

◇ 汪承灏院士八十生辰学术论文 ◇

多网格谱元法及其在高性能计算中的应用*

林伟军^{1,2†} 苏畅¹ Seriani Géza³

(1 中国科学院声学研究所 北京 100190)

(2 中国科学院大学 北京 100049)

(3 意大利国家海洋与地球物理研究所 的里雅斯特 34010)

摘要 针对传统谱元法在每个单元内只能存在单一均匀介质,应用在复杂非均匀介质的波传播模拟中可能造成极大计算规模的问题,发展了多网格谱元法。该方法在谱元法单元内引入独立的辅助网格,用于精细描述单元内的介质和外力分布变化,在较稀疏的主网格上进行波场的求解。基于声波和弹性波方程推导了多网格谱元法公式,并对几种典型模型进行了波场的数值模拟。与传统谱元法的对比结果表明,此算法在复杂非均匀介质的弹性波传播模拟中可以利用较少的网格点数达到不低于传统算法的精度。此外,实现了并行化的多网格谱元法,获得了较好的并行效率。

关键词 数值模拟,谱元法,多网格,高性能计算

中图法分类号: O242.21

文献标识码: A

文章编号: 1000-310X(2018)01-0042-11

DOI: 10.11684/j.issn.1000-310X.2018.01.007

The poly-grid spectral element method and its implementation in high performance computing

LIN Weijun^{1,2} SU Chang¹ SERIANI Géza³(1 *Institute of Acoustics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)(2 *University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*)(3 *Istituto Nazionale di Oceanografia e di Geofisica Sperimentale, Trieste 34010, Italy*)

Abstract When traditional spectral element method is used to numerically simulate wave propagation in complex media, it may result in solving a huge computational problem. To alleviate this issue, a poly-grid spectral element method is developed, in which independent auxiliary grids are introduced to represent property changes and force distribution inside the elements, while the wave equation is solved on a set of primary grids at macroscopic level. In this paper, the mathematical formulations of poly-grid spectral element method are derived for both acoustic and elastic wave modellings. Numerical examples are carried out on specific models and the results are compared with traditional spectral element method. The results show that the poly-grid method maintains high accuracy using much fewer computation grids in wave modeling in complex media. Moreover, the method is parallelized and a good parallel efficiency is achieved.

Key words Numerical simulation, Spectral element method, Poly-grid, High performance computing

2017-10-27 收稿; 2017-11-28 定稿

*国家自然科学基金项目 (91630309, 81527901, 11604361)

作者简介: 林伟军 (1971-), 男, 浙江绍兴人, 博士, 研究员, 研究方向: 计算声学, 声波测井, 医学超声。

† 通讯作者 E-mail: linwj@mail.ioa.ac.cn

1 引言

如何在复杂非均匀介质中快速精确地模拟弹性波的传播,在计算声学、地震勘探、天然地震研究、无损检测等多个领域有重要研究价值,一直是国内外研究者的工作重点。现有的波场数值模拟方法主要有有限差分法、伪谱法、边界元/边界积分法、有限元法、谱元法等^[1-9]。这些方法在精度、效率、复杂性等不同方面各有优缺点,需根据具体情况选用具体的算法。其中谱元法(Spectral element method, SEM)可看作一种高阶有限元法,在单元内用不等间距节点上的拉格朗日插值多项式作为形函数来逼近波场,根据所用形函数不同可分为Chebyshev谱元法^[5,7-9]和Legendre谱元法^[6]。谱元法继承了有限元法在单元划分上的灵活性,同时由于采用了高阶谱单元,可以用较大的高阶单元实现高精度计算。对谱元法的精度、收敛性、数值频散以及并行技术等,国内外已有较系统的研究^[10-16],与有限差分法和低阶有限元法的对比表明谱元法可用较少的空间节点获得高精度,并且能显著减小数值频散^[11,14,16-18]。

谱元法目前在波传播模拟中的应用非常广泛,特别是在具有自由界面的高频波传播中(如地震波模拟),介质中传播声波/弹性波的波长小于介质非均匀性的尺度,则谱元法可以充分发挥其节点少、精度高的优势。然而实际问题中往往需要计算具有小尺度非均匀性的复杂介质中的波传播,比如非常规油气藏的地震勘探等问题的模拟,此时介质非均匀性的尺度可能远小于其中所传播的波长,标准谱元法需要按介质变化的尺度划分很密的单元,以满足每个单元内只存在单一均匀介质条件,则计算节点数也随之增加,这将造成极大的计算规模。为解决这类多尺度问题,Seriani等^[19-20]提出了一种双网格谱元法,在单元内引入一组辅助网格来描述介质变化,而在较稀疏的网格上求解波场。该方法的主要思想与均匀化方法^[21-22]、多尺度有限元^[23-25]等有相似之处,近年来在谱单元法^[26]和间断有限元法^[27]中也发展了类似的技术。

本文在之前工作基础之上,论述了多网格谱元法(Poly-grid spectral element method, PG-SEM)的原理,分别由声波方程和弹性波方程出发推导了多网格谱元法的数学实现,利用此算法模拟了几种

非均匀介质模型中的声传播并验证其有效性,最后阐述了采用逐元技术和区域分块方法的并行算法及在高性能计算机上的应用,分析了并行效率。

2 多网格谱元法原理

多网格谱元法的基本思路是,将计算区域划分为比较大而规则的不重叠单元,在每个单元中再划分多组独立的网格,一组网格用于描述和离散化声场,称为主网格,另外的网格用于描述介质和外力在单元内部的分布,称为辅助网格。这些网格上可以建立不同的插值基函数,主网格采用Chebyshev插值基函数,辅助网格的选取只与单元内部介质参数和外力的分布情况有关。辅助网格是临时地定义于单元内部的局部网格,只用于生成谱元法单元质量矩阵、单元刚度矩阵和单元负载向量,在其后的波传播模拟计算中只用到描述波场的主网格,主要的计算规模也只取决于主网格的阶数,因此对具有小尺度非均匀性的复杂介质模型可达到显著降低计算规模的效果。

2.1 波动方程及其弱形式

2.1.1 声波方程的弱形式

在一个有界非均匀介质中的声波传播可用方程(1)再加上合适的边界条件来描述

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\rho c^2} \frac{\partial p}{\partial t} \right) - \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right) = f, \quad (1)$$

定义域: $\Omega \times [0, T]$,

其中, $p(\mathbf{x}, t)$ 为声压场, $\rho(\mathbf{x})$ 和 $c(\mathbf{x})$ 分别为介质的密度和声速, $f(\mathbf{x})$ 为声场源项, 等于体积外力的散度除以密度。 Ω 为用于计算的空间区域, t 为定义域为 $[0, T]$ 的时间变量。

与式(1)等价的弱形式可表述为: 求解 $p(\mathbf{x}, t)$ 使得对于任意的试函数 $w(\mathbf{x}) \in \mathbf{H}_0^1(\Omega)$, 式(2)均成立,

$$\begin{aligned} & \frac{d^2}{dt^2} \int_{\Omega} w \frac{1}{\rho c^2} p d\Omega + \int_{\Omega} \nabla w \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right) d\Omega \\ & = \int_{\Omega} w f d\Omega, \end{aligned} \quad (2)$$

