

对声波和弹性波传播模拟的 Hamilton 系统方法

曹 禹 杨孔庆

(兰州大学物理系, 兰州 730000)

(2002 年 11 月 1 日收到, 2003 年 2 月 18 日收到修改稿)

建立了离散化网格上的准粒子体系, 引入此体系的 Hamilton 系统描述, 用来模拟声波和弹性波的传播. 介绍了准粒子间相互作用的九点模型并给出相互作用系数. 证明了 Hamilton 系统方法和声波、弹性波方程的关系, 并给出两个方法中所使用物理量的关系. 使用辛算法对给定的介质模型进行数值模拟.

关键词: Hamilton 系统方法, 九点相互作用模型, 声波方程, 弹性波方程, 辛算法

PACC: 6120J

1. 引言

声波和弹性波方程, 是用偏微分方程描述波在连续介质中的行为特性. 波传播的普通数值求解方法就是用有限差分对原方程在空间、时间离散, 以便通过计算机模拟对波动现象进行研究^[1, 2]. 但是, 在各向异性和复杂介质中用有限差分法对波传播进行模拟是困难的, 因为介质在几何形态复杂时或在强间断面下物理特性是不同的. 近来, “声格固体” (PLS) 方法作为微观尺度下在复杂固体介质中建立波动模型的一种可能方法被提出^[3-6]. 用这种方法模拟波传播的基础是单位质量的准粒子在离散化的网格上以常速运动而在格点处相互间发生碰撞, 这种运动在网格中各个准粒子间以波的形式进行传播. 本文提出的 Hamilton 系统方法就是在此基础上发展而来的新方法^[7, 8].

声波和弹性波就是弹性介质中质点振动的传播, 而这种振动的传播是靠质点间的相互作用来维系的, 声波和弹性波方程就是研究这种作用和振动的关系, 并将其在空间上连续化而建立起来的. 如果只考虑离散质点间的作用和振动的传播, 当然也可以对波传播进行模拟. 因为这种方法是在微观尺度下的, 所以对几何形态复杂或存在强间断面的介质, 可以进行更为细致的描述和计算.

本文将建立一个在离散化网格上的准粒子体系, 引入准粒子间相互作用势, 这个在时间上连续而空间上离散的体系是被 Hamilton 力学所描述的, 准粒子是按照 Hamilton 正则方程运动的. 这种方法可

以没有本质近似的模拟复杂介质中的波传播^[9]. 对于准粒子间相互作用力, 采用了九点作用力模型, 即中心准粒子只与周围 4 个最近邻和 4 个次近邻准粒子相互作用, 与其余准粒子不发生作用. 同时给出了相互作用系数.

本文还给出用 Hamilton 系统方法描述的波动和声波方程以及弹性动力学方程组描述的波动之间的关联和物理量之间的联系. 声波方程及弹性动力学方程组是基于应力和应变之间的关系再加守恒定律而建立的, 描述这一过程的物理量是弹性模量、质量密度、Poisson 比以及与此相关的 P 波速度; 本文的 Hamilton 系统描述下的物理量则是准粒子间相互作用系数以及准粒子质量, 两者之间相互关系被给出并加以证明. 为了模拟波动, 必须给出系统初始振动, 本文选择点振源, 即外力只作用在一个准粒子上.

计算 Hamilton 系统方法中运动方程的数值解. 这和分子动力学方法很接近, 都是从物理系统确定的微观描述出发, 用运动方程来计算体系的性质. 只是本文需要得到的是系统的整体运动所呈现出的波动特性, 而非微观特性和统计后的物理量. 对系统描述是用特定的 Hamilton 系统方法描述, 而非 Lagrange 或 Newton 运动方程. 从计算数学的观点来看, Hamilton 系统方法是一个初值问题, 即已知初值对时间积分. 对这种问题已发展了大量的算法, 不过因为 Hamilton 正则方程在辛变换下形式不变, 而正则方程的解由一个单参数辛群生成. 基于这些 Hamilton 力学基本原理, 20 世纪 80 年代初, Ruth 和冯康提出了 Hamilton 系统的辛算法, 辛算法就是保持 Hamilton 系统辛结构的积分算法^[10]. 本文分别用生成函数构

造的二阶辛差格式(Euler 中点格式)和四阶辛 Runge-Kutta 方法来计算运动方程的数值解^[11,12]. 最后对于均匀介质和斜界面两层介质中传播的声波和弹性波做出模拟结果.

2. 声波和弹性波传播的 Hamilton 系统描述

引入二维离散化网格上的准粒子体系,体系处于平衡位置(图 1),考虑准粒子间相互作用势,体系由下述 Hamilton 量描述:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} (p_{x_i}^2 + p_{y_i}^2) + \phi(q_{x_1}, \dots, q_{x_N}, q_{y_1}, \dots, q_{y_N}). \quad (1)$$

这里微观准粒子用质点来表示,质点之间具有相互作用.在(1)式中, N 表示粒子总数即网格点的总数, m_i 代表第*i*个粒子的质量, p_{x_i}, p_{y_i} 分别为第*i*个粒子在*x, y*方向的动量, q_{x_i}, q_{y_i} 分别为第*i*个粒子在*x, y*方向离开平衡位置的位移.(1)式等号右端第一项为体系的总动能,第二项为体系粒子之间的相互作用势能,其表达形式仅与粒子的位移有关,而与其动量和时间无关.

