2}{h}\left[\boldsymbol{M}_0\boldsymbol{C}^{n,m} + \boldsymbol{M}_{-1}\boldsymbol{C}^{n,m-1} + \boldsymbol{M}_{+1}\boldsymbol{C}^{n,m+1}\right] = \hat{\boldsymbol{F}} \end{aligned} \tag{5}$$

其中 $\boldsymbol{C}^{n,m}(t) = \left(C_0^{n,m}, C_1^{n,m}, \cdots, C_{d_{\mathrm{loc}}-1}^{n,m}\right)^{\mathrm{T}}$，各矩阵的具体表达形式参考 [He et al., 2015]

时间离散格式

对于上述方程, 我们用 TVD Runge-Kutta 时间离散格式进行说明，3 阶 TVD RK 时间离散格式为:

$$
\begin{cases}
\boldsymbol{C}^{(0)} = \boldsymbol{C}^{(n)} \\
\boldsymbol{C}^{(1)} = \boldsymbol{C}^{(0)} + \Delta t L\left(\boldsymbol{C}^{(0)}\right) + \Delta \overline{\boldsymbol{F}}(t^n) \\
\boldsymbol{C}^{(2)} = \frac{3}{4}\boldsymbol{C}^{(0)} + \frac{1}{4}\boldsymbol{C}^{(1)} + \frac{1}{4}\Delta t L\left(\boldsymbol{C}^{(1)}\right) + \frac{1}{4}\Delta t \overline{\boldsymbol{F}}(t^n + \Delta t) \\
\boldsymbol{C}^{(n+1)} = \frac{1}{3}\boldsymbol{C}^{(0)} + \frac{2}{3}\boldsymbol{C}^{(2)} + \frac{2}{3}\Delta t L\left(\boldsymbol{C}^{(2)}\right) + \frac{2}{3}\Delta t \overline{\boldsymbol{F}}\left(t^n + \frac{\Delta t}{2}\right)
\end{cases}
$$

我们选定合适的初值迭代计算即可得到原方程数值解。

数值稳定性

为进行数值稳定性和数值频散分析，将 (5) 的解写成简谐波的形式：

$$\boldsymbol{C}^{n,m}(t) = \boldsymbol{C}(t)\exp[\mathrm{i}(k\cos\theta nh + k\sin\theta mh)]$$

其中 k 代表波数，θ 代表波传播方向与 x 轴的夹角。
利用 3 阶精度的 TVD 时间离散格式对方程 (5) 进行时间离散，得到:

$$\boldsymbol{C}^{n+1} = \left(I + \Delta t\boldsymbol{S} + \frac{1}{2}\Delta t^2\boldsymbol{S}^2 + \frac{1}{6}\Delta t^3\boldsymbol{S}^3\right)\boldsymbol{C}^n$$

其中

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S} = -\boldsymbol{Q}^{-1}[&\frac{2}{h}\left(\boldsymbol{N}_0 + \boldsymbol{N}_{-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cos\theta h} + \boldsymbol{N}_{+1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\cos\theta h}\right)\\ &+\frac{2}{h}\left(\boldsymbol{M}_0 + \boldsymbol{M}_{-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\sin\theta h} + \boldsymbol{M}_{+1}\mathrm{e}^{ik\sin\theta h}\right)]\end{aligned}$$

数值稳定性

为了保持数值算法的稳定性，必须满足 $\alpha = c\Delta t/h \leq \alpha_{\max}$，其中 $\alpha_{\max}$ 即是最大库朗数。(因为迭代矩阵 $I + \Delta t\boldsymbol{S} + \frac{1}{2}\Delta t^2\boldsymbol{S}^2 + \frac{1}{6}\Delta t^3\boldsymbol{S}^3$ 的特征值应该小于 1)

例如：P^1 RKDG 方法需满足 $c\frac{\Delta t}{h} \leq 0.316, P^2$ RKDG 方法需满足 $c\frac{\Delta t}{h} \leq 0.166$ 。这导致我们的步长不能够取得过大，计算速度较慢。

双层声波模型

震源 R 位于 $(2\ \mathrm{km}, 1.6\ \mathrm{km})$ 处，震源函数为 $f = -211.2 \cdot (13.2t - 1) \cdot e^{-8\cdot(13.2t-1)^2}$. 选取 $20\ \mathrm{m} \times 20\ \mathrm{m}$ 的矩形网格单元，选取时间步长 $\Delta t = 1.4\ \mathrm{ms}$。

