

**GEOFYZIKÁLNY ÚSTAV
SLOVENSKÁ AKADÉMIA VIED
BRATISLAVA**

**VÝPOČET SEIZMICKÉHO POHYBU
V TROJROZMERNE NEHOMOGENÝCH
PROSTREDIACH
METÓDOU KONEČNÝCH DIFERENCIÍ**

DIZERTAČNÁ PRÁCA

Vypracoval: Mgr. Jozef Kristek

Školiteľ: doc. RNDr. Peter Moczo, DrSc.

Bratislava 2001

OBSAH

Pod'akovanie.....	iii
Úvod.....	1
1 Súčasný stav problematiky: 3D numerické modelovanie seizmického pohybu.....	2
1.1 Metódy výpočtu seizmického pohybu.....	2
1.2 Metóda konečných diferencií.....	3
2 Cieľ dizertačnej práce.....	9
3 Výsledky dizertačnej práce.....	10
3.1 Výpočtová metóda.....	10
3.1.1 Pohybová rovnica.....	10
3.1.1.1 Nehomogénne izotropné elastické kontinuum.....	10
3.1.1.2 Nehomogénne izotropné viskoelastické kontinuum.....	11
3.1.1.3 Okrajové podmienky na materiálovej diskontinuite.....	18
3.1.1.4 Okrajové podmienky na voľnom povrchu.....	23
3.1.2 Konečno-diferenčná schéma.....	23
3.1.2.1 Konečno-diferenčná sieť.....	23
3.1.2.2 Objemové aritmetické a harmonické priemerovanie.....	24
3.1.2.3 Schéma pre vnútorné body.....	30
3.1.2.4 Schémy pre voľný povrch.....	34
3.1.2.5 Schémy pre neodrážajúce hranice.....	47
3.1.3 Simulácia seizmického zdroja.....	51
3.1.3.1 Simulácia bodového zdroja s ľubovoľným mechanizmom ohniska pomocou objemovej sily.....	54
3.1.3.2 Simulácia seizmických zdrojov konečných rozmerov.....	57
3.1.3.3 Simulácia vzdialených seizmických zdrojov.....	57
3.1.4 Presnosť a stabilita schémy.....	58
3.1.5 Algoritmus výpočtu a optimalizácia pamäťových nárokov a výpočtového času.....	58
3.1.5.1 Pamäťové nároky.....	59
3.1.5.2 Optimalizácia pamäťových nárokov a výpočtového času.....	60
3.1.6 Výpočtový program DVS 5.0.....	64
3.1.6.1 Súradnicový systém.....	64
3.1.6.2 Výpočtová oblasť a jej pokrytie kombinovanou konečno-diferenčnou sieťou.....	64
3.1.6.3 Model prostredia.....	64
3.1.6.4 Hranice výpočtovej oblasti.....	64

3.1.6.5	<i>Optimalizácia pamäťových nárokov</i>	65
3.1.6.6	<i>Optimalizácia výpočtového času</i>	66
3.1.6.7	<i>Implementácia seizmických zdrojov</i>	66
3.1.6.8	<i>Výstupy programu</i>	67
3.2	Numerický príklad	67
4	Závery	71
	Literatúra	72
	Príloha	
	Úplná konečno-diferenčná schéma pre vnútorné body siete	78
	Príloha na CD ROM	
	• Computer code DVS 5.0 - User's Guide	
	• Computer code DVS 5.0 - Source File	

POĎAKOVANIE

Za odborné vedenie, podporu, rady a diskusie v doktorandskom štúdiu ďakujem môjmu školiteľovi doc. RNDr. Petrovi Moczovi, DrSc.

Ďakujem RNDr. Petrovi Labákovi, PhD. za užitočné diskusie a pomoc v priebehu celej práce, Mgr. Monike Kováčovej, PhD. za pomoc pri odvodení a dôkaze teóremy.

Ďakujem tiež Mgr. Petrovi Franekovi a Martinovi Gálisovi za pomoc pri príprave vstupných údajov k výpočtom.

V neposlednom rade chcem poďakovať aj mojej manželke a kolegyni Mgr. Miriam Kristekovej za psychickú podporu, pomoc a užitočné diskusie v priebehu celej práce.

ÚVOD

Jednou zo zásadných úloh súčasnej i budúcej seizmológie je predpoveď seizmického pohybu na mieste, ktoré je z určitého dôvodu dôležité či významné. Táto úloha je dôležitá prakticky bez ohľadu na to, či vieme alebo nevieme predpovedať miesto, čas vzniku a veľkosť zemetrasenia samotného. Je to preto, lebo z hľadiska možných následkov budúcich zemetrasení je veľmi užitočné vedieť, aký seizmický pohyb možno na danom záujmovom mieste očakávať. Riešenie úlohy nie je jednoduché najmenej z dvoch dôvodov. Jednