中国科学: 地球科学 2014 年 第 44 卷 第 2 期: 283 ~ 291
www.scichina.com earth.scichina.com
《中国科学》杂志社
SCIENCE CHINA PRESS

论 文

求解地震波方程的一类二阶优化辛格式

刘少林[①*], 李小凡[①], 汪文帅[①②], 刘有山[①], 张美根[①], 张欢[①]

① 中国科学院地质与地球物理研究所, 中国科学院地球深部重点实验室, 北京 100029;
② 宁夏大学数学与计算机科学学院, 银川 750021
* E-mail: liushaolin@mail.iggcas.ac.cn

收稿日期: 2013-03-04; 接受日期: 2013-06-07; 网络版发表日期: 2014-01-13
国家自然科学基金项目(批准号: 41174047, 40874024, 41204041)资助

摘要 通过将地震波位移运动方程变换至 Hamilton 体系, 引入广义动量和广义坐标, 并定义系统动能和势能的 Lie 算子, 构造了一类新的适用于高效长时间地震波模拟的二阶辛格式, 同时将此格式用 Baker-Campbell-Hausdorff(BCH)公式展开, 基于截断误差原理极小得到了三组优化系数. 在与常见辛格式对比中, 从理论上和数值实验中分析了本文构造的这类优化二阶格式高精度高效率性; 在与经典 Newmark 格式对比中, 从长时间计算角度论证了本文格式具有长时间地震波计算能力; 在非均匀介质地震波模拟中, 本文格式与三阶辛格式得到了一致的地面合成地震记录和单道地震记录.

关键词
弹性波
辛格式
截断误差
地震波场

地震波数值模拟技术在地震勘探和在研究地震波传播规律中发挥着巨大的作用(龙桂华等, 2011), 常用的地震波正演模拟方法可以分为三大类, 即地震波方程直接解法(Keiswetter 等, 1996; 龙桂华等, 2010; 张美根等, 2002; Komatitsch 和 Tromp, 2002)、积分方程法(Pao 和 Varatharajulu, 1976)以及射线法(Červený, 2001), 这些方法都有各自的优缺点, Carcione 等(2002)和 Yang 等(2007)对这些方法做了回顾和讨论. 随着研究对象的复杂程度提高, 使得有必要研究高精度高效的数值模拟方法.

就地震波方程直接解法而言, 已经建立起多种方法, 如经典的有限差分法(Keiswetter 等, 1996; Fei 和 Larner, 1995; Virieux, 1984)、伪谱法(龙桂华等, 2011)、有限元法(张美根等, 2002)和谱元法(Komatitsch 和 Tromp, 2002)等. 这些方法在时间离散上, 通常采用中心差分法近似时间的一阶、二阶微分. 短时间地震波模拟时, 时间精度为二阶的中心差分法能得到较好的数值结果(罗明秋等, 2001a), 但随着时间增加, 中心差分法数值解表现出较大偏差(李一琼等, 2012). 利用空间微分替代高阶时间微分的 Lax-Wendroff 法, 在短时间内有较高的精度, 随着时间增加此方法振幅误差较大(Chen, 2009). 四阶的 Runge-Kutta 方法(陈山等, 2010)与 Yang 等(2003)发展的 NAD 方法结合能有效压制数值频散, 短时间内有较高的精度, 但 Runge-Kutta 本身的数值耗散性(秦孟兆和陈景波, 2000)使其不具备长时间地震波模拟能力. 在全球尺度地震波模拟时, 由于地球本身尺度较大, 必然涉及较长时间的地震波模拟, Komatitsch 等(2002)用显式的 Newmark 格式以及预估校正的 Newmark 格式作为地震波随时间演进格式, 随着时间步增多较大的误差累积无法避免.

为了满足长时间地震波模拟的需要, Qin 等(1990)

中文引用格式: 刘少林, 李小凡, 汪文帅, 等. 2014. 求解地震波方程的一类二阶优化辛格式. 中国科学: 地球科学, 44: 283–291
英文引用格式: Liu S L, Li X F, Wang W S, et al. 2014. A new kind of optimal second-order symplectic scheme for seismic wave simulations. Science China: Earth Sciences, doi: 10.1007/s11430-013-4805-0

首先将辛格式运用至一维波动方程的求解之中, 波动方程随时间的演进在 Hamilton 体系下表现为每一时刻相流至下一时刻相流的映射, 此时的映射为一单参数的辛变换(罗明秋等, 2001a), 辛算法能严格的保持 Hamilton 系统的辛结构不变, 大量的数值实验表明, 辛算法具有长时间计算能力和数值稳定性(冯康和秦孟兆, 2003). Luo 等(1999)和罗明秋等(2001a; 2001b)先后发展了地震波动方程的显式和隐式辛算法, 隐式辛算法涉及大型矩阵的求逆, 需要较大的计算量. Chen(2007)主要讨论了地震波模拟中的显式辛格式, 如显式的四阶 Nyström 格式和三阶分部的 Runge-Kutta 辛格式. 李一琼等(2011)将三阶分部的 Runge-Kutta 辛格式与褶积微分算子结合并运用至地震波模拟中得到了较好的长时间地震波模拟效果.

就地震波方程直接解法而言, 虽然三阶或高阶的辛格式能得到较高的长时间地震波模拟精度, 但由于每一个时间步中间步过多, 即每一步的内迭代次数需三次或多次, 使得计算效率较低, 为了满足高效地震波模拟需要, 本文运用 Hamilton 系统下动能和势能的 Lie 算子(Li 和 Wu, 2011a, 2011b)设计了一类新的二阶分部 Runge-Kutta 辛格式, 运用指数算子展开的 BCH 公式(Casas 和 Murua, 2009), 基于截断误差极小原理确定此格式的优化辛系数, 通过和常见辛格式对比, 从截断误差算子系数平方和角度分析了本文格式的精度. 在数值算例中与多种格式对比, 从计算效率和数值精度等方面证实了本文格式的计算优势.