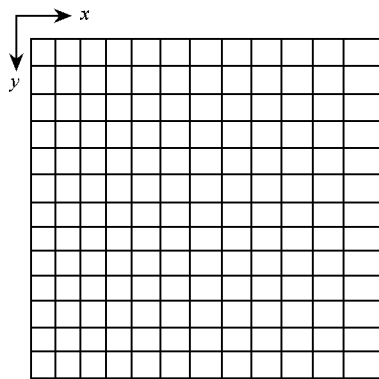


图 1 二维离散化网格上的准粒子体系

对 ϕ 不同的体系势能有不同的表达形式.如果准粒子间相互作用和相对位移成线性关系,那么体系的势能等于 ϕ 在平衡位置处的 Taylor 展开二阶近似表达,并假设微观准粒子具有不可分辨性,其形式可写为

$$\phi = \phi_0 + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \phi}{\partial q_{x_i}} \bigg|_0 q_{x_i} + \frac{\partial \phi}{\partial q_{y_i}} \bigg|_0 q_{y_i} \right) + \sum_{i,j=1}^N \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial q_{x_i} \partial q_{x_j}} \bigg|_0 q_{x_i} q_{x_j} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial q_{x_i} \partial q_{y_j}} \bigg|_0 q_{x_i} q_{y_j} \right. \\ \left. + \frac{\partial^2 \phi}{\partial q_{y_i} \partial q_{x_j}} \bigg|_0 q_{y_i} q_{x_j} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial q_{y_i} \partial q_{y_j}} \bigg|_0 q_{y_i} q_{y_j} \right). \quad (2)$$

由于处于平衡位置(2)式中 ϕ_0 为常数, ϕ 的一阶导数在平衡位置处为零,而二阶偏导数矩阵在平衡位置处是正定的.(2)式可等价表示为

$$\phi = \phi_0 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \alpha_{ij} q_{x_i} q_{x_j} + \beta_{ij} q_{x_i} q_{y_j} + \gamma_{ij} q_{y_i} q_{x_j} + \delta_{ij} q_{y_i} q_{y_j}, \quad (3)$$

式中 $\alpha_{ij}, \beta_{ij}, \gamma_{ij}, \delta_{ij}$ 分别代表粒子相互作用系数.体系的 Hamilton 量的线性形式为

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} (p_{x_i}^2 + p_{y_i}^2) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \alpha_{ij} q_{x_i} q_{x_j} + \beta_{ij} q_{x_i} q_{y_j} + \gamma_{ij} q_{y_i} q_{x_j} + \delta_{ij} q_{y_i} q_{y_j}. \quad (4)$$

本文中准粒子间互作用取这样的形式:处于中心位置的准粒子只受邻近 8 点准粒子的作用,与其他准粒子间没有直接作用力,选取二维离散化网格上下左右的间距相等,则 8 点中所处相同方向上的准粒子和中心准粒子互作用关系相同.

对于声波的传播过程不存在切应力,在上述模型中准粒子间不存在与不同方向相对位移 $q_{x_i} q_{y_j}$ 相关的互作用,即 $\beta_{ij} = 0$.如果考虑声波在各向同性介质中传播,则在不同方向上,准粒子间相互作用和相对位移关系完全相同,即 $\alpha_{ij} = \gamma_{ij}$ (图 2).则准粒子相互作用系数的选择为

$$\begin{aligned} \beta_{ij} &= 0 \\ \alpha_{ij} &= \gamma_{ij} = -\kappa & (j = i \pm n, i \pm 1), \\ \alpha_{ij} &= \gamma_{ij} = -\lambda & (j = i + n \pm 1, i - n \pm 1), \\ \alpha_{ij} &= \gamma_{ij} = 4\kappa + 4\lambda & (j = i), \\ \alpha_{ij} &= \gamma_{ij} = 0 & (j \neq i \pm n, i \pm 1, \\ & & i + n \pm 1, i - n \pm 1, i), \end{aligned} \quad (5)$$

式中 κ 为上下左右最近邻 4 点作用力系数, λ 为对角顶点次近邻 4 点作用力系数,因为最近邻间距小于次近邻间距,而准粒子间间距越小互作用越大,所以 $\kappa > \lambda$. κ 和 λ 与声波波速以及介质密度有关,这将在下一节讨论.(5)式中的 n 为网格中 y 方向上的格点数,如果采用的是正方形网格,则有 $N = n \times n$.对于网格中格点的编号有如下的规则:从左到右,自上而下编号为 1,2,...,n,n+1,n+2,...,2n,...,N(图 3).则 $i \pm n$ 分别代表下上两点最近邻,两者在

同一方向上. $i \pm 1$ 分别代表右、左两点最近邻, 两者在同一方向上. $i - n - 1, i + n + 1$ 分别代表左上和右下两点次近邻, 两者在同一方向上. $i - n + 1, i + n - 1$ 分别代表右上和左下两点次近邻, 两者在同一方向上.

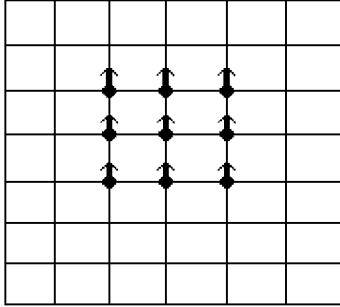


图 2 声波传播准粒子体系相互作用模型

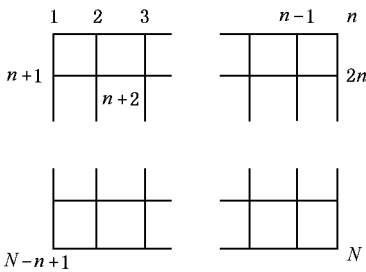


图 3 格点编号规则

由 Hamilton 正则方程

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p},$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q},$$