其中, $\mathbf{H}_0^1(\Omega)$ 表示满足在边界上值为零, 且一阶导数在区域内平方可积的函数的集合。

2.1.2 弹性波方程及其弱形式

在边界为 Γ 的二维空间 $\Omega \subset \mathbf{R}^{n_2}$ 和时间 $t \in [0, T]$ 内, 介质中的弹性波可以表示为

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} - \mathbf{D}^T \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) = \mathbf{f}, \quad (3)$$

其中, $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = [u_1, u_2]^T$ 为位移, $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = [\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{12}]$ 为应力, $\rho(\mathbf{x})$ 为介质密度, $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = [f_1, f_2]^T$ 为单位体积上作用的外力, $\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \partial_1 & 0 & \partial_2 \\ 0 & \partial_2 & \partial_1 \end{bmatrix}^T$ 为差分算子, u_i 和 σ_{ij} 中的脚标 $i, j = 1, 2$ 表示二维平面上的两个方向。根据 Hooke 定律 $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) = \mathbf{C}\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \mathbf{C}\mathbf{D}\mathbf{u}$, 其中 \mathbf{C} 为弹性劲度矩阵,

各向同性介质中 $\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & 0 \\ 0 & 0 & \mu \end{bmatrix}$ 。定义初

始条件 $\mathbf{u}|_{t=0} = \mathbf{u}_0$, $(\partial \mathbf{u} / \partial t)|_{t=0} = \dot{\mathbf{u}}_0$, 再加上合适的边界条件, 则方程 (3) 称为弹性波动方程的强形式。为推导简便起见, 以下只考虑自由边界条件。

谱元法需要波动方程的弱形式, 即求解波场 $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, 使得对于任意试函数 $\mathbf{w}(\mathbf{x}) \in \mathbf{H}_0^1(\Omega)$, 方程 (4) 成立:

$$\begin{aligned} & \frac{d^2}{dt^2} \int_{\Omega} \rho \mathbf{w}^T \cdot \mathbf{u} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w}^T \mathbf{D}^T \mathbf{C} \mathbf{D} \mathbf{u} d\Omega \\ & = \int_{\Omega} \mathbf{w}^T \cdot \mathbf{f} d\Omega, \end{aligned} \quad (4)$$

其中, $\mathbf{H}_0^1(\Omega)$ 为在区域内一阶导数平方可积, 且在边界上值为零的函数的集合。

2.2 多网格谱元法空间离散

我们将计算区域划分为 N_e 个互不重叠的矩形单元 Ω_e , 即 $\Omega = \bigcup_{e=1}^{N_e} \Omega_e$, 划分单元时无需考虑介质分布, 每个单元内可以存在多种介质。将第 e 个单元通过坐标变换映射至参考单元 $\hat{\Omega} = [-1, 1]^2$, 矩形实际单元到参考单元的映射可表示为

$$\boldsymbol{\xi} = \mathbf{A}^e(\mathbf{x}) = \left\{ \frac{2}{\Delta_1^e} (x_1 - a_1^e) - 1, \frac{2}{\Delta_2^e} (x_2 - a_2^e) - 1 \right\}, \quad (5)$$

其中, $\mathbf{x} = \{x_1, x_2\}$ 为实际单元内一点坐标, $\boldsymbol{\xi} = \{\xi_1, \xi_2\}$ 为参考单元内对应点坐标, a_1^e, a_2^e 为实际单元最小顶点坐标, Δ_1^e, Δ_2^e 为实际单元边长。

在参考单元内选取 N 阶 Gauss-Lobatto-Chebyshev (GLC) 配置点 $\xi_i = -\cos(\pi i / N)$, ($i =$

$0, 1, \dots, N$), 作为主网格节点。将主网格节点上的波场值通过插值基函数作截断展开, 来近似真实的连续的波场, 即:

$$\begin{aligned} u^e(\boldsymbol{\xi}, t) & \approx \tilde{u}^e(\xi_1, \xi_2, t) \\ & = \sum_{i_1=0}^N \sum_{i_2=0}^N u_{i_1 i_2}^e(t) \varphi_{i_1}(\xi_1) \varphi_{i_2}(\xi_2), \end{aligned} \quad (6)$$

其中, $u_{i_1 i_2}^e$ 为主网格节点 $\{i_1, i_2\}$ 上的值, 即 $u_{i_1 i_2}^e = u(\xi_{i_1}, \xi_{i_2}, t)$, $\varphi_i(\xi)$ 为定义在 $[-1, 1]$ 区间上的 N 阶 Chebyshev-Lagrange 插值函数, 可以写成以下形式:

$$\begin{aligned} \varphi_i(\xi) & = \frac{2}{N} \sum_{p=0}^N \frac{1}{\bar{c}_i \bar{c}_p} T_p(\xi_i) T_p(\xi), \\ \text{其中 } \bar{c}_i & = \begin{cases} 1, & \text{当 } i \neq 0, N, \\ 2, & \text{当 } i = 0, N, \end{cases} \end{aligned} \quad (7)$$

式 (7) 中, $T_p(\xi)$ 为第一类 Chebyshev 多项式 $T_p(\xi) = \cos(p \arccos \xi)$ 。

由于单元内可能存在多种介质, 定义一组新的网格来描述单元内介质参数的变化, 称为辅助网格。将辅助网格节点上的介质参数值通过一组新的插值基函数展开, 来近似实际的介质分布:

$$\begin{aligned} \alpha^e(\boldsymbol{\xi}) & \approx \tilde{\alpha}^e(\xi_1, \xi_2) \\ & = \sum_{l_1=0}^L \sum_{l_2=0}^L \alpha_{l_1 l_2}^e \phi_{l_1}(\xi_1) \phi_{l_2}(\xi_2), \end{aligned} \quad (8)$$

其中, $\alpha_{l_1 l_2}^e$ 为单元内辅助网格节点上的介质参数值, $\phi_l(\xi)$ 为插值函数。

辅助网格与主网格完全独立, 可以根据介质在单元内的分布变化情况来选择最合适的网格类型、阶数 L 和插值函数 $\phi_l(\xi)$ 。比如, 若介质在单元内连续变化, 可以采用与主网格相同的 GLC 点作为辅助网格节点, 此时单元基函数为 Chebyshev-Lagrange 函数, 但所用阶数不必与主网格相等。而更常见的情况是介质在单元内发生不连续的跳变, 此时介质参数可用阶梯函数来描述, 采用均匀分布的配置点作为辅助网格节点, 插值函数可由式 (9) 给出,

$$\phi_l(\xi) \equiv P_l(\xi) = P((\xi - \xi_l)/h), \quad (9)$$

其中, 函数 $P(x)$ 为单位方波脉冲函数, 其定义为

$$P(x) \equiv \begin{cases} 1, & \text{当 } |x| < 1/2, \\ 0, & \text{当 } |x| > 1/2, \end{cases} \quad (10)$$

则基函数 P_l ($l = 1, 2, \dots, L$) 的定义为宽度 $h = 2/L$, 中心坐标为 $\xi_l = -1 + (2l - 1)/L$ 的函数。则二维参考单元可分为 $L \times L$ 个小区域, 每个小区域有相同大小 $h \times h$, 小区内介质参数为常数。