1 优化二阶辛格式方法构造

1.1 保结构时间离散格式

地震波在地球介质中的传播, 若不考虑介质对地震波的吸收以及介质的各向异性, 只考虑各向同性弹性介质的情形, 不计体力情况下齐次弹性波运动方程可以表示如下:

$$(\lambda+\mu)\nabla\nabla\cdot\boldsymbol{U}+\mu\Delta\boldsymbol{U}=\rho\ddot{\boldsymbol{U}}, \tag{1}$$

式中, $\boldsymbol{U}=(u,w,v)$ 为位移向量, u,w 为水平方向位移, v 为垂直方向位移, ρ 为介质密度, λ,μ 为拉梅常数, $\ddot{\boldsymbol{U}}$ 表示位移向量的二阶时间导数, $\Delta=\dfrac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial x_2^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial x_3^2}$.

若不考虑质量随时间的变化, (1)式可以写成如下常微分方程形式:

$$\frac{\mathrm{d}^2\mathbf{U}}{\mathrm{d}t^2}=\mathbf{D}\mathbf{U}, \tag{2}$$

式中, $\mathbf{D}=\dfrac{1}{\rho}[(\lambda+\mu)\nabla\nabla\cdot+\mu\Delta]$ 为微分算子.

对于 n 维动力学系统, 引入广义动量 $p=\dot{\mathbf{U}}$, 广义坐标 $q=\mathbf{U}$, 广义动量和广义坐标组成的 $2n$ 维相空间为 $\mathbf{Z}=(p,q)'$, 则相空间中运动方程(2)随时间演化的 Hamilton 正则方程为

$$\frac{\partial\mathbf{Z}}{\partial t}=\boldsymbol{J}^{-1}\frac{\partial\mathbf{H}}{\partial\mathbf{Z}},\boldsymbol{J}=\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{I}_n\\ -\boldsymbol{I}_n & 0\end{pmatrix}, \tag{3}$$

式中, $p,q\in R^n$, $\boldsymbol{J}$ 为 $2n$ 维反对称矩阵, $\boldsymbol{J}^{-1}$ 为矩阵 $\boldsymbol{J}$ 的逆矩阵, $\boldsymbol{I}_n$ 为 n 阶单位矩阵, $\mathbf{H}$ 为 Hamilton 函数, 可以表示如下:

$$\mathbf{H}(p,q)=\iint_{\Sigma}\left(\frac{1}{2}p^2-\frac{1}{2}Dq^2\right)\mathrm{d}\Omega=T(p)+V(q), \tag{4}$$

式中, $T(p)$, $V(q)$ 分别为 Hamilton 体系广义动能和广义势能. $\mathbf{H}$ 描述了系统的整体能量, 若 $\mathbf{H}$ 与时间无关, 则系统能量守恒. 在辛变换下 Hamilton 方程的正则形式(3)式不变(冯康和秦孟兆, 2003), Hamilton 动力学的基本定理是: 对于任意的 Hamilton 体系必定依赖于 $\mathbf{H}$ 以及初始时刻和 t 时刻辛变换族 $\mathbf{G}_{\mathbf{H}}^{t}$ 使得

$$\mathbf{Z}(t)=\mathbf{G}_{\mathbf{H}}^{t}Z(0), \tag{5}$$

式中, $\mathbf{Z}(0)$ 为初始相, $\mathbf{Z}(t)$ 为 t 时刻的相, $G_H^{t\prime}\mathbf{J}G_H^t=\mathbf{J}$ 保证了 0~t 时刻相映射的 Jacobi 矩阵是辛的, 即在相空间中系统状态的面积得到保持(Hans, 2006). 由式(4)知地震波运动方程为一可分的 Hamilton 系统, 即可以分为动能和势能部分, 且动能为广义动量的函数、势能为广义坐标的函数, 对于可分的 Hamilton 系统可以构造任意阶精度的显式辛格式(Suzuki, 1992). 为了方便构造辛格式, 分别以 A 和 B 约定 $T(p)$ 和 $V(q)$ 的 Lie 算子(Li 和 Wu, 2011a, 2011b)为

$$\begin{cases}A=\{,T\}=\sum\limits_i p_i\dfrac{\partial}{\partial q_i},\\ B=\{,V\}=\sum\limits_i -\dfrac{\partial V}{\partial q_i}\dfrac{\partial}{\partial p_i},\end{cases} \tag{6}$$

式中, {}为泊松括号. 隐式辛格式(Luo 等, 1999; 罗明秋等, 2001b)虽有无条件稳定的特点, 但隐式方程的求解耗费大量的内存和计算时间; 三阶或高阶辛格式(Chen, 2007)虽然有较高的计算精度和长时间计算能力, 但高阶辛格式因每一个时间步需要计算的中间迭代步过多使得计算效率较低, 为了适应高效高精度地震波模拟的需要, 本文由 A, B 算子设计了如下一种新的辛格式, 表示为

$$\begin{pmatrix} q^{n+1} \\ p^{n+1} \end{pmatrix} = \exp(W) \begin{pmatrix} q^{n} \\ p^{n} \end{pmatrix}, \tag{7}$$