将 (5) 式代入 (4) 式, 所得 Hamilton 量代入上述正则方程, 且假设每个准粒子的质量相等, 即 $m_i = m$, 可得

$$\dot{q}_{x_i} = \frac{p_{x_i}}{m},$$

$$\begin{aligned} \dot{p}_{x_i} = & \kappa(q_{x_{i+n}} - q_{x_i}) + \kappa(q_{x_{i-n}} - q_{x_i}) \\ & + \kappa(q_{x_{i+1}} - q_{x_i}) + \kappa(q_{x_{i-1}} - q_{x_i}) \\ & + \lambda(q_{x_{i+n+1}} - q_{x_i}) + \lambda(q_{x_{i-n-1}} - q_{x_i}) \\ & + \lambda(q_{x_{i+n-1}} - q_{x_i}) + \lambda(q_{x_{i-n+1}} - q_{x_i}), \end{aligned}$$

$$\dot{q}_{y_i} = \frac{p_{y_i}}{m},$$

$$\begin{aligned} \dot{p}_{y_i} = & \kappa(q_{y_{i+n}} - q_{y_i}) + \kappa(q_{y_{i-n}} - q_{y_i}) \\ & + \kappa(q_{y_{i+1}} - q_{y_i}) + \kappa(q_{y_{i-1}} - q_{y_i}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & + \lambda(q_{y_{i+n+1}} - q_{y_i}) + \lambda(q_{y_{i-n-1}} - q_{y_i}) \\ & + \lambda(q_{y_{i+n-1}} - q_{y_i}) + \lambda(q_{y_{i-n+1}} - q_{y_i}). \end{aligned} \quad (6)$$

从 (6) 式可知, 在选择如 (5) 式的相互作用系数时, x, y 两个不同方向上的动量和位移, 所遵循的运动方程是完全一样的, 且各自独立. 这和声波是标量波, 且考虑声波在各向同性介质中传播的假设是符合的. 从 (6) 式还可看出, 准粒子间相互作用力和相对位移之间成正比关系, 这同样符合前面推导中的线性假设. 由此可知, 对 (5) 式相互作用系数的选择是合理的.

对于弹性波的传播过程, 由于弹性波动是矢量波动, 准粒子间存在和不同方向相对位移 $q_{x_i} q_{y_j}$ 相关的相互作用, 即 $\beta_{ij} \neq 0$. 且即使考虑声波在各向同性介质中传播, 在不同方向上准粒子间相互作用和相对位移关系也不相同, 即 $\alpha_{ij} \neq \gamma_{ij}$, 但在相同方向上的两准粒子, 对中心准粒子的相互作用和相对位移关系却是相同的 (图 4). 基于以上考虑, 则准粒子相互作用系数的选择为

$$\begin{aligned} \alpha_{ij} = & \begin{cases} -a & (j = i \pm 1), \\ -b & (j = i \pm n), \\ 2a + 2b & (j = i), \\ 0 & (j \neq i \pm 1, i \pm n, i), \end{cases} \\ \beta_{ij} = & \begin{cases} -c & (j = i + n + 1, i - n - 1), \\ c & (j = i + n - 1, i - n + 1), \\ 0 & (j \neq i + n \pm 1, i - n \pm 1), \end{cases} \\ \gamma_{ij} = & \begin{cases} -b & (j = i \pm 1), \\ -a & (j = i \pm n), \\ 2a + 2b & (j = i), \\ 0 & (j \neq i \pm 1, i \pm n, i), \end{cases} \end{aligned} \quad (7)$$

式中, a, b 是与同方向相对位移相关的相互作用力系数, 它对应于表示正应力和应变关系的弹性模量. 这种作用只是存在于最近邻 4 点, 而与次近邻 4 点无关. 而 c 是与不同方向相对位移相关的相互作用力系数, 它对应于表示切应力和应变关系的弹性模量. 这种作用只是存在于次近邻 4 点, 而与最近邻 4 点无关. 网格中格点编号的规则同上.

将 (7) 式代入 (4) 式, 所得 Hamilton 量代入 Hamilton 正则方程, 且假设每个准粒子的质量相等, 可得

$$\dot{q}_{x_i} = \frac{p_{x_i}}{m},$$

$$\dot{p}_{x_i} = b(q_{x_{i+n}} - q_{x_i}) + b(q_{x_{i-n}} - q_{x_i})$$

$$\begin{aligned}
& + \alpha(q_{x_{i+1}} - q_{x_i}) + \alpha(q_{x_{i-1}} - q_{x_i}) \\
& + \alpha(q_{y_{i+n+1}} - q_{y_{i+n-1}}) + \alpha(q_{y_{i-n-1}} - q_{y_{i-n+1}}), \\
\dot{q}_{y_i} &= \frac{p_{y_i}}{m}, \\
\dot{p}_{y_i} &= \alpha(q_{y_{i+n}} - q_{y_i}) + \alpha(q_{y_{i-n}} - q_{y_i}) \\
& + b(q_{y_{i+1}} - q_{y_i}) + b(q_{y_{i-1}} - q_{y_i}) \\
& + \alpha(q_{x_{i+n+1}} - q_{x_{i+n-1}}) + \alpha(q_{x_{i-n-1}} - q_{x_{i-n+1}}).
\end{aligned} \quad (8)$$

从(8)式可知, x, y 两个不同方向上的动量和位移, 所遵循的运动方程相互间是有耦合作用的. 这是因为弹性波是矢量波的原因. 但是, 准粒子间相互作用力和相对位移之间成正比的关系不变, 这同样符合前面推导中的线性假设. 由此可知, 对(7)式相互作用系数的选择是合理的.

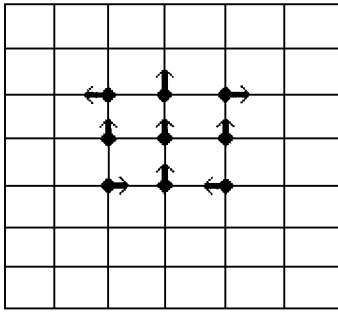


图4 弹性波传播准粒子体系相互作用模型

以上是以二维体系为例, 实质上此方法很容易推广到三维体系中. 由于本文以下对声波和弹性波的数值模拟都是二维体系, 所以在此只介绍二维体系的 Hamilton 描述方法.