波场模拟中常用的声源为点声源 $f(\mathbf{x}, t) = s(t)\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_s)$, 其中 $s(t)$ 为外力随时间变化的部分, \mathbf{x}_s 为点声源的位置。但实际数值计算中不能直接加载 $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_s)$ 点声源, 点声源的位置不一定正好在主网格配置点上, 直接将点声源放置在最近的网格点上会带来很大误差。常用的办法是在 δ 函数上加高斯窗, 使声源外力分布在实际点源附近的小区域内。为了在谱元法中描述点声源, 可以用另一组辅助网格将单元内外力随空间变化的部分离散近似为

$$\tilde{f}^e(\xi_1, \xi_2) = \sum_{k_1=0}^K \sum_{k_2=0}^K f_{k_1 k_2}^e \psi_{k_1}(\xi_1) \psi_{k_2}(\xi_2), \quad (11)$$

其中, $f_{k_1 k_2}^e$ 为外力随空间变化的部分在单元辅助网格节点上的值, 插值函数 $\psi_k(\xi)$ 可以采用与主网格相同的 Chebyshev 插值多项式, 但阶数可以不同。

2.3 波动方程的离散

2.3.1 声波方程

将式(6)、式(8)和式(11)的近似表达式和式(5)的坐标映射代入声波方程的弱形式(2), 并考虑 Neumann 边界条件,

$$\left. \frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} \right|_{\Gamma} = 0, \quad t \in [0, T], \quad (12)$$

可以得到如下的时域二阶线性常微分方程组

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{p}}(t) + \mathbf{K}\mathbf{p}(t) = \mathbf{F}(t), \quad (13)$$

相应的初始条件为 $\mathbf{p}(0) = \mathbf{p}_0$ 和 $\dot{\mathbf{p}}(0) = \dot{\mathbf{p}}_0$, $\mathbf{p}(t)$ 为声场的离散解。

如果考虑一阶 Clayton-Engquist 吸收边界条件,

$$\frac{1}{c} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad \text{定义域: } \Gamma \times [0, T], \quad (14)$$

则方程组变为

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{p}}(t) + \mathbf{C}\dot{\mathbf{p}}(t) + \mathbf{K}\mathbf{p}(t) = \mathbf{F}(t). \quad (15)$$

在式(13)和式(15)中, \mathbf{M} 、 \mathbf{C} 、 \mathbf{K} 和 \mathbf{F} 分别为全局质量矩阵、阻尼矩阵、刚度矩阵和负载向量, 分

别由各单元上计算得到的单元矩阵和向量聚合而成。单元矩阵和向量的表达式如下:

$$M_{i_1 i_2 j_1 j_2}^e = \frac{\Delta_1^e \Delta_2^e}{4} \sum_{l_1=0}^L \sum_{l_2=0}^L \alpha_{l_1 l_2}^e B_{i_1 j_1 l_1} B_{i_2 j_2 l_2}, \quad (16)$$

$$C_{i_1 i_2 j_1 j_2}^e = \left(\frac{\Delta_1^e \Delta_2^e}{4} \sum_{l_1=0}^L \sum_{l_2=0}^L \beta_{l_1 l_2}^e B_{i_1 j_1 l_1} B_{i_2 j_2 l_2} \right)_{\Gamma}, \quad (17)$$

$$K_{i_1 i_2 j_1 j_2}^e = \sum_{l_1=0}^L \sum_{l_2=0}^L \gamma_{l_1 l_2}^e \left(\frac{\Delta_2^e}{\Delta_1^e} \bar{B}_{i_1 j_1 l_1} B_{i_2 j_2 l_2} + \frac{\Delta_1^e}{\Delta_2^e} B_{i_1 j_1 l_1} \bar{B}_{i_2 j_2 l_2} \right), \quad (18)$$

$$F_{i_1 i_2}^e = \frac{\Delta_1^e \Delta_2^e}{4} \sum_{k_1=0}^K \sum_{k_2=0}^K A_{i_1 k_1} A_{i_2 k_2} f_{k_1 k_2}^e(t), \quad (19)$$

其中, $\alpha = 1/\rho c^2$, $\beta = 1/\rho c$ 和 $\gamma = 1/\rho$ 为介质参数。 \mathbf{A} 、 \mathbf{B} 和 $\bar{\mathbf{B}}$ 为耦合矩阵, 用于将主网格和辅助网格联系起来, 将辅助网格上的介质参数对波场计算的贡献反映到主网格上, 耦合矩阵的具体表达式将在 2.3.3 节中介绍。

2.3.2 弹性波方程

将以上波场、试函数、介质参数和外力的离散形式(6)、式(8)和式(11)代入波动方程的弱形式(4), 并将待求解的波场向量写作 $\mathbf{U}(t) = [\mathbf{U}_1(t), \mathbf{U}_2(t)]^T$, 并采用 Neumann 边界条件(自由边界), 最终可得到如下的时域二阶线性常微分方程组

$$\begin{cases} \bar{\mathbf{M}}\ddot{\mathbf{U}}_1(t) + \bar{\mathbf{K}}_1 \mathbf{U}_1(t) + \bar{\mathbf{K}}_2 \mathbf{U}_2(t) = \bar{\mathbf{F}}_1(t), \\ \bar{\mathbf{M}}\ddot{\mathbf{U}}_2(t) + \bar{\mathbf{K}}_2^T \mathbf{U}_1(t) + \bar{\mathbf{K}}_3 \mathbf{U}_2(t) = \bar{\mathbf{F}}_2(t), \end{cases} \quad (20)$$

相应的初始条件为 $\mathbf{U}(0) = \mathbf{U}_0$ 和 $\dot{\mathbf{U}}(0) = \dot{\mathbf{U}}_0$, $\bar{\mathbf{M}}$ 、 $\bar{\mathbf{K}}_i$ 和 $\bar{\mathbf{F}}_i(t)$ 分别为全局的质量矩阵、刚度矩阵和外力向量, 分别由各单元上计算得到的单元矩阵和向量聚合而成。单元矩阵和向量表达式如下:

$$\bar{M}_{i_1 i_2 j_1 j_2}^e = \frac{\Delta_1^e \Delta_2^e}{4} \sum_{l_1=0}^L \sum_{l_2=0}^L \rho_{l_1 l_2}^e B_{i_1 j_1 l_1} B_{i_2 j_2 l_2}, \quad (21)$$

$$[\mathbf{K}_1^e]_{i_1 i_2 j_1 j_2} = \sum_{l_1=0}^L \sum_{l_2=0}^L \left[(\lambda_{l_1 l_2} + 2\mu_{l_1 l_2}) \frac{\Delta_2^e}{\Delta_1^e} \bar{B}_{i_1 j_1 l_1} B_{i_2 j_2 l_2} + \mu_{l_1 l_2} \frac{\Delta_1^e}{\Delta_2^e} B_{i_1 j_1 l_1} \bar{B}_{i_2 j_2 l_2} \right], \quad (22)$$