式中, $\exp(W) \approx \exp(a_1 A\tau)\exp(b_1 B\tau)\exp(a_2 A\tau)\exp(b_2 B\tau)\exp(a_3 A\tau)$; a_1, a_2, a_3, b_1 和 b_2 为待定的辛差分系数. 定义互易子 $[A,B]=AB-BA$, 且 $[A,B,A]=[A,[B,A]]$, 反复使用指数算子展开的 BCH 公式(Hairer, 2002), (7)式中 W 满足如下形式:

$$W = (\alpha_1 A + \alpha_2 B)\tau + \beta[A,B]\tau^2 + (\gamma_1[B,A,B] + \gamma_2[A,B,A])\tau^3 + O(\tau^4). \tag{8}$$

$\alpha_1, \alpha_2, \beta, \gamma_1, \gamma_2$ 具体满足如下形式:

$$\begin{cases} \alpha_1 = a_1 + a_2 + a_3, \\ \alpha_2 = b_1 + b_2, \\ \beta = \dfrac{1}{2}[(a_1 + a_2 - a_3)(b_1 + b_2) - 2a_2 b_1], \\ \gamma_1 = \dfrac{1}{12}[6a_2 b_1 b_2 - (a_1 + a_2 + a_3)(b_1 + b_2)^2], \\ \gamma_2 = \dfrac{1}{12}[6a_1(a_2 + a_3)(b_1 + b_2) + 6a_2 b_2(a_3 - a_1) + (b_1 + b_2)(a_1 + a_2 + a_3)^2]. \end{cases}$$

1.2　优化系数选取

由(8)式可知, 如果(7)式格式为三阶, $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = 1$, β, γ_1 与 γ_2 均需为 0, 可惜的是此时方程无实数解, 我们可以基于截断误差极小原理得到优化的二阶格式, 即 τ^3 项算子系数平方和 $\gamma_1^2 + \gamma_2^2$ 极小得到 M1 格式; 在地震波模拟时, 我们无法知道算子 $[B,A,B]$, $[A,B,A]$ 哪一项是主要误差来源, 令 $\gamma_1 = 0$, γ_2^2 极小, 可以得到 M2 格式; 同理令 $\gamma_2 = 0$, γ_1^2 极小可以得到 M3 格式. M1, M2 和 M3 格式满足的辛差分系数如下:

M1: $a_1 = 0.193183$, $a_2 = 0.613634$, $a_3 = 0.193183$, $b_1 = 0.5$, $b_2 = 0.5$.

M2: $a_1 = 0.166667$, $a_2 = 0.666666$, $a_3 = 0.166667$, $b_1 = 0.5$, $b_2 = 0.5$.

M3: $a_1 = 0.211325$, $a_2 = 0.577350$, $a_3 = 0.211325$, $b_1 = 0.5$, $b_2 = 0.5$.

为了验证 M1, M2 和 M3 的精度, 本文格式和几种常见的辛格式如最优二阶辛格式(M4)(McLachlan 和 Atela, 1992), 辛 PRK Lobatto ⅢA-ⅢB 格式(M5)(孙耿, 1997; Ma 等, 2011), Iwatsu 三阶辛格式(M6)(Iwatsu, 2009; Li 等, 2011, 2012), 三次项截断误差算子系数平方和 $\gamma^2 = \gamma_1^2 + \gamma_2^2$ 进行比较, 表 1 给出了比较结果. 从表 1 可知, 就 γ^2 而言, M1 误差与 M6 最接近, M1, M2 和 M3 误差都小于 M4, M5.

表 1　六种辛格式截断误差算子系数平方和对比

方法	M1	M2	M3	M4	M5	M6
γ^2	0.000073	0.000193	0.000125	0.000204	0.0087	0

1.3　弹性波模拟的稳定性分析

(2)式时间离散上采用 M1, M2 或 M3 格式, 空间离散上均采用优化的 Shannon 奇异核褶积微分算子(SCD)(Li 等, 2011, 2012)近似空间微分, 三种弹性波模拟格式在计算过程中时间步长和空间网格间距需服从一定的比例关系递推格式才稳定, 否则计算过程会数值溢出, 使得计算无法进行(李一琼等, 2012). 参照 Ma 等(2011)的分析方法, 首先将均匀介质中弹性波模拟中的稳定条件设定为如下形式:

$$\frac{\sqrt{V_P^2 + aV_S^2}\,\Delta t}{h} \leqslant C, \tag{9}$$

式中, Δt 为时间步长, h 为空间网格间距, V_P, V_S 分别为介质的纵波速度和横波速度, a 和 C 为待定常数. 附录 A 给出二维情形下(9)式中 a 和 C 的推导过程, M1, M2 和 M3 三种格式对应的 a, C 为

$$\begin{cases} \text{M1}: a = 0.69162,\ C = 0.91940, \\ \text{M2}: a = 0.67568,\ C = 0.87901, \\ \text{M3}: a = 0.67452,\ C = 0.94665. \end{cases} \tag{10}$$

(9)式中令 $\eta = V_S \Delta t / h$, $r = V_P / V_S$, 三种格式的稳定性比较如图 1 所示. 从图 1 可以看出 M3 格式代表的曲线位于 M1 和 M2 格式之上, M2 位于图中最下方, 说明纵横波速比 r 相同时 M3 能取的 η 值最大, M1 其次, M2 最小, 即此时当 V_S, h 相同时 M3 可以取最大

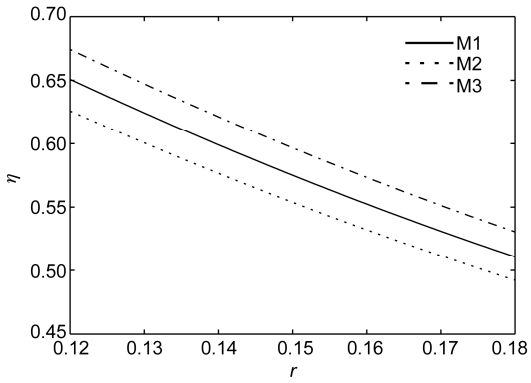

图 1　M1, M2 和 M3 三个格式稳定性条件的 η 值随纵横波速比 r 的变化

实线、点线和短-点线分别代表 M1, M2 和 M3 三个格式的 η 值

的时间步长, M3 格式最稳定.