3. Hamilton 系统方法与声波及弹性波方程的关系

传统声波方程就是用波动方程来表示的, 在二维体系中为

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = v^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \quad (9)$$

式中 x, y 为坐标, t 为时间, u 为位移函数, v 为波传播的速度. 它们和 Hamilton 系统方法所导出的方程组(6)之间相互关联. 方程组(6)的一阶4个方程可化为二阶2个方程

$$\ddot{p}_{x_i} = \frac{\kappa}{m}(q_{x_{i+1}} + q_{x_{i-1}} - 2q_{x_i}) + \frac{\kappa}{m}(q_{x_{i+n}} + q_{x_{i-n}} - 2q_{x_i})$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\lambda}{m}(q_{x_{i+n+1}} + q_{x_{i-n-1}} - 2q_{x_i}) \\
& + \frac{\lambda}{m}(q_{x_{i+n-1}} + q_{x_{i-n+1}} - 2q_{x_i}), \\
\ddot{p}_{y_i} &= \frac{\kappa}{m}(q_{y_{i+1}} + q_{y_{i-1}} - 2q_{y_i}) + \frac{\kappa}{m}(q_{y_{i+n}} + q_{y_{i-n}} - 2q_{y_i}) \\
& + \frac{\lambda}{m}(q_{y_{i+n+1}} + q_{y_{i-n-1}} - 2q_{y_i}) \\
& + \frac{\lambda}{m}(q_{y_{i+n-1}} + q_{y_{i-n+1}} - 2q_{y_i}).
\end{aligned} \quad (10)$$

(10)式中的2个方程形式上是一样的, 它们都是(9)式的一种空间离散格式, 下面仅以(10)式中 x 方向的方程为例给予说明. 令正方形网格中相邻格点之间的间距为 d , 连续的偏导和离散量之间的关系为

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 q_x}{\partial t^2} &= \ddot{q}_{x_i}, \\
\frac{\partial^2 q_x}{\partial x^2} &\approx \frac{q_{x_{i+1}} + q_{x_{i-1}} - 2q_{x_i}}{d^2}, \\
\frac{\partial^2 q_x}{\partial y^2} &\approx \frac{q_{x_{i+n}} + q_{x_{i-n}} - 2q_{x_i}}{d^2},
\end{aligned} \quad (11)$$

式中 q_x 为在 x 方向离平衡位置的连续位移函数. 而 q_x 沿方向 l 的方向导数 $\frac{\partial q_x}{\partial l} = \frac{\partial q_x}{\partial x} \cos \varphi + \frac{\partial q_x}{\partial y} \sin \varphi$, φ 为 x 轴顺时针转到方向 l 的转角. $i-n-1$ 和 $i+n+1$ 代表左上和右下两点次近邻, 两者在同一方向上 l_1 , 所对应的转角为 φ_1 , 如果采用正方形网格(图2)则 $\varphi_1 = 45^\circ$. $i-n+1$ 和 $i+n-1$ 代表右上和左下两点次近邻, 两者在同一方向 l_2 上, 所对应的转角为 φ_2 , 则 $\varphi_2 = 135^\circ$. 有

$$\begin{aligned}
\frac{\partial q_x}{\partial l_1} &= \frac{\sqrt{2}}{2} \left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_x}{\partial y} \right), \\
\frac{\partial q_x}{\partial l_2} &= \frac{\sqrt{2}}{2} \left(-\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_x}{\partial y} \right);
\end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 q_x}{\partial l_1^2} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 q_x}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 q_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 q_x}{\partial y^2} \right), \\
\frac{\partial^2 q_x}{\partial l_2^2} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 q_x}{\partial x^2} - 2 \frac{\partial^2 q_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 q_x}{\partial y^2} \right).
\end{aligned} \quad (13)$$

(12)式为 q_x 沿方向 l_1 和方向 l_2 的方向导数. 将(12)式代入自身, 可得(13)式. 连续的方向导数和离散量之间的关系为

$$\frac{\partial^2 q_x}{\partial l_1^2} \approx \frac{q_{x_{i+n+1}} + q_{x_{i-n-1}} - 2q_{x_i}}{d^2},$$

$$\frac{\partial^2 q_x}{\partial t^2} \approx \frac{q_{x_{i+n-1}} + q_{x_{i-n+1}} - 2q_{x_i}}{d^2}. \quad (14)$$

将(14)式代入(13)式,所得到的结果和(11)式一起代入(10)式的第一式中,可得

$$\frac{\partial^2 q_x}{\partial t^2} = \frac{(\kappa + \lambda)d^2}{m} \left(\frac{\partial^2 q_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 q_x}{\partial y^2} \right). \quad (15)$$

因为(10)式中的两个方程形式上是一样的,且相互之间没有耦合,所以可以推出在 y 方向上位移函数遵循(15)式一样的规律.

比较(15)式和(9)式,且考虑到波动方程是标量方程,在不同的方向上,位移函数遵循一样的规律.

即 $u = q_x = q_y$, 定义二维质量密度 $\rho = \frac{m}{d^2}$ 和比例系

数 $b_0 = \frac{\lambda}{\kappa}$ ($0 < b_0 < 1$), 可得

$$\begin{aligned} m &= \rho d^2, \\ \kappa &= v^2 \rho \frac{1}{1 + b_0}, \\ \lambda &= v^2 \rho \frac{b_0}{1 + b_0}. \end{aligned} \quad (16)$$

(16)式给出了 Hamilton 系统方法中准粒子间相互作用系数、准粒子质量和波动方程中的波速、质量密度以及网格间距的关系.