$$[\mathbf{K}_2^e]_{i_1 i_2 j_1 j_2} = \sum_{l_1=0}^L \sum_{l_2=0}^L (\lambda_{l_1 l_2} \bar{B}_{i_1 j_1 l_1} \bar{B}_{j_2 i_2 l_2} + \mu_{l_1 l_2} \bar{B}_{j_1 i_1 l_1} \bar{B}_{i_2 j_2 l_2}), \quad (23)$$

$$[\mathbf{K}_3^e]_{i_1 i_2 j_1 j_2} = \sum_{l_1=0}^L \sum_{l_2=0}^L \left((\lambda_{l_1 l_2} + 2\mu_{l_1 l_2}) \frac{\Delta_1^e}{\Delta_2^e} B_{i_1 j_1 l_1} \bar{B}_{i_2 j_2 l_2} + \mu_{l_1 l_2} \frac{\Delta_2^e}{\Delta_1^e} \bar{B}_{i_1 j_1 l_1} B_{i_2 j_2 l_2} \right), \quad (24)$$

$$[\mathbf{F}_a^e]_{i_1 i_2} = \frac{\Delta_1^e \Delta_2^e}{4} \sum_{k_1=0}^K \sum_{k_2=0}^K A_{i_1 k_1} A_{i_2 k_2} [f_a^e]_{k_1 k_2}(t), \quad (a = 1, 2), \quad (25)$$

其中耦合矩阵的表达式在下一节给出。

2.3.3 耦合矩阵

耦合矩阵是用于将定义介质参数的辅助网格与定义波场的主网格相耦合的矩阵,由不同网格上插值基函数乘积的积分构成,如下所示:

$$A_{ik} = \int_{-1}^{+1} \varphi_i(\xi) \psi_k(\xi) d\xi, \quad (26)$$

$$B_{ijl} = \int_{-1}^{+1} \phi_l(\xi) \varphi_i(\xi) \varphi_j(\xi) d\xi, \quad (27)$$

$$\bar{B}_{ijl} = \int_{-1}^{+1} \phi_l(\xi) \varphi_i(\xi) \frac{d\varphi_j(\xi)}{d\xi} d\xi, \quad (28)$$

$$\bar{\bar{B}}_{ijl} = \int_{-1}^{+1} \phi_l(\xi) \frac{d\varphi_i(\xi)}{d\xi} \frac{d\varphi_j(\xi)}{d\xi} d\xi. \quad (29)$$

对于 \bar{B} 和 $\bar{\bar{B}}$, 可利用公式 (30)~(31), 根据 B 的结果来计算:

$$\bar{B}_{ijl} = \sum_{m=0}^N D_{im} B_{jml}, \quad (30)$$

$$\bar{\bar{B}}_{ijl} = \sum_{m,n=0}^N D_{im} D_{jn} B_{mnl}, \quad (31)$$

其中, Chebyshev 导数矩阵 D 的计算方法可参考文献 [28]。

如果需要处理分区均匀介质, 如薄层介质时, 可以用阶梯型插值函数 (式 (9)) 作为辅助网格上的插值基函数, 用来处理介质参数, 则耦合矩阵 B 有如下的表达式:

$$B_{ijl} = \sum_{p,q=0}^N s_{ip} s_{jq} C_h(l, p, q), \quad (32)$$

其中, $s_{ip} = \frac{2T_p(\xi_i)}{(N\bar{c}_i\bar{c}_p)}$, $\bar{c}_i = \begin{cases} 1, & \text{当 } i \neq 0, N \\ 2, & \text{当 } i = 0, N \end{cases}$ 。而

$C_h(l, p, q)$ 可由式 (33) 计算:

$$\begin{aligned} C_h(l, p, q) &= \int_{-1}^1 P_l(\xi) T_p(\xi) T_q(\xi) d\xi \\ &= \frac{1}{4} \left[\bar{C}_l(1+p-q) + \bar{C}_l(1-p+q) \right. \\ &\quad \left. + \bar{C}_l(1-p-q) + \bar{C}_l(1+p+q) \right], \quad (33) \end{aligned}$$

其中,

$$\bar{C}_l(r) = \begin{cases} [\cos(r\theta_l^1) - \cos(r\theta_l^2)]/r, & \text{当 } r \neq 0, \\ 0, & \text{当 } r = 0, \end{cases} \quad (34)$$

以及 $\theta_l^1 = \arccos(\xi_l - 1/L)$ 和 $\theta_l^2 = \arccos(\xi_l + 1/L)$ 。

而对于外力的插值, 可以采用 Chebyshev-Lagrange 插值基函数, 则耦合矩阵 A 可用式 (35) 计算:

$$A_{ik} = \sum_{p=0}^N \sum_{q=0}^K s_{ip} s_{kq} C(p, q), \quad (35)$$

$$\begin{aligned} C(p, q) &= \int_{-1}^1 T_p(\xi) T_q(\xi) d\xi \\ &= \begin{cases} 0, & \text{当 } (p+q) \text{ 为奇数,} \\ \frac{1}{1-(p+q)^2} + \frac{1}{1-(p-q)^2}, & \text{当 } (p+q) \text{ 为偶数.} \end{cases} \quad (36) \end{aligned}$$

Chebyshev 和 Legendre 谱元都是谱元法计算中常用的插值方法, 而在本文介绍的多网格谱元法中, 为了计算耦合矩阵, 往往需要利用 Chebyshev 多项式的性质, 将以上积分推导为简化的解析表达式, 避免数值积分带来额外的计算量和计算误差。对于存在小尺度非均匀性的复杂介质, 可以提高辅助网格阶数 L 以精确描述介质分布, 而最终形成的单元矩阵阶数为主网格的阶数 N , 在较少的主网格节点

上包含了辅助网格上介质和外力的信息,在波场求解中不会增加计算量,与传统谱元法相比能够显著提高计算效率。

2.3.4 时间积分

多网格谱元法的时间离散和求解与传统谱元法并无不同,根据精度要求选择合适的时间步长 Δt ,将时间域 $[0, T]$ 离散为 N_t 步,由于采用多网格Chebyshev谱元形成的质量矩阵并不是对角阵,只能采用隐式的差分格式。这里我们采用了一种Bazzi-Anderheggen ρ -method中 $\rho = 1$ 的时间积分方法^[29],利用式(37)在时间域上逐步迭代:

$$\begin{cases} \mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + \delta \mathbf{u}_n, \\ \dot{\mathbf{u}}_{n+1} = \frac{2}{\Delta t} \delta \mathbf{u}_n - \dot{\mathbf{u}}_n, \\ \ddot{\mathbf{u}}_{n+1} = \frac{4}{\Delta t^2} \delta \mathbf{u}_n - \frac{4}{\Delta t} \dot{\mathbf{u}}_n - \ddot{\mathbf{u}}_n, \end{cases} \quad (37)$$

对每个时间点 n ,通过以下方程组求解 $\delta \mathbf{u}_n$:

$$\begin{aligned} & \left(\mathbf{M} + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{C} + \frac{\Delta t^2}{4} \mathbf{K} \right) \delta \mathbf{u}_n \\ & = \frac{\Delta t^2}{2} (\mathbf{F}_n + \mathbf{F}_{n+1}) - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K} \mathbf{u}_n + \Delta t \mathbf{M} \dot{\mathbf{u}}_n. \end{aligned} \quad (38)$$