2　数值实验

2.1　半无限均匀模型

为了检验三种格式的弹性波模拟的有效性及精度, 将 M1, M2 和 M3 分别与以下几类方法进行比较: (1) 二级二阶最优辛格式(McLachlan 和 Atela, 1992)(M4); (2) 辛 PRK Lobatto ⅢA-ⅢB 格式(孙耿, 1997; Ma 等, 2011)(M5); (3) Iwatsu 三级三阶辛格式(李一琼等, 2012, 2011; Li 等, 2011, 2012)(M6). 选择半无限空间模型, 模型大小为 2000 m × 2000 m(图 2), 纵波速度 2000 m s^{-1}, 横波速度 1250 m s^{-1}, 介质密度 2400 kg m^{-3}, 震源位于(1000 m, 1000 m)处, 接收点 R1 位于(1300 m, 1200 m)处、R2 位于(1800 m, 1000 m)处. 震源为集中力源, 由主频为 30 Hz 的 Ricker 子波激发产生, 时间步长为 0.5 ms, 空间网格间距为 5 m.

定义接收点的总体误差为

$$E_t = \sum_{i=1}^{N} \left| u(i\Delta t) - u_A(i\Delta t) \right|, \tag{11}$$

式中, N=1600, $u(i\Delta t)$ 为接收点的数值解, $u_A(i\Delta t)$ 为接收点的解析解.

模拟均在主频为 3.0 GHz 的 Intel(R) Core(TM) i5-2320 CPU、内存为 16 GB 的计算机上进行. 模拟结果如图 3, 4 和表 2 所示.

由图 3 对比可以看出三种辛格式能对地震波有效模拟, 计算的地震波到时与波形都能与解析解很好逼近, 就精度而言 M3 精度最高, M1 精度次之, M2 精度最差; 从表 2 可以看出 M6 高阶辛格式误差最小,

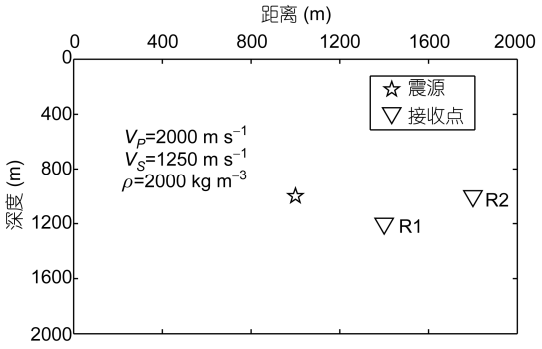

图 2　弹性波传播二维半无限空间模型

五角星代表震源所在位置, 三角符号代表接收器所在位置

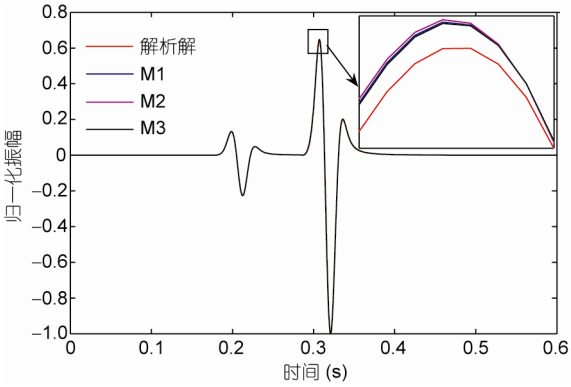

图 3　R1 接收点处 M1, M2 和 M3 三种辛格式模拟结果波形对比以及波形局部放大对比

红色线为解析解波形, 蓝色、紫红色和黑色分别为 M1, M2 和 M3 三种格式计算得到的波形

M3 误差其次, 而 M5 误差最大; 由表 2 可知 M5 内存要求最小, 其他格式内存要求一致, 而计算时间 M1~M5 计算时间几乎相同, 而 M6 计算时间大致为其他格式的 1.5 倍, M3 和 M6 的总体误差相近. 从上述对比中发现在相同的计算时间和内存消耗下本文格式可获得更高的精度.

2.2　长时程模拟

为了检验本文格式长时间地震波模拟能力, 选取 M3 与经典的 Newmark 格式(West 等, 1999)以及 M6 格式模拟二维均匀介质中的 SH 波(Virieux, 1984). 模型为 6000 m×6000 m 的均匀介质模型, 纵波速度为 3000 m s^{-1}, 横波速度为 2000 m s^{-1}, 介质密度 2000 kg m^{-3}. 震源为 20 Hz 的 Ricker 子波位于模型中心, 空间网格间距为 10 m, 时间步长为 1 ms. 模型周围为刚性界面. 模拟结果如图 5 所示.