传统弹性波方程在二维均匀介质中,方程形式为

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= (\nu + 2\mu) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \\ &\quad + (\nu + \mu) \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y}, \\ \rho \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} &= (\nu + 2\mu) \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \mu \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \\ &\quad + (\nu + \mu) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}. \end{aligned} \quad (17)$$

(17)式中, u 为在 x 方向离开平衡位置的连续位移函数,即 $u = q_x$; w 为在 y 方向上位移函数,即 $w = q_y$; ρ 为介质的质量密度; μ 为剪切弹性模量; ν 为 Lamé 系数.除此之外,还有两个重要的物理量: P 波速度 v_P 和泊松比 c_0 . μ , ν 与它们的关系为

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{1}{2} v_P^2 \rho \frac{1 - 2c_0}{1 - c_0}, \\ \nu &= v_P^2 \rho \frac{c_0}{1 - c_0}. \end{aligned} \quad (18)$$

v_P , ρ , c_0 通常是在弹性波方程的数值模拟中使用的物理量.

将(8)式的一阶4个方程可化为二阶2个方程

$$\begin{aligned} \ddot{p}_{x_i} &= \frac{a}{m} (q_{x_{i+1}} + q_{x_{i-1}} - 2q_{x_i}) \\ &\quad + \frac{b}{m} (q_{x_{i+n}} + q_{x_{i-n}} - 2q_{x_i}) \\ &\quad + \frac{c}{m} (q_{y_{i+n+1}} + q_{y_{i-n-1}} - q_{y_{i+n-1}} - q_{y_{i-n+1}}), \\ \ddot{p}_{y_i} &= \frac{b}{m} (q_{y_{i+1}} + q_{y_{i-1}} - 2q_{y_i}) \\ &\quad + \frac{a}{m} (q_{y_{i+n}} + q_{y_{i-n}} - 2q_{y_i}) \\ &\quad + \frac{c}{m} (q_{x_{i+n+1}} + q_{x_{i-n-1}} - q_{x_{i+n-1}} - q_{x_{i-n+1}}). \end{aligned} \quad (19)$$

连续的偏导和离散量之间的关系为

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 q_x}{\partial t^2} &= \ddot{q}_{x_i}, \\ \frac{\partial^2 q_x}{\partial x^2} &\approx \frac{q_{x_{i+1}} + q_{x_{i-1}} - 2q_{x_i}}{d^2}, \\ \frac{\partial^2 q_x}{\partial y^2} &\approx \frac{q_{x_{i+n}} + q_{x_{i-n}} - 2q_{x_i}}{d^2}, \\ \frac{\partial^2 q_y}{\partial t^2} &= \ddot{q}_{y_i}, \\ \frac{\partial^2 q_y}{\partial x^2} &\approx \frac{q_{y_{i+1}} + q_{y_{i-1}} - 2q_{y_i}}{d^2}, \\ \frac{\partial^2 q_y}{\partial y^2} &\approx \frac{q_{y_{i+n}} + q_{y_{i-n}} - 2q_{y_i}}{d^2}. \end{aligned} \quad (20)$$

又因为

$$\frac{\partial q_x}{\partial x} \approx \frac{q_{x_{i+1}} - q_{x_{i-1}}}{2d}, \quad (21a)$$

$$\frac{\partial q_x}{\partial y} \approx \frac{q_{x_{i+n}} - q_{x_{i-n}}}{2d}, \quad (21b)$$

$$\frac{\partial q_y}{\partial x} \approx \frac{q_{y_{i+1}} - q_{y_{i-1}}}{2d}, \quad (21c)$$

$$\frac{\partial q_y}{\partial y} \approx \frac{q_{y_{i+n}} - q_{y_{i-n}}}{2d}, \quad (21d)$$

将(21b)(21d)式分别代入(21a)(21c)式,可得

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 q_x}{\partial x \partial y} &\approx \frac{q_{x_{i+n+1}} + q_{x_{i-n-1}} - q_{x_{i+n-1}} - q_{x_{i-n+1}}}{4d^2}, \\ \frac{\partial^2 q_y}{\partial x \partial y} &\approx \frac{q_{y_{i+n+1}} + q_{y_{i-n-1}} - q_{y_{i+n-1}} - q_{y_{i-n+1}}}{4d^2}, \end{aligned} \quad (22)$$

将(20)(22)式代入(19)式,可得

$$\frac{\partial^2 q_x}{\partial t^2} \approx \frac{ad^2}{m} \frac{\partial^2 q_x}{\partial x^2} + \frac{bd^2}{m} \frac{\partial^2 q_x}{\partial y^2}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{4cd^2}{m} \frac{\partial^2 q_y}{\partial x \partial y}, \\
 \frac{\partial^2 q_y}{\partial t^2} & \approx \frac{ad^2}{m} \frac{\partial^2 q_y}{\partial y^2} + \frac{bd^2}{m} \frac{\partial^2 q_y}{\partial x^2} \\
 & + \frac{4cd^2}{m} \frac{\partial^2 q_x}{\partial x \partial y}. \quad (23)
 \end{aligned}$$

将(23)式与(17)式进行比较,考虑二维质量密度 ρ

$$= \frac{m}{d^2}, \text{可得}$$

$$\begin{aligned}
 m &= \rho d^2, \\
 a &= v_p^2 \rho, \\
 b &= v_p^2 \rho \frac{1-2c_0}{2-2c_0}, \\
 c &= v_p^2 \rho \frac{1}{8(1-c_0)}. \quad (24)
 \end{aligned}$$

(24)式给出了 Hamilton 系统方法中准粒子间相互作用系数、准粒子质量和弹性波方程中的 P 波波速、质量密度、泊松比以及网格间距的关系。

4. Hamilton 系统描述方法的辛算法

对(6)(8)式进行数值计算,并考虑到(16), (24)式给出的关系,就可以对声波和弹性波进行模拟.在此分别用生成函数构造二阶辛差分格式(Euler中点格式)和四阶辛 Runge-Kutta 方法来计算运动方程的数值解.在给出这两个差分格式之前,先讨论振动源的选择问题.