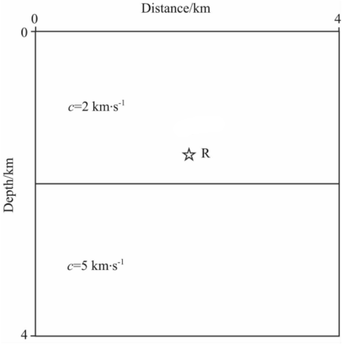

图 1: 双层声波模型示意图，星形符号表示震源位置

双层声波模型

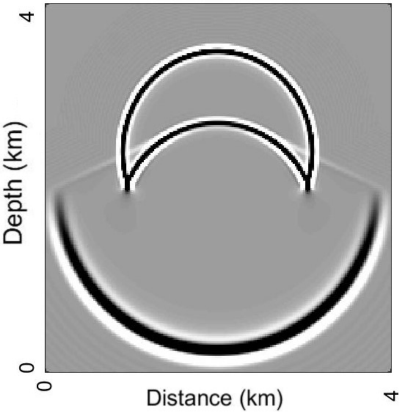

图 2: 双层声波模型的波场快照， $T = 0.6\ s$

Lamb 模型

本例中的源函数为

$$f(t) = (1 - 2(\pi f_0(t - t_0))^2)e^{-\pi^2 f_0^2 (t-t_0)^2} \tag{6}$$

其中频率 $f_0 = 15Hz, t_0 = 1/f_0$。模型参数如图3。

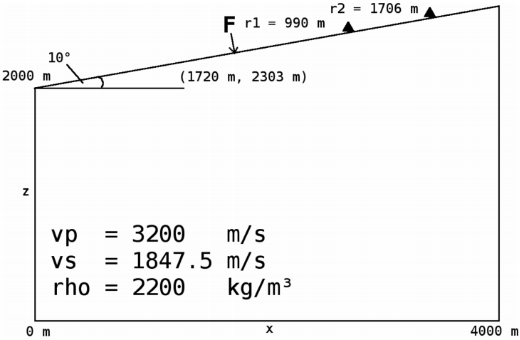

图 3: Lamb 模型基本参数设置

我们用了 23864 个三角网格离散化模型，网格的平均边长为 30 m，时间步长设为 $\Delta t = 4.6875 \times 10^{-4}\ s$

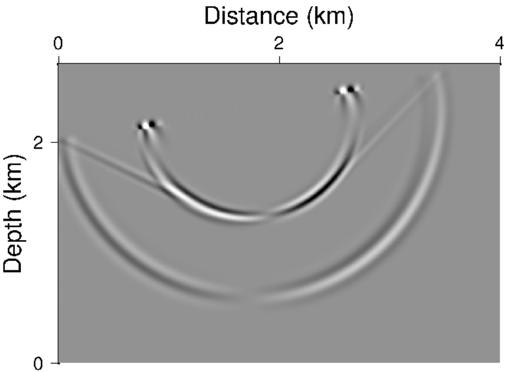

图 4: Lamb 模型的波场快照，$T = 0.6\ s$

1. DG 方法的基本原理及数值实验
2. 特征值摄动法提高 CFL 条件数
3. 空间滤波提高 CFL 条件数 (正在尝试)
4. 下一步工作安排

特征值摄动法概述

对于给定的时间步长，在 CFL 稳定极限内，增长矩阵的特征值应该在单位圆内分布; 否则，一些特征值会分布在单位圆之外，就会引入不稳定现象。特征值扰动可以对不稳定的特征值进行归一化处理，从而可以保证更新矩阵的稳定性。[Gao et al., 2018]

2 维波方程为

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + s \tag{7}$$

其中 $u(x, z, t)$ 为波场， $c(x, z)$ 为波速, $s\,(x_s, z_s, t)$ 为点 (x_s, z_s) 的源函数。

则二阶有限差分格式的矩阵形式为

$$\begin{bmatrix} U^{n+1} \\ V^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 + c^2\Delta t^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) & -\mathbf{I} \\ \mathbf{I} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U^n \\ V^n \end{bmatrix} + c^2\Delta t^2 \begin{bmatrix} S^n \\ 0 \end{bmatrix} \tag{8}$$

其中 U^n 为时刻 $n\Delta t$ 的波场，$V^{n+1} = U^n$，S^n 为包含源函数信息的向量。

特征值摄动原理

记迭代矩阵 $\begin{bmatrix} 2 + c^2\Delta t^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) & -\mathbf{I} \\ \mathbf{I} & \mathbf{0} \end{bmatrix} = A$，那么稳定性条件为 A 的特征值小于等于 1.