表 2　六种辛格式计算效率和总体误差对比

参数	方法					
	M1	M2	M3	M4	M5	M6
内存消耗(KB)	17100	17100	17100	17100	14268	17100
计算时间(s)	895.266	894.003	889.626	873.506	840.173	1272.212
R1 总体误差	1.921	2.134	1.829	2.934	3.659	1.687
R2 总体误差	2.997	3.192	2.890	4.105	5.441	2.070

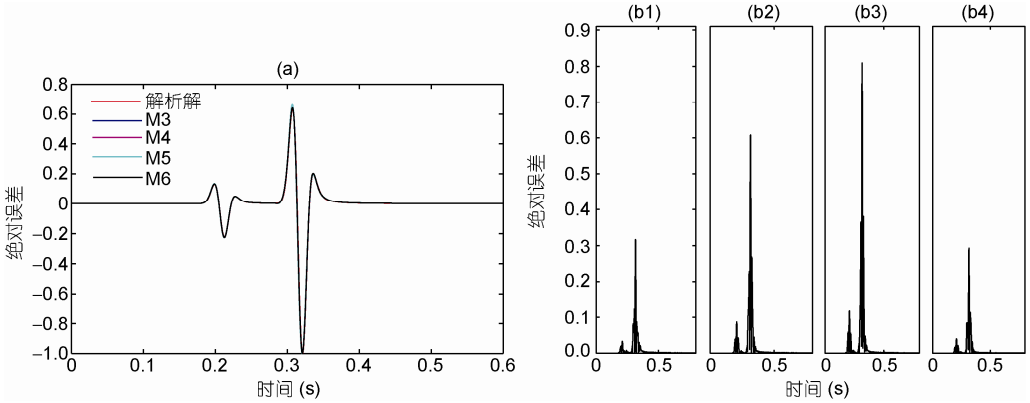

图 4　波形对比与绝对误差对比

(a) R1 处 M3, M4, M5 和 M6 四种辛格式模拟结果波形对比, 红色线为解析解波形, 蓝色线、紫红色线、青绿色线和黑色线分别代表 M3, M4, M5 和 M6 四种格式得到的数值解波形; (b1)~(b4) R1 处 M3, M4, M5 和 M6 四种辛格式模拟结果绝对误差(解析解与数值解之差的绝对值)对比

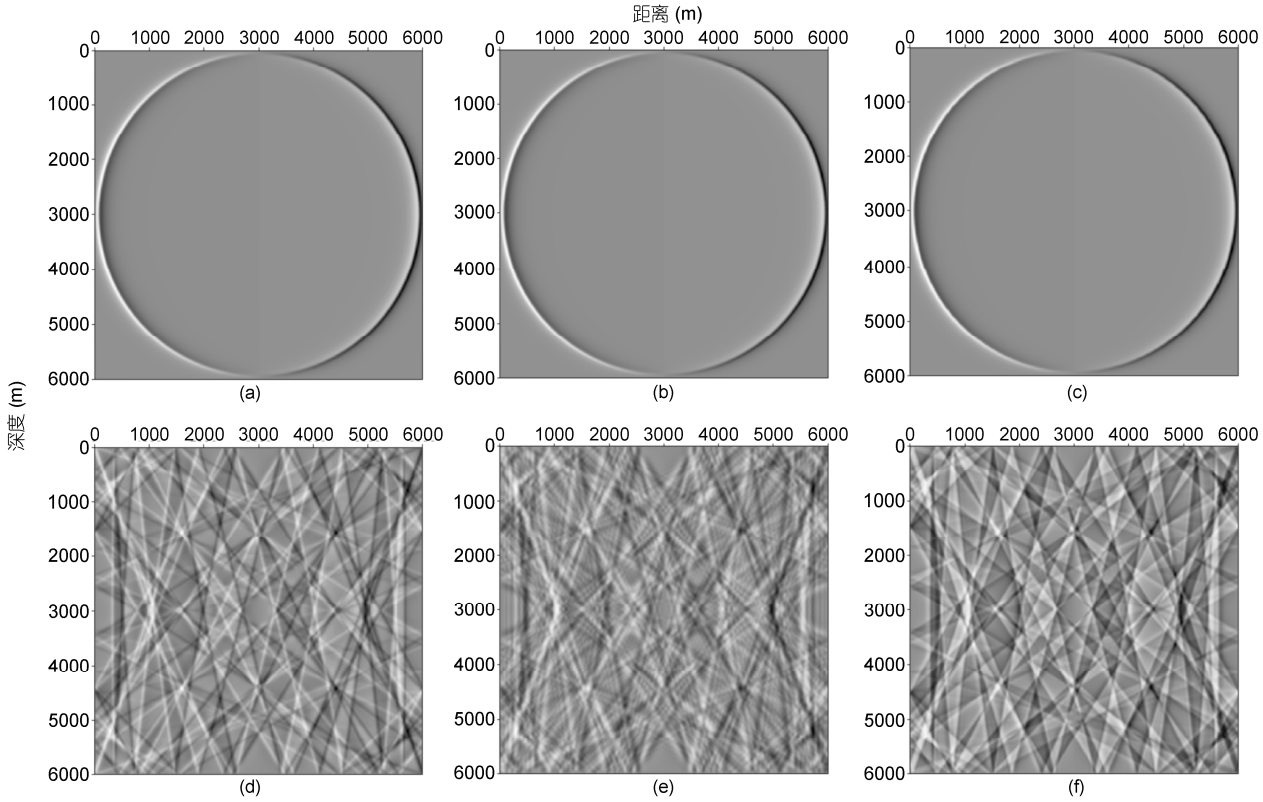

图 5　不同方法不同时刻地震波场快照对比

M3 格式(图(a), (d))、Newmark 格式(图(b), (d))和 M6 格式(图(c), (f))得到的 1500 和 495000 个时间步时的波场快照; (d)~(f) 快照中地震波等时面相同, (d)和(f)等时面较(e)等时面清晰