在式(38)的求解中可以用逐元法、预条件共轭梯度法^[15-16,30]等加速计算。同时,由于单元矩阵和向量的生成以及大部分计算都可在单元上局部完成,此算法非常适合并行计算,从而进一步提高计算效率。

3 数值算例

我们用Fortran语言实现了以上介绍的算法,并进行了声场和弹性波场的数值模拟,为了验证多网格谱元法的精度和效率,选择了几个特定的计算模型,并将多网格方法的结果与其他方法进行了对比。

3.1 带吸收边界的声传播模拟

为了验证多网格谱元法在声场模拟中的效果,设计了一个带有倾斜界面的分区均匀介质模型,如图1所示。介质1的声速为1500 m/s,介质2的声速为2000 m/s,两种介质的密度均为1000 kg/m³。模型计算区域左侧和底部边界采用了式(14)的一阶Clayton-Engquist吸收边界,而右侧和顶部边界为式(12)的Neumann边界(自由边界)。图1中S点处的点声源发出中心频率为40 Hz的Ricker子波。

用多网格谱元法计算此模型中的声波传播过程,将整个模型划分为 20×20 个规整的矩形单元,在靠近边界处采用了较小的单元,以提高边界附近的计算精度,单元划分如图1所示。每个单元主网格阶数为 6×6 阶,在倾斜的介质界面所穿过的单元内,建立了 50×50 的辅助网格,用阶梯型插值基函数来近似倾斜界面处的介质分布。计算得到0.25 s时刻的声压分布如图2所示,可以看到声波在倾斜界面上的反射。此外,右侧和顶部自由边界上产生了很强的反射,而左侧和底部的吸收边界上没有反射声波。特别地,在模型底部边界上,介质分界面处于某个单元中间,而此处声源产生的直达波和介质分界面产生的透射波都得到了很好的吸收。

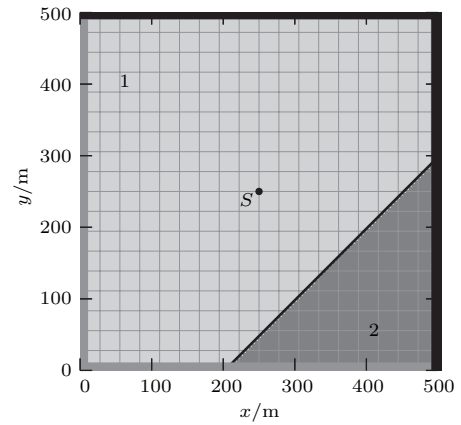


图1 带倾斜界面、吸收边界(灰)和Neumann边界(黑)的声波介质模型

Fig. 1 Acoustic model with an inclined interface, absorbing boundaries (gray) and Neumann boundaries (black)

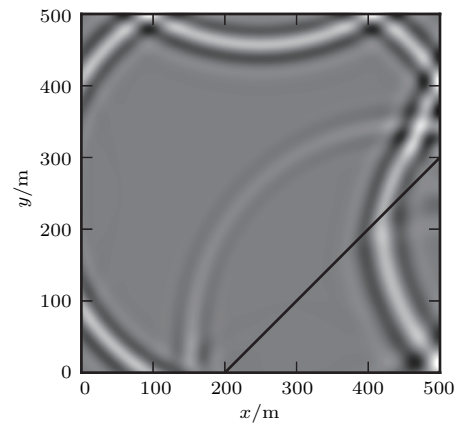


图2 多网格谱元法计算的0.25 s时刻声压分布

Fig. 2 Snapshot of sound pressure at time 0.25 s computed by the poly-grid spectral element method

3.2 带倾斜界面的弹性波介质模型

考虑如图3所示的带倾斜界面的分区均匀介质模型, 介质1的纵横波速度分别为2900 m/s和1674 m/s, 密度为1900 kg/m³, 介质2的纵横波速度和密度分别为3600 m/s, 2079 m/s和2680 kg/m³。声源为作用于S点处, 垂直于介质分界面的力源, 是中心频率10 Hz的Ricker子波。在两种弹性介质中各有一接收点R₁和R₂。

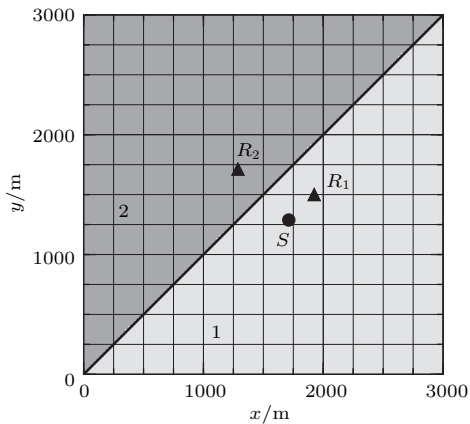


图3 带倾斜分界面分区均匀介质模型

Fig. 3 Piecewise homogeneous model with an inclined interface

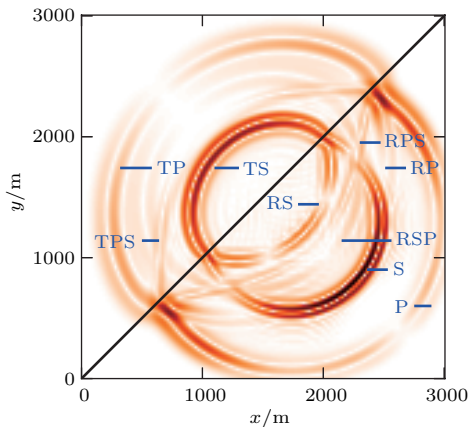
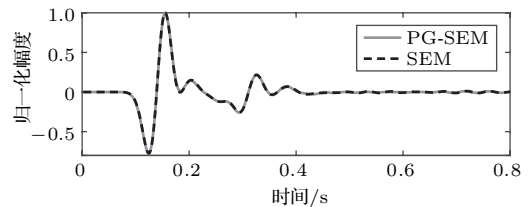


图4 多网格谱元法计算的0.5 s时刻质点位移模的分布

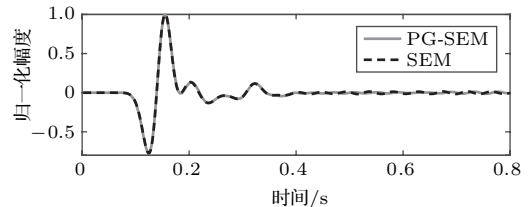
Fig. 4 Snapshot of particle displacement modulus at time 0.5 s computed by the poly-grid spectral element method

模型划分为40×40个正方形单元, 单元主网格阶数为4×4, 则计算中的总节点数为161×161, 时间步长取2 ms。介质分界面穿过部分单元, 与单元边界成45°角。为了描述单元内介质的分布, 采用了