CFL 条件可写成

$$\frac{c\Delta t}{h} \leq \frac{1}{\sqrt{\sum_{m=1}^{M} a_{2m-1}}}$$

其中 $2M$ 为空间离散的阶数，a_{2m-1} 为有限差分系数。

如四阶有限差分格式 $c = 4000$ m/s，空间网格为 $\Delta x = \Delta z = h = 10$ m, 那么最大时间步长为 $\Delta t_{\max} = 1.530$ ms.

特征值摄动原理

然而 A 的不稳定特征值对系统的影响较小，可以通过将不稳定特征值扰动为保证方程的稳定性。[Gao et al., 2018]

算法

1. 对矩阵 $\mathbf{A}$ 进行特征值分解

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\Lambda\mathbf{U}^{-1}$$

其中矩阵 $\mathbf{U}$ 为 $\mathbf{A}$ 的特征向量组成的矩阵, Λ 为一对角阵，其元素 λ_i 为 $\mathbf{A}$ 的特征值.

2. 扰动 $\mathbf{A}$ 的不稳定的特征值 $|\lambda_i| > 1$:

$$\hat{\lambda}_i = \frac{\lambda_i}{|\lambda_i|}$$

得到新的对角矩阵 $\hat{\Lambda}$ 和 $\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{U}\hat{\Lambda}\mathbf{U}^{-1}$，用新的矩阵进行时间步迭代。

计算量分析

在特征值扰动后，更新矩阵 **A** 不再稀疏，因此需要大量的内存和计算工作。例如，当网格点为 121×201 时需要 2.20 GB 内存，网格点为 201×201 时需要 6.08 GB 内存。

由于 **A** 的阶数为 $n = 2 \times N_x \times N_y$，进行特征值分解的计算量为 $O(n^3)$，这对于细网格或者说三维模型来说，非常不现实。[Gao et al., 2018]

空间滤波提高 FDTD 方法的 CFL 条件数

[Sarris and Costas, 2011] 中指出，当时间步长超过 finite-difference time-domain(FDTD) 方法的已知的 Courant 稳定极限时，可以通过滤除该步产生的不稳定的空间谐波来控制。

1 维 FDTD 方法的 CFL 条件数

假设 1-D FDTD 格式的单元长度 Δ 和时间步长 Δt，那么稳定性条件为

$$\sin\frac{\omega\Delta t}{2}=c\frac{\Delta t}{\Delta}\sin\frac{\tilde{k}\Delta}{2} \tag{9}$$

其中 c 为波速，$\tilde{k}$ 为波数。如果 (9) 的右边小于或等于 1，那么实数 ω 就可以从这个方程中确定，意味着有稳定解。
1-D FDTD 格式的 CFL 条件为

$$c\frac{\Delta t}{\Delta}\leq 1 \tag{10}$$

可知式 (10) 为稳定的充分条件。

提高 1 维 FDTD 方法的 CFL 条件数

如果我们能限制 $\tilde{k}$ 的范围使得 $0 < \tilde{k} \le \tilde{k}_{max}$，那么由 (9) 我们可知稳定条件变为

$$\sin\frac{\tilde{k}_{\max}\Delta}{2}c\frac{\Delta t}{\Delta} \le 1 \Leftrightarrow \Delta t \le \frac{\Delta}{c\sin\frac{\tilde{k}_{\max}\Delta}{2}} \tag{11}$$

这意味着我们可以通过因子 $\mathrm{CE} = 1/\sin\left(\tilde{k}_{\max}\Delta/2\right)$ 来提高 CFL 条件数。因此，如果滤除了感兴趣的频谱之外的空间频率，则可以应用更大的时间步长。
此外，被滤除的高频空间频率对 FDTD 精度的影响是很小的 [Sarris and Costas, 2011]。