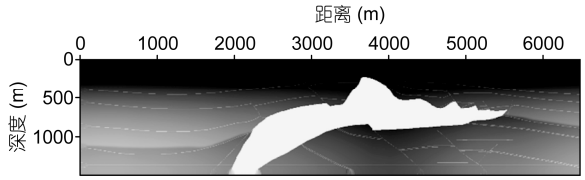

图 6　SEG/EAGE 模型速度剖面

对比图5(a)~(c)可知, 在短时间内三种方法对SH波模拟结果无明显差别; 随着时间增加, Newmark 格式(图 5(e))误差累积明显超过 M3(图 5(d))和 M6(图 5(e)), 在快照中表现为 Newmark 格式等时面(图 5(c))较为模糊, 而 M3 和 M6 等时面(图 5(d), (e))较为清晰, 说明 M3, M6 较经典的 Newmark 方法更具长时间地震波模拟的优势, 但 M3 计算效率远高于 M6, M3 更适合于大尺度地震波模拟.

2.3　非均匀模型-SEG/EAGE 盐丘模型

为了检验本文方法在非均匀介质中地震波模拟的有效性, 选择 SEG/EAGE 盐丘模型对 M3 格式进行检验, 同时与M6格式对比. 模型网格点数为649×150, 模型纵波速度结构如图 6 所示, 纵波速度变化范围为 1524~4480 m s^{-1}, 由于盐丘高阻体的存在使得介质横向速度变化明显, 横波速度可以公式 $V_S = V_P / \sqrt{3}$ 得到, 密度可由 Gardner 公式 $\rho = 310 \times V_P^{0.25}$ 计算得到(李信富和李小凡, 2008). 选取爆炸源位于(325, 0)节点上, 震源为 30 Hz 的 Ricker 子波, 时间采样间隔为 1 ms, 空间网格间距为 10 m. 为了防止边界反射, 周围采用为 20 个网格的 Cerjan 吸收边界(Cerjan 等, 1985).

对比图 7((a), (b))和图 8((a), (b))可知, M3 和 M6 无论地面合成记录和单道地震记录都一致, 由于介质的非均匀性, 在速度突变的地方产生了强烈的绕射和散射, 主要表现在主要震相过后的区域尾震荡明显. 模拟结果表明 M3 非均匀介质中地震波模拟能力与 M6 近似.

3　讨论与结论

将地震波位移运动方程变换至 Hamilton 体系, 运用 Lie 算子设计了一种高效求解位移运动方程的二阶辛格式, 基于截断误差极小原理得到了三组优化系数, 并对应 M1, M2 和 M3 三种最优二阶辛格式, 分析了三种格式地震波模拟的稳定性条件, 在与解析解对比中三种格式无论是计算效率还是精度都明显具有优势, 特别地, M3 格式在稳定性和精度方面都优于其他两种格式; 在长时间地震波模拟时, 本文格式长时间计算能力明显优于经典的 Newmark 格式; 在非均匀介质中本文格式得到了与高阶格式几乎一致的地震记录. 本文新得到的最优二阶辛格式为高效高精度地震波模拟与成像提供了一种新的、有效的选择.