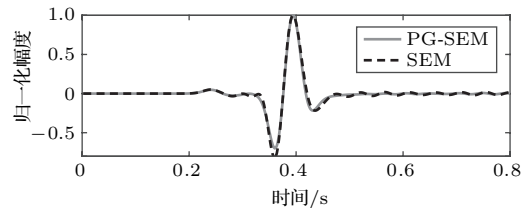
50×50的辅助网格。图4为计算得到的0.5 s时刻质点位移模的分布快照图, 从中可以清楚分辨出由声源发出的直达纵、横波(P、S), 界面上反射的纵、横波(RP、RS), 穿过界面的透射纵、横波(TR、TS), 以及弹性介质界面上产生的转换波(RPS、TPS、RSP)等。



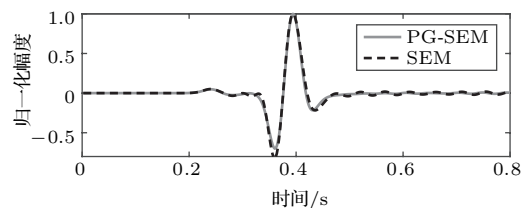
(a) R₁处质点速度x分量



(b) R₁处质点速度y分量



(c) R₂处质点速度x分量



(d) R₂处质点速度y分量

图5 多网格与传统谱元法计算得到接收点R₁、R₂处质点速度x、y方向分量的波形对比

Fig. 5 Waveform comparisons for x and y particle velocity components at receivers R_1 and R_2 computed by the poly-grid and traditional spectral element methods

为了进一步验证多网格谱元法的精度, 提取两个接收点处的波形, 与传统谱元法的计算结果进行对比。为了利用传统谱元法计算此模型, 我们将模型旋转45°, 并保持声源、接收点和介质分界面的相对位置不变, 同时保证声源外力的方向仍垂直于介质分界面。此时采用正方形单元时, 可使介质的分

界面与单元边界重合,从而每个单元内部只存在单一均匀介质,可用传统谱元法计算,在计算中采用了与多网格方法相同的单元数和网格阶数。图5为两种方法计算结果的对比,将接收点质点速度在两个正交方向上的分量分别画出对比,可见二者结果吻合较好。

3.3 弹性波棋盘形非均匀介质模型

在此算例中,我们计算了点源激发的弹性波穿过棋盘格介质结构时的波场分布。介质模型和单元划分如图6所示,其中较大的方格表示多网格谱元法计算时采用的单元划分,小的彩色方块表示介质分布。模型中大部分为背景均匀介质,纵横波声速和密度分别为2900 m/s, 1674 m/s和1900 kg/m³,而在模型中部有一条非均匀介质以棋盘格形式分布,每个单元内有5×5个小方格的介质,介质参数相对于背景介质在0~20%的范围内随机分布。在非均匀区域左侧的S点处放置一个脉动点源,产生中心频率为10 Hz的纵波,波形为Ricker子波,在非均匀条形区域右侧放置了4个接收点。

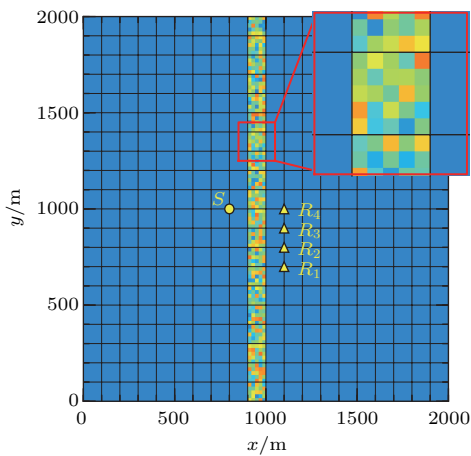


图6 带棋盘形非均匀介质的模型

Fig. 6 The model with a strip of random chessboard media

用多网格谱元法计算该模型,共划分了20×20个正方形单元,单元主网格阶数为6×6,相当于介质中传播的每个最小波长内含5.1个计算节点。由于每个单元内介质分为5×5的小方块,采用5×5的辅助网格即可精确描述单元内的介质分布。计算得到的一个波场快照如图7所示,其中可看到由非均匀区域产生的反射波、透射波和较为复杂的尾波。

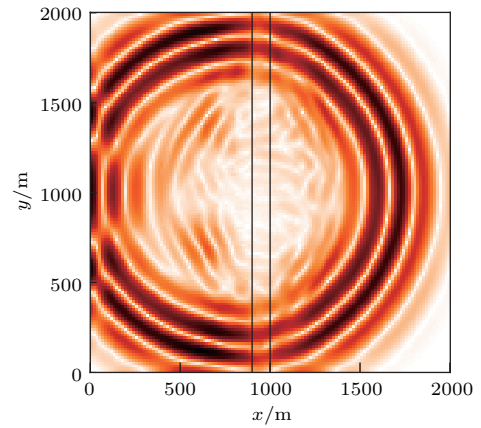
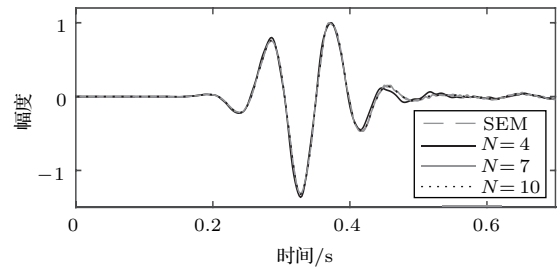
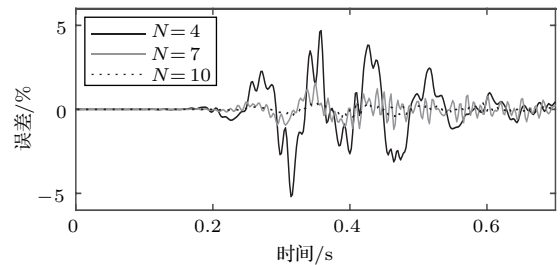


图7 棋盘形非均匀介质中0.5 s时刻的质点位移模的分布

Fig. 7 Snapshot of particle displacement modulus at time 0.5 s for the chessboard model



(a) R₁波形



(b) R₁误差

图8 不同阶多网格谱元法计算的接收点R₁处质点速度水平分量波形对比

Fig. 8 Waveform comparisons for horizontal particle velocity components at receiver R₁ computed by poly-grid spectral element method with different orders

为了进一步验证多网格谱元法的精度和收敛性,我们保持单元和辅助网格划分不变,改变主网格的阶数,进行了多次计算。主网格阶数由4×4变化至10×10,相当于每个最小波长内计算节点数量由3.4增加至8.4,对应的总节点规模由81×81增加至201×201。利用传统谱元法计算了参考解,其中单元划分得很小,使得每个单元内只有单一均匀介质,划分了100×100个单元,阶数为4×4,从而总的计

算节点规模为 401×401 。图8对比了接收点 R_1 处质点速度的水平分量, 以及相对于参考解的误差随计算阶数的变化, 可以看到结果与参考解吻合均较好, 同时误差随阶数升高而减小。

从4个接收点的波形中, 分别计算了相对于参考解的均方根误差 (Root-mean-square error, RMSE), 结果如图9所示, 其中纵坐标采用了对数坐标, 可以清楚地看到结果误差随单元阶数升高的收敛性。当多网格谱元法的单元阶数取7时, 结果均方根误差在0.5%以下, 而计算规模仅为传统谱元法的8%, 此算例表明, 对于介质分布复杂、变化尺度较小的模型, 多网格谱元法可以避免复杂的单元划分, 显著降低计算规模, 并保持较高精度。