为了使(6)(8)式的数值计算可以模拟波动过程,必须给它初始振动,在这里选择一个振动源,即将一个外力作用在一个准粒子上.这时系统的总能量还要加上外力做的功.即

$$H_{\text{tol}} = H + H_0, \quad (25)$$

式中 H 为系统本身的 Hamilton 量, H_0 为外力做的功, H_{tol} 为系统总能量.

$$H_0 = \delta_i^{i_0} F(t) (q_{x_i} \cos \beta + q_{y_i} \sin \beta),$$

$$\delta_i^{i_0} = \begin{cases} 0 & i \neq i_0, \\ 1 & i = i_0, \end{cases} \quad (26)$$

式中 $F(t)$ 为外力的大小,它只是时间的函数; β 为 x 轴沿顺时针转到外力方向的转角, $\beta \in [0, \pi]$; i_0 为受力准粒子的编号.这里选择 $F(t)$ 的函数形式为

$$F(t) = A [1 - \tau(t - \phi_0)^2] \exp\left[-\frac{\tau(t - \phi_0)^2}{2}\right], \quad (27)$$

式中 A 为振幅, τ 为线频率, ϕ_0 为相位角.

(6)式和(8)式都是 Hamilton 正则方程,它们的解是一个单参量的辛变换.如果将(6)(8)式离散化,要求使离散化的方程保持系统原有的辛结构,即使它的离散相流可看成一系列离散辛变换,从而保持了一系列相面积和相体积守恒,这样的离散化就是辛算法.这里给出用第二类生成变换生成的一个辛变换,

$$\begin{aligned}
 P^k - p^k &= -\Delta t \frac{\partial H(P, q)}{\partial q^k}, \\
 Q^k - q^k &= \Delta t \frac{\partial H(P, q)}{\partial P^k}. \quad (28)
 \end{aligned}$$

(28)式中 Δt 为时间步长, k 为时间序列.将 H_{tol} 代入(28)式,可得和(6)式对应的离散化的方程

$$\begin{aligned}
 P_{x_i}^{k+1} &= P_{x_i}^k + \Delta t \kappa (q_{x_{i+1}}^k + q_{x_{i+n}}^k + q_{x_{i-1}}^k \\
 &+ q_{x_{i-n}}^k - 4q_{x_i}^k) + \Delta t \lambda (q_{x_{i+n+1}}^k \\
 &+ q_{x_{i+n-1}}^k + q_{x_{i-n+1}}^k + q_{x_{i-n-1}}^k \\
 &- 4q_{x_i}^k) + \Delta t \delta_i^{i_0} F(t) \cos \beta, \\
 q_{x_i}^{k+1} &= q_{x_i}^k + \frac{\Delta t}{m} p_{x_i}^{k+1}, \\
 P_{y_i}^{k+1} &= P_{y_i}^k + \Delta t \kappa (q_{y_{i+1}}^k + q_{y_{i+n}}^k + q_{y_{i-1}}^k \\
 &+ q_{y_{i-n}}^k - 4q_{y_i}^k) + \Delta t \lambda (q_{y_{i+n+1}}^k \\
 &+ q_{y_{i+n-1}}^k + q_{y_{i-n+1}}^k + q_{y_{i-n-1}}^k \\
 &- 4q_{y_i}^k) + \Delta t \delta_i^{i_0} F(t) \sin \beta, \\
 q_{y_i}^{k+1} &= q_{y_i}^k + \frac{\Delta t}{m} p_{y_i}^{k+1}. \quad (29)
 \end{aligned}$$

同理和(8)式对应的离散化方程

$$\begin{aligned}
 P_{x_i}^{k+1} &= P_{x_i}^k + \Delta t \alpha (q_{x_{i+1}}^k + q_{x_{i-1}}^k - 2q_{x_i}^k) \\
 &+ \Delta t \kappa (q_{x_{i+n}}^k + q_{x_{i-n}}^k - 2q_{x_i}^k) \\
 &+ \Delta t \alpha (q_{y_{i+n+1}}^k - q_{y_{i+n-1}}^k - q_{y_{i-n+1}}^k + q_{y_{i-n-1}}^k) \\
 &+ \Delta t \delta_i^{i_0} F(t) \cos \beta, \\
 P_{y_i}^{k+1} &= P_{y_i}^k + \Delta t \kappa (q_{y_{i+1}}^k + q_{y_{i-1}}^k - 2q_{y_i}^k) \\
 &+ \Delta t \alpha (q_{y_{i+n}}^k + q_{y_{i-n}}^k - 2q_{y_i}^k) \\
 &+ \Delta t \alpha (q_{x_{i+n+1}}^k - q_{x_{i+n-1}}^k - q_{x_{i-n+1}}^k + q_{x_{i-n-1}}^k) \\
 &+ \Delta t \delta_i^{i_0} F(t) \sin \beta, \\
 q_{x_i}^{k+1} &= q_{x_i}^k + \frac{\Delta t}{m} p_{x_i}^{k+1}, \\
 q_{y_i}^{k+1} &= q_{y_i}^k + \frac{\Delta t}{m} p_{y_i}^{k+1}. \quad (30)
 \end{aligned}$$