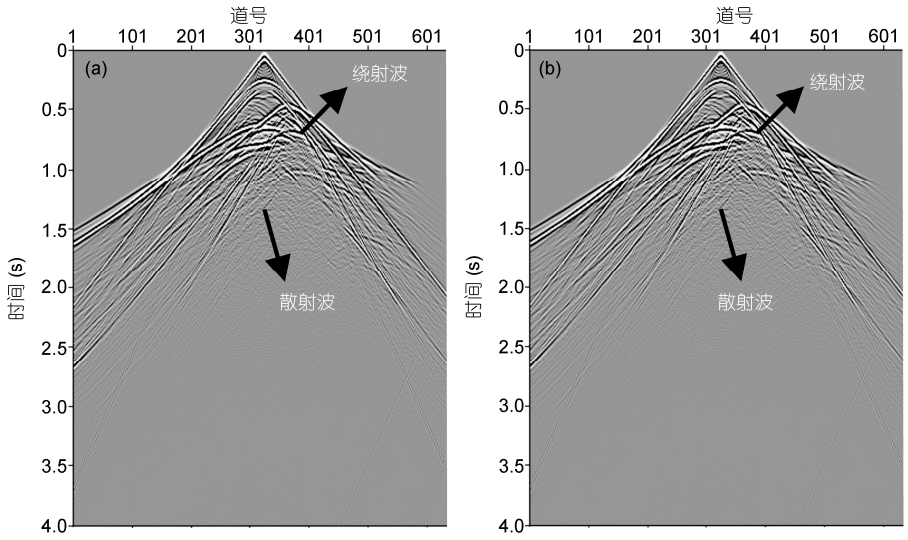

图 7　M3(a)和 M6(b)模拟 SEG/EAGE 盐丘模型合成地震记录

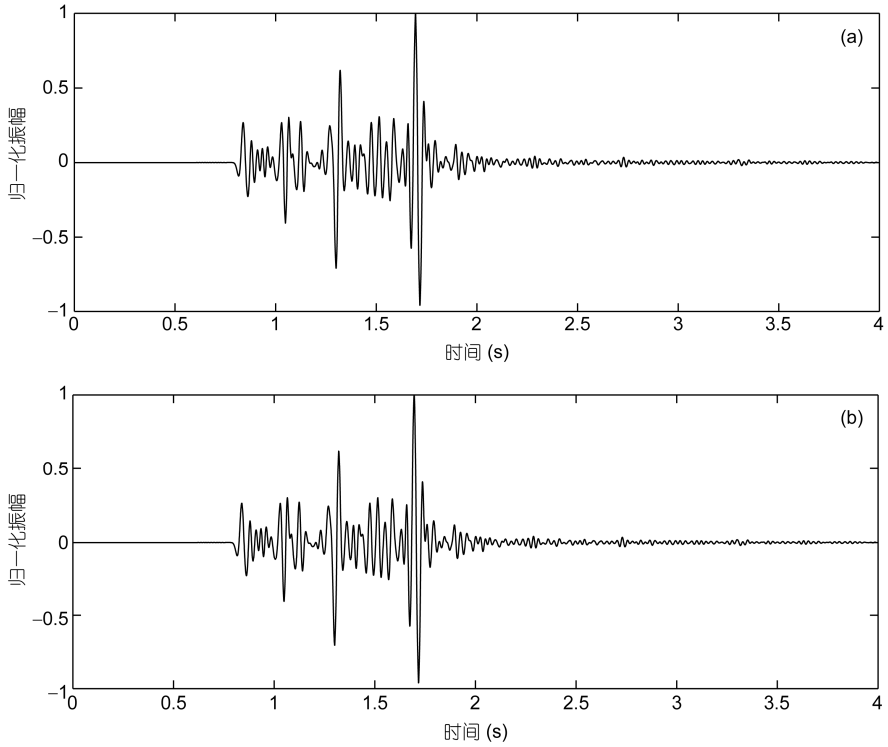

图 8　M3(a)和 M6(b)模拟 SEG/EAGE 盐丘第 500 道的地震记录

附录 A

假设 M1, M2 和 M3 模拟均匀介质中弹性波时的稳定性条件服从如下形式(Ma 等, 2011):

$$\frac{\sqrt{V_P^2+aV_S^2}\Delta t}{h}\leqslant C, \tag{A1}$$

式中, $h=\Delta x=\Delta z$, a, C 为待定常数.

广义坐标与广义动量第 n 个时间层时的误差向量为

$$(\delta q^n,\delta p^n)^T E, \tag{A2}$$

式中, $E=\exp[i(k_x x+k_z z)]$, k_x, k_z 分别表示 x 方向和 z 方向波数.

误差传递具有如下形式:

$$\begin{pmatrix}\delta q^{n+1}\\ \delta p^{n+1}\end{pmatrix}=G\begin{pmatrix}\delta q^{n}\\ \delta p^{n}\end{pmatrix}, \tag{A3}$$

其中, $G=\begin{pmatrix}a_{11} & a_{12}\\ a_{21} & a_{22}\end{pmatrix}$, $a_{11},a_{12},a_{21},a_{22}$ 表示如下:

$$a_{11}=I_2+(a_2b_1+a_3b_1+a_3b_2)\Delta t^2\Lambda_{2\times2}+a_2a_3b_1b_2\Delta t^4\Lambda_{2\times2}^2,$$

$$\begin{aligned}a_{12}=&(a_1+a_2+a_3)\Delta t I_2+(a_1a_2b_1+a_1a_3b_1+a_1a_3b_2\\&+a_2a_3b_2)\Delta t^3\Lambda_{2\times2}+a_1a_2a_3b_1b_2\Delta t^4\Lambda_{2\times2}^2,\end{aligned}$$

$$a_{21}=(b_1+b_2)\Delta t\Lambda_{2\times2}+a_2b_1b_2\Delta t^3\Lambda_{2\times2}^2,$$

$$\begin{aligned}a_{22}=&I_2+(a_1b_1+a_1b_2+a_3b_1+a_3b_2+a_2b_2)\Delta t^2\Lambda_{2\times2}\\&+a_2(a_1+a_3)b_1b_2\Delta t^4\Lambda_{2\times2}^2.\end{aligned}$$

I_2 为二阶单位矩阵, $\Lambda_{2\times2}$ 为二阶方阵, 具体表示如下:

$$\begin{aligned}\Lambda_{11}&=(V_P^2-V_S^2)k_x^2+V_S^2k_z^2,\\ \Lambda_{12}&=(V_P^2-V_S^2)k_xk_z,\\ \Lambda_{21}&=\Lambda_{12},\\ \Lambda_{22}&=(V_P^2-V_S^2)k_z^2+V_S^2k_x^2,\end{aligned}$$

$$0\leqslant k_x,k_z\leqslant 2\pi/h.$$

令 $r=\dfrac{V_P}{V_S},\alpha=\dfrac{V_P\Delta t}{h}$, G 为 r, α 的函数, M1, M2 和 M3 格式稳定需 G 的谱半径不能超过 1 即

$$\rho(G(r,\alpha))\leqslant 1. \tag{A4}$$

用数值方法求解(A4)式, r 从 1 增加至 4, 步长为 0.01,

计算对应的最大α, 用非线性拟合求(A1)式中的待定常数 a 和 C. 最后求得 M1, M2 和 M3 对应的 a 和 C 如下:

$$\begin{cases} \mathrm{M1}: a = 0.69162,\ C = 0.91940, \\ \mathrm{M2}: a = 0.67568,\ C = 0.87901, \\ \mathrm{M3}: a = 0.67452,\ C = 0.94665. \end{cases} \tag{A5}$$

参考文献

陈山, 杨顶辉, 邓小英. 2010. 四阶龙格-库塔方法的一种改进算法及地震波场模拟. 地球物理学报, 53: 1196–1206

冯康, 秦孟兆. 2003. 哈密尔顿体系的辛几何算法. 杭州: 浙江科学技术出版社

龙桂华, 李小凡, 江东辉. 2010. 基于交错网格 Fourier 伪谱微分矩阵算子的地震波场模拟 GPU 加速方案. 地球物理学报, 53: 2964–2971