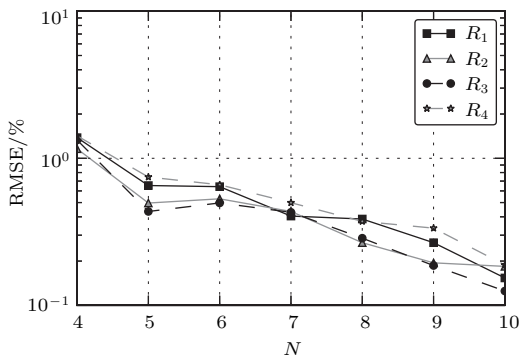


图9 接收点 R_1 – R_4 处质点速度与参考解的均方根误差随多网格谱元法阶数的变化

Fig. 9 Root-mean-square error convergence of particle velocity at receivers R_1 – R_4 computed by poly-grid spectral element method with different orders

4 多网格谱元法的并行化

我们基于消息传递机制 (Message passing interface, MPI), 采用区域分解策略, 将多网格谱元法并行化。如果有一个划分为 N_e 个单元的计算模型, 使用 N_p 个处理器并行计算, 则可将此计算模型均匀分割为 N_p 个子区域, 每个处理器上分配 N_e/N_p 个谱元法单元。由于多网格谱元法中, 单元划分为规则, 因此划分子区域的过程可以自动进行, 并且很容易实现各处理器之间的负载均衡。

多网格谱元法的计算过程包含两个主要步骤: 矩阵准备阶段和方程求解阶段。在矩阵准备阶段, 每个处理器读入对应子区域内的模型参数, 生成单元矩阵和向量, 此过程高度并行化, 不需要各处理器之间的通讯。在方程求解阶段, 用预条件共轭梯

度法迭代求解时, 主要计算量集中在矩阵与向量相乘的部分。矩阵向量的乘积可采用逐元法计算, 此过程中大部分计算都在局部完成。当局部计算完成时, 再将各处理器计算结果相加, 得到全局向量结果在每个子区域内的部分, 此时需要在各处理器之间传递数据, 所需传递的数据为相邻子区域中相邻单元共有节点上的数据。图10为一个处理器与周围相邻处理器传递数据的示意图, 其中 \times 符号标出了不同子区域中相邻单元的共有节点。假设处理器 $P_{i,j}$ 中有 ne_1^2 个单元, 单元阶数为 $N \times N$, 则此处理器上的总节点数为 $(ne_1 \times N + 1)^2$, 与处理器 $P_{i,j}$ 相邻的4个处理器 $P_{i-1,j}$ 、 $P_{i+1,j}$ 、 $P_{i,j-1}$ 和 $P_{i,j+1}$ 各有 $ne_1 \times N + 1$ 个节点上的数值需和处理器 $P_{i,j}$ 相互传递, 而与 $P_{i,j}$ 4个角相邻的处理器 $P_{i-1,j-1}$ 、 $P_{i+1,j-1}$ 、 $P_{i-1,j+1}$ 和 $P_{i+1,j+1}$ 各有1个共有节点上的数值需与 $P_{i,j}$ 相互传递。

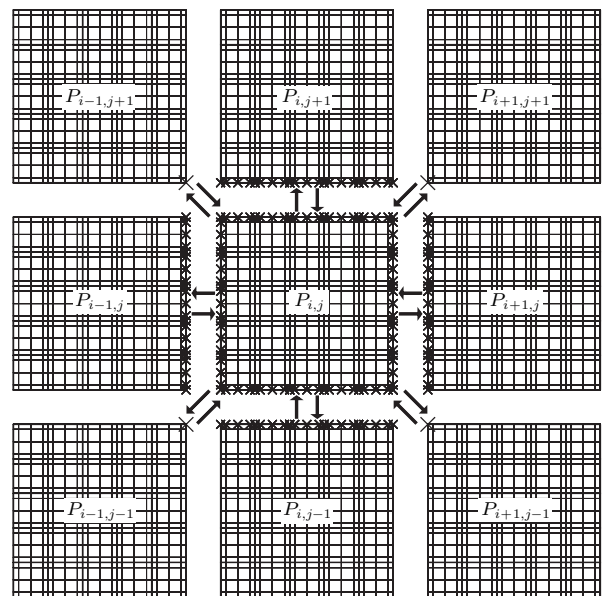


图10 处理器之间数据传递示意

Fig. 10 Data communications between neighboring processors

我们将并行化后的算法在中国科学院超算中心的计算平台“元”上运行, 为了衡量算法的并行性能, 分别进行了强可扩展性和弱可扩展性测试。在强可扩展性测试中, 在不同数目的处理器上运行相同规模的运算, 设问题规模为 N , 在 N_p 个处理器上进行计算所用时间记为 $T(N, N_p)$, 则强可扩展性加速比 $S_s(N, N_p)$ 和并行效率 $E_s(N, N_p)$ 分别用公

式(39)计算:

$$S_s(N, N_p) = \frac{T(N, 1)}{T(N, N_p)}, \quad E_s(N, N_p) = \frac{S_s(N, N_p)}{N_p}. \quad (39)$$

在弱可扩展性测试中, 固定每个处理器上的子区域问题规模, 改变处理器数量, 对比计算所用时间。此时随着处理器数量增加, 总的问题规模线性增加, 所用计算时间应该保持基本不变。设每个处理器上的问题规模为 n , 弱可扩展性并行效率 $E_w(n, N_p)$ 和加速比 $S_w(n, N_p)$ 分别由公式(40)计算:

$$E_w(n, N_p) = \frac{T(n, 1)}{T(n \times N_p, N_p)},$$

$$S_w(n, N_p) = N_p \times E_w(n, N_p). \quad (40)$$

在强可扩展性测试中, 我们使用了 1600×1000 个单元的模型, 单元阶数为 7×7 , 则总的节点数约为 7.8×10^7 。测试得到的加速比和并行效率如图11中实线所示。在弱可扩展性测试中, 每个处理器上的单元数为 50×50 , 单元阶数为 7×7 , 得到的加速比和并行效率如图11中虚线所示。加速比图中点线表示线性加速, 从图中可以看到计算速度随处理器数量的增加而上升, 并行效率随处理器数增加而有所下降, 这是由于处理器数增加后, 各处理器之间的通讯耗时增加。同时, 当处理器数量达到千核时, 仍能保证可接受的并行效率。

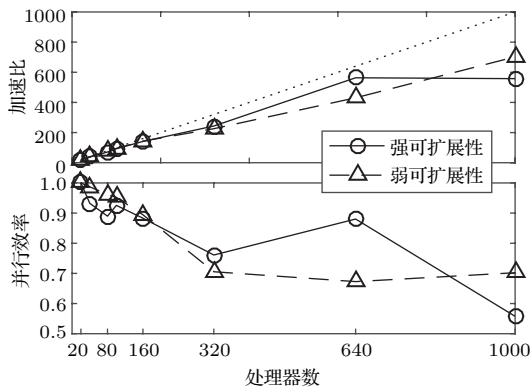


图11 并行多网格谱元法在超算平台上测试得到的加速比和并行效率

Fig. 11 Speedup and efficiency of the parallel poly-grid spectral element method on supercomputers