(29)式和(30)式都是二阶精度的辛格式,如果需要更高精度的计算,可以选用四阶 Runge-Kutta 格

式,可是 Runge-Kutta方法不是一个辛算法,而是一个耗散的算法.对于本文的系统, H_{tol} 在整个时间演化的过程中是守恒的,所以 Runge-Kutta 方法不适合解本文的问题.为了解决这一矛盾,这里使用辛 Runge-Kutta 格式,这个格式保持所有的二次守恒量不变.对于本文这样的可分系统即 $H(p, q) = U(p) + V(q)$ 可以构造一类显式辛 Runge-Kutta 格式

$$\begin{aligned} p_1 &= p^k + \Delta t r_1 f(q^k), \\ q_1 &= q^k + \Delta t s_1 g(p_1), \\ p_2 &= p_1 + \Delta t r_2 f(q_1), \\ q_2 &= q_1 + \Delta t s_2 g(p_2), \\ p_3 &= p_2 + \Delta t r_3 f(q_2), \\ q_3 &= q_2 + \Delta t s_3 g(p_3), \\ p^{k+1} &= p_3 + \Delta t \gamma_4 f(q_3), \\ q^{k+1} &= q_3 + \Delta t s_4 g(p^{k+1}), \end{aligned} \tag{31}$$

式中 $f(q) = -\frac{\partial H}{\partial p}, g(p) = \frac{\partial H}{\partial q}$ 系数有如下形式:

$$\begin{aligned} r_1 &= 0 \\ r_2 &= r_4 = \frac{1}{3}(2 + e), \\ r_3 &= -\frac{1}{3}(1 + 2e), \\ s_1 &= s_4 = \frac{1}{6}(2 + e), \\ s_2 &= s_3 = \frac{1}{6}(1 - e), \\ e &= \sqrt[3]{2} + \sqrt[3]{1/2}. \end{aligned} \tag{32}$$

将系统的 H_{tol} 代入,得到 $f(q), g(p)$,再将它们代入(31)式,就可以得到具有四阶精度且保持系统二次守恒律的辛格式.

5. 数值模拟

下面用(29)(30)(31)式对于均匀介质模型和斜界面两层介质模型中传播的声波和弹性波分别进行模拟.考虑到(16)(24)式给出的关系以及(27)式对震源的定义,下面给出模拟中需要用到的参量取值:

$$\begin{aligned} \rho &= 2100, \\ d &= 4, \\ b_0 &= 0.7, \\ \Delta t &= 0.01, \\ A &= 10, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tau &= 1, \\ \phi_0 &= 6, \\ c_0 &= 0.25. \end{aligned} \tag{33}$$

上述各量使用的单位均采用国际单位制.

5.1. 模拟声波

选择的介质模型如图5,图中的数字代表位置编号,I,II 分别代表不同介质.斜线表示界面.其中在介质 I 中的波速 $v_1 = 2000 \text{ m/s}$,在介质 II 中的波速 $v_2 = 3000 \text{ m/s}$,震源力的方向 $\beta = 0^\circ$.

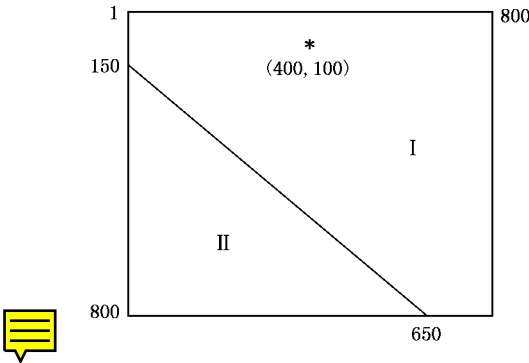


图5 斜层介质模型 *表示震源

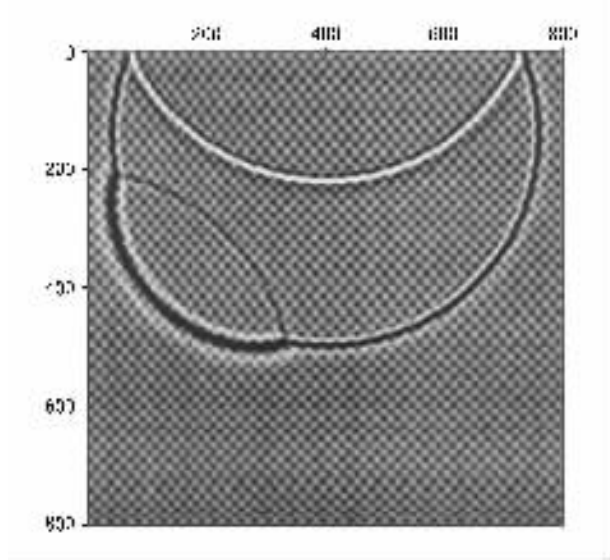


图6 斜层介质声波模拟结果

图6显示的是(6)式的系统在30 s时所有准粒子在 x 方向振动的位移量,颜色越深表示位移量越大,黑色为正值,白色为负值,网格取 800×800 .图中展示了 x 方向的振动以波的形式传播,传播方向是圆心沿半径向外所指方向,这符合声波的传播.当过界面时有透射和反射,在边界处,波全部被反射,且相位相反,这都符合波传播的规律.这说明用

Hamilton系统方法可以很好地模拟声波.

5.2. 模拟弹性波

选择均匀的介质模型,震源位置(300 ,230),网格取 600×600 ,介质中的 P 波速度取 $v_p = 2500 \text{ m/s}$,震源力的方向分别取 $\beta = 90^\circ, \beta = 120^\circ$.

图 7、图 8 显示的是(8)式的系统在 30 s 时所有准粒子在振动方向的位移量,振动方向和震源力的方向一致.图 7、图 8 中传播快的是 P 波,传播慢的是 S 波,S 波的波速为 $v_s = \sqrt{\frac{1-2c_0}{2(1-c_0)}}v_p$.在这里取

$c_0 = 0.25$,则 S 波的波速为 $v_s = \frac{\sqrt{3}}{3}v_p$.图 7 中准粒子在 y 方向上振动,P 波的传播方向也沿着 y 方向,而 S 波的传播方向沿着 x 方向.图 8 中准粒子在 x 轴顺时针转 120° 方向上振动,P 波的传播方向也沿着这一方向,而 S 波的传播方向在 x 轴顺时针转 30° 方向.所以图 7、图 8 中 P 波的传播方向都与振动方向平行,而 S 波的传播方向都与振动方向垂直,这符合弹性波的传播规律.