龙桂华, 赵宇波, 李小凡, 等. 2011. 三维交错网格有限差分地震波模拟的 GPU 集群实现. 地球物理学进展, 26: 1938–1949

罗明秋, 刘洪, 李幼铭. 2001a. 地震波传播的哈密顿表述及辛几何算法. 地球物理学报, 44: 120–128

罗明秋, 刘洪, 李幼铭. 2001b. 基于螺旋线上谱因式分解的地震波场隐式辛算法. 地球物理学报, 44: 379–388

李信富, 李小凡. 2008. 地震波传播的褶积微分算子法数值模拟. 地球科学——中国地质大学学报, 33: 861–866

李一琼, 李小凡, 朱童. 2011. 基于辛格式奇异核褶积微分算子的地震标量波场模拟. 地球物理学报, 54: 1827–1834

李一琼, 李小凡, 张美根. 2012. 基于辛格式离散奇异核褶积微分算子的弹性波场模拟. 地球物理学报, 55: 1725–1731

秦孟兆, 陈景波. 2000. Maslov 渐进理论与辛几何算法. 地球物理学报, 2000, 43: 522–533

孙耿. 1997. 波动方程的一类显式辛格式. 计算数学, 1: 1–10

张美根, 王妙月, 李小凡, 等. 2002. 各向异性弹性波场的有限元数值模拟. 地球物理学进展, 17: 384–389

Carcione J M, Herman G C, ten Kroode A P E. 2002. Seismic modeling. Geophysics, 67: 1304–1325

Casas F, Murua A. 2009. An efficient algorithm for computing the Baker-Campbell-Hausdorff Series and some of its applications. J Math Phys, 50, doi: 10.1063/1.3078418

Cerjan C, Kosloff D, Kosloff R, et al. 1985. A nonreflecting boundary conditions for discrete acoustic and elastic wave equations. Geophysics, 50: 705–708

Červený V. 2001. Seismic Ray Theory. Cambridge: Cambridge University Press

Chen J B. 2007. High-order time discretizations in seismic modeling. Geophysics, 72: 115–121

Chen J B. 2009. Lax-Wendroff and Nyström methods for seismic modeling. Geophys Prospect, 57: 931–941

Fei T, Larner K. 1995. Elimination of numerical dispersion in finite difference modeling and migration by flux-corrected transport. Geophysics, 60: 1380–1842

Hans V d V. 2006. A fourth-order symplectic exponentially fitted integrator. Comput Phys Commun, 174: 255–262

Hairer E. 2002. Geometric Numerical Integration. 2nd ed. Berlin and New York: Springer-Verlag

Iwatsu R. 2009. Two new solutions to the third-order symplectic integration method. Phys Lett A, 373: 3056–3060

Keiswetter D, Black R, Schmeissner C. 1996. A program for seismic wavefield modeling using finite-difference techniques. Comput Geosci, 22: 267–286

Komatitsch D, Tromp J. 2002. Spectral-element simulations of global seismic wave propation-II. Three-dimensional models, oceans, rotation and self-gravitation. Geohys J Int, 150: 303–318

Li R, Wu X. 2011a. Two new fourth-order three-stage symplectic integrators. Chin Phys Lett, 28: 070201

Li R, Wu X. 2011b. Application of the fourth-order three-stage symplectic integrators in chaos determination. Eur Phys J Plus, 126: 73–80

Li X F, Li Y Q, Zhang M G, et al. 2011. Scalar seismic wave equation modeling by a multisymplectic discrete singular convolution differentiator method. Bull Seismol Soc Amer, 101: 1710–1718

Li X F, Wang W S, Lu M W, et al. 2012. Structure-preserving modeling of elastic wave: A symplectic discrete singular convolution differentiator method. Geophys J Int, 188: 1382–1392

Luo M Q, Li Y M, Liu H. 1999. The symplectic geometric description and algorithm of seismic wave propagation. In: SEG 69th International Meeting, Expanded Abstracts, Houston. 1852–1854

Ma X, Yang D H, Liu F Q. 2011. A nearly analytic symplectically partitioned Runge-Kutta method for 2-D seismic wave equations. Geophys J Int, 187: 480–496

McLachlan R I, Atela P. 1992. The accuracy of symplectic integrators. Nolinearity, 5: 541–562

Pao Y H, Varatharajulu V. 1976. Huygen's principle, radiation conditions, and integral formulas for the scattering of elastic wave. J Acoust Soc Am, 59: 1361–1371

Qin M Z, Zhang M Q. 1990. Multi-stage symplectic schemes of two kinds of Hamiltonian systems for wave equations. Comput Math Appl, 19:

51–62
Suzuki M. 1992. General theory of higher-order decomposition of exponential and symplectic integrators. Phys Lett A, 165: 387–395
Virieux J. 1984. SH-wave propagation in heterogeneous media: Velocity-stress finite-difference method. Geophysics, 49: 1933–1957
West M, Kane C, Marsden J E, et al. 1999. Variational integrators, the newmark scheme, and dissipative systems. In: International Conference on Differential Equations. 1009–1011
Yang D H, Song G J, Lu M. 2007. Optimally accurate nearly analytic discrete scheme for wave-field simulation in 3D anisotropic media. Bull seismol Soc Amer, 97: 1557–1569
Yang D H, Teng J W, Zhang Z J, et al. 2003. A nearly-analytic discrete method for acoustic and elastic wave equations in anisotropic media. Bull Seismol Soc Amer, 93: 882–890