三维情形的 CE 因子

类似的我们有三维情形的稳定性条件

$$\sin\frac{\omega\Delta t}{2} = c\Delta t\sqrt{\frac{\sin^2\frac{\tilde{k}_x\Delta x}{2}}{\Delta x^2} + \frac{\sin^2\frac{\tilde{k}_y\Delta y}{2}}{\Delta y^2} + \frac{\sin^2\frac{\tilde{k}_z\Delta z}{2}}{\Delta z^2}} \tag{12}$$

其中 $\tilde{\tilde{k}} = \hat{x}\tilde{k}_x + \hat{y}\tilde{k}_y + \hat{z}\tilde{k}_z$ 为波矢量。对于均匀网格 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \Delta$，如果我们可以限制波数 $|\tilde{k}| \leq \tilde{k}_{\max}$，那么我们有稳定性条件

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{c\sin\frac{\tilde{k}_{\max}\Delta}{2}\sqrt{3}} = \mathrm{CE}\times\Delta t_{\max}^{3D-FDTD} \tag{13}$$

这里的 $\Delta t_{\max}^{3D-FDTD}$ 为满足 CFL 条件的最大步长。

空间滤波提高 CFL 条件数

定义低通滤波

$$\overline{F}(\bar{k}) = \begin{cases} 1, & \text{for } \sqrt{\tilde{k}_x^2 + \tilde{k}_y^2 + \tilde{k}_z^2} \leq \tilde{k}_{\max} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \tag{14}$$

这里的 $\tilde{k}_{\max}$ 可以根据所需的 CE 因子确定。通过低通滤波我们可以做到提高步长。

算法

1. 在计算出第 n 个时间步的波场后 $U^n(r, n\Delta t)$ 后，我们将其进行快速傅里叶变换 (FFT) 转换到频率域 $E^n(k, n\Delta t)$；
2. 进行滤波操作：$\hat{E}^n(k, n\Delta t) = \overline{F}(k) \cdot E^n(k, n\Delta t)$。这里的 $\cdot$ 代表 Hadamard 积；
3. 应用快速傅里叶逆变换将 $\hat{E}^n(k, n\Delta t)$ 转回到空间域上，得到 $\hat{U}^n(r, n\Delta t)$；
4. 将 $\hat{U}^n(r, n\Delta t)$ 作为第 n 个时间步的波场，并作为输入计算下一时间步。

空间滤波法在 DG 上的分析

1. 如果 DG 方法的网格数是 N，那么 DG 方法的参数是 $O(N)$ 的，每步更新波场的计算量为 $O(N)$ 的 (前面的系数比较大)，而利用之前的算法我们更新每个时间步额外需要的计算量为 $O(N\log N)$ 的，但是我们可以提高步长 $\mathrm{CE} = 1/\sin\left(\tilde{k}_{\mathrm{max}}\Delta/2\right)$ 倍，提高计算效率。
2. 此外我们可以只对步长比较小的网格做滤波操作，而对 CFL 条件较为宽松的网格不进行滤波操作。
3. 在 [Sarris and Costas, 2011] 一文中也说明，我们可以不用在每个时间步都做滤波变换，可以通过减小 $\tilde{k}_{\mathrm{max}}$ 来进一步降低使用低通滤波的频率。

下一步工作安排

- 继续完成低通滤波的 DG 方法的程序，验证该方法是否可以提高 CFL 条件数。
- 在完成上述工作后考虑深度学习加速 DG 方法求解的实现。

参考文献 I

[Cockburn and Shu, 1991] Cockburn, B. and Shu, C. W. (1991).
The runge-kutta local p1-discontinuous-galerkin finite element method for scalar conservation laws.
ESAIM Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 25(3).

[Gao et al., 2018] Gao, Y., Zhang, J., and Yao, Z. (2018).
Removing the stability limit of the explicit finite-difference scheme with eigenvalue perturbation.
Geophysics, 83(6):1–25.

[He et al., 2015] He, X., Yang, D., and Wu, H. (2015).
A weighted runge-kutta discontinuous galerkin method for wavefield modelling.
Geophys.j.int.

参考文献 II

[Reed and Hill, 1973] Reed, W. and Hill, T. (1973).
Triangular mesh methods for the neutron transport equation.
Los Alamos Report La.

[Sarris and Costas, 2011] Sarris and Costas, D. (2011).
Extending the stability limit of the fdtd method with spatial filtering.
IEEE Microwave and Wireless Components Letters, 21(4):176–178.

Thanks!