选择的介质模型如图 9,其中在介质 I 中的 P 波波速 $v_{p_1} = 2000 \text{ m/s}$,其中在介质 II 中的 P 波波速 $v_{p_2} = 3000 \text{ m/s}$,震源力的方向 $\beta = 60^\circ$,网格取 600×600 .

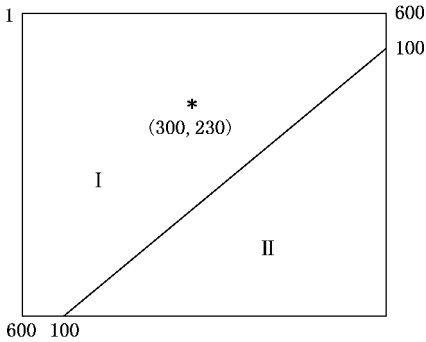


图 9 斜层介质模型

图 7 均匀介质弹性波模拟结果之一

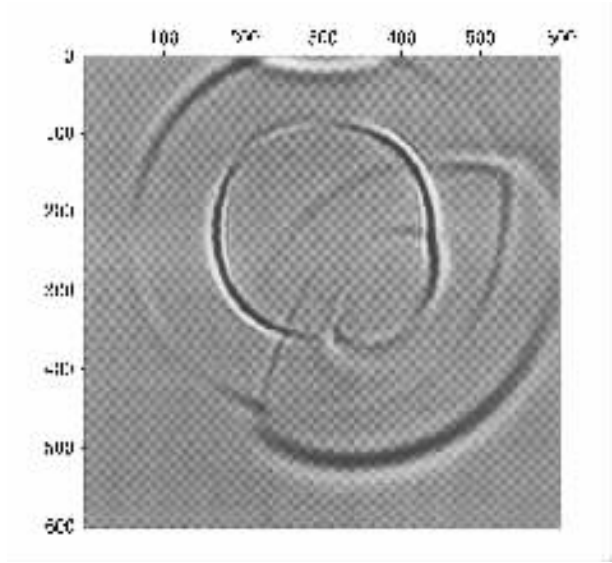


图 10 斜层介质弹性波模拟结果

图 10 是斜界面两层介质模型中传播的弹性波.从图 10 可以看到 P 波过界面时,在分界面上产生了一个反射 P 波、一个反射 SV 波、一个透射 P 波以及

图 8 均匀介质弹性波模拟结果之二

一个透射 SV 波. 还看到 SV 波过界面时(二维系统只存在 SV 波,不存在 SH 波)有同样的规律. 这都符合弹性波的传播规律. 这说明用 Hamilton 系统方法也可以很好地模拟弹性波.

6. 结 论

从数值模拟的结果来看,用 Hamilton 系统方法

来描述声波和弹性波的传播是有效的. 只考虑离散质点间的作用和振动的传播,也可以对波传播进行模拟. 而且在一定的条件下,它包含有经典的声波和弹性波方程. 然而这种方法是在微观尺度下的,对几何形态复杂或存在强间断面的介质,可以进行更为细致的描述和计算. 同时对应的保结构辛算法也可以直接应用于数值模拟,它比耗散型格式的计算结果更为符合物理实质,也更为精确.

- [1] Achenbach J D 1980 *Wave Propagation in Elastic Solids* (New York : North-Holland) p3
- [2] John F 1977 *Comm. Pure Appl. Math.* **30** 421
- [3] Appert C , Zaleski S 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 1
- [4] Gunstensen A K , Rothman D H , Zaleski S 1991 *Phys. Rev. A* **43** 4320
- [5] Doolen G D 1990 *Lattice Gas Methods for Partial Differential Equations* (Redwood City :Addison-Wesley Press) p72
- [6] Peter M 1992 *J. Stastical Physics* **68** 591
- [7] Huang L J , Peter M 1994 *Geophysical J. International* **117** 529

- [8] Li Y M , Hu J X 1995 *Acta Geophysics Sinica* **38** 651(in Chinese)
[李幼铭 胡建行 1995 地球物理学报 **38** 651]
- [9] Struwe M 1990 *Variational Methods :Applications to Nonlinear Partial Differential Equations and Hamiltonian Systems*(Berlin , New York : Springer-Verlag)
- [10] Feng K 1985 *Collected Works of Feng Kang*(II)(Beijing : Science Press) p8
- [11] S Reich 2000 *J. Computational Physics* **157** 473
- [12] Feng K , Qin M Z 1987 *Lecture Notes in Mathematics*(Berlin : Springer) p1

Hamiltonian system approach for simulation of acoustic and elastic wave propagation

Cao Yu Yang Kong-Qing

(Department of Physics , Lanzhou University , Lanzhou 730000 , China)

(Received 1 November 2002 ; revised manuscript received 18 February 2003)

Abstract

This paper develops a system with quasi-particles on a discrete lattice , Hamiltonian description of this system is presented , which can simulate acoustic and elastic waves . The nine-point interaction models are used and interaction coefficients are determined in this system. The connection between Hamiltonian system approach and acoustic or elastic wave equations are proved , and the relations between their physical quantities are presented. The symplectic algorithms that are used in the given media models and simulation results are presented.

Keywords : Hamiltonian system approach , nine-point interaction models , acoustic wave equation , elastic wave equations , symplectic algorithms

PACC : 6120J