5 结论与讨论

本文在传统有限元基础上发展了一种多网格方法, 并将其应用于声波和弹性波传播的模拟。这

种多网格谱元法在单元内部引入一组或多组辅助网格, 用以描述介质和外力在单元内的非均匀分布。多网格谱元法在介质参数变化尺度较小的复杂介质波传播问题中具有优势, 我们通过数值算例, 将多网格方法与传统谱元法的计算结果对比, 证实了多网格方法的精度和有效性。当介质分布复杂, 且变化尺度比波长小时, 多网格方法与传统谱元法相比可以减小计算规模, 降低计算时间和内存消耗, 同时避免了复杂的单元划分, 较容易编程实现。此算法适于并行化, 具有较高的加速比和并行效率。因此, 多网格谱元法在多尺度波传播模拟, 如油气储层和生物组织中的声传播模拟等问题中具有良好的应用前景。

致谢 本文部分计算在中国科学院超级计算中心超算平台上完成。

参 考 文 献

- [1] Virieux J. P-SV wave propagation in heterogeneous media: velocity-stress finite-difference method[J]. *Geophysics*, 1986, 51(4): 889-901.
- [2] Fornberg B. The pseudospectral method: comparisons with finite differences for the elastic wave equation[J]. *Geophysics*, 1987, 52(4): 483-501.
- [3] Yomogida K, Benites R. Scattering of seismic waves by cracks with the boundary integral method[J]. *Pure Appl. Geophys.*, 2002, 159(7/8): 1771-1789.
- [4] Seron F, Sanz F. Finite-element method for elastic wave propagation[J]. *Commun. Appl. Numer. Methods*, 1990, 6: 359-368.
- [5] Seriani G, Priolo E. High-order spectral element method for elastic wave modeling[C]. 1992 SEG Annual Meeting, New Orleans, Louisiana, 1992: 1285-1288.
- [6] Komatitsch D, Tromp J. Introduction to the spectral element method for three-dimensional seismic wave propagation[J]. *Geophys. J. Int.*, 1999, 139(3): 806-822.
- [7] Wang X, Seriani G, Lin W. Some theoretical aspects of elastic wave modeling with a recently developed spectral element method[J]. *Sci. China-Phys. Mech. Astron.*, 2007, 50(2): 185-207.
- [8] 林伟军. 弹性波传播模拟的Chebyshev谱元法[J]. *声学学报*, 2007, 32(6): 525-533.
Lin Weijun. The Chebyshev spectral element method for elastic wave simulation[J]. *Acta Acustica*, 2007, 32(6): 525-533.
- [9] Che C, Wang X, Lin W. The Chebyshev spectral element method using staggered predictor and corrector for elastic wave simulations[J]. *Appl. Geophys.*, 2010, 7(2): 174-184.

- [10] Seriani G, Oliveira S P. DFT modal analysis of spectral element methods for acoustic wave propagation[J]. *J. Comput. Acoust.*, 2008, 16(4): 531–561.
- [11] Dauksher W, Emery A F. Accuracy in modeling the acoustic wave equation with Chebyshev spectral finite elements[J]. *Finite Elem. Anal. Des.*, 1997, 26(2): 115–128.
- [12] Seriani G, Oliveira S P. Dispersion analysis of spectral element methods for elastic wave propagation[J]. *Wave Motion*, 2008, 45(6): 729–744.
- [13] Zhu C, Qin G, Zhang J. Implicit Chebyshev spectral element method for acoustics wave equations[J]. *Finite Elem. Anal. Des.*, 2011, 47(2): 184–194.
- [14] de Basabe J D, Sen M K. Grid dispersion and stability criteria of some common finite-element methods for acoustic and elastic wave equations[J]. *Geophysics*, 2007, 72(6): T81–T95.
- [15] Seriani G. 3-D large-scale wave propagation modeling by spectral element method on Cray T3E multiprocessor[J]. *Comput. Method Appl. M.*, 1998, 164(1/2): 235–247.
- [16] Lin W, Wang X, Zhang H. An element by element spectral element method for elastic wave modeling[J]. *Prog. Nat. Sci.*, 2006, 16(1): 21–29.
- [17] de Basabe J D, Sen M K. A comparison of finite-difference and spectral-element methods for elastic wave propagation in media with a fluid-solid interface[J]. *Geophys. J. Int.*, 2015, 200(1): 278–298.
- [18] Mizutani H, Geller R J, Takeuchi N. Comparison of accuracy and efficiency of time-domain schemes for calculating synthetic seismograms[J]. *Phys. Earth Planet In.*, 2000, 119(1/2): 75–97.
- [19] Seriani G. Double-grid Chebyshev spectral elements for acoustic wave modeling[J]. *Wave Motion*, 2004, 39(4): 351–360.
- [20] Seriani G, Su C. Wave propagation modeling in highly heterogeneous media by a poly-grid Chebyshev spectral element method[J]. *J. Comput. Acoust.*, 2012, 20(2): 1240004.
- [21] Capdeville Y, Guillot L, Marigo J J. 2-D non-periodic homogenization to upscale elastic media for P-SV waves[J]. *Geophys. J. Int.*, 2010, 182(2): 903–922.
- [22] Capdeville Y, Marigo J J. A non-periodic two scale asymptotic method to take account of rough topographies for 2-D elastic wave propagation[J]. *Geophys. J. Int.*, 2013, 192(1): 163–189.
- [23] Hou T, Wu X. A multiscale finite element method for elliptic problems in composite materials and porous media[J]. *J. Comput. Phys.*, 1997, 134(1): 169–189.
- [24] Abdulle A, Engquist B. Finite element heterogeneous multiscale methods with near optimal computational complexity[J]. *Multiscale Model. Sim.*, 2008, 6(4): 1059–1084.
- [25] Millward R. A new adaptive multiscale finite element method with applications to high contrast interface problems[D]. Dissertation for the Doctoral Degree. Bath: University of Bath, 2011: 103–143.
- [26] Joulaian M, Duczek S, Gabbert U, et al. Finite and spectral cell method for wave propagation in heterogeneous materials[J]. *Comput. Mech.*, 2014, 54(3): 661–675.
- [27] Mercerat E D, Glinsky N. A nodal high-order discontinuous Galerkin method for elastic wave propagation in arbitrary heterogeneous media[J]. *Geophys. J. Int.*, 2015, 201(2): 1099–1116.
- [28] Canuto C, Hussaini M, Quarteroni A, et al. Spectral methods: fundamentals in single domains[M]. Berlin: Springer-Verlag, Berlin, 2006.
- [29] Bazzi G, Anderheggen E. The ρ -family of algorithms for time-step integration with improved numerical dissipation[J]. *Earthq. Eng. Struct. D.*, 1982, 10(4): 537–550.
- [30] Liu S, Yang D, Dong X, et al. Element-by-element parallel spectral-element methods for 3-D teleseismic wave modeling[J]. *Solid Earth*, 2017, 8(5): 969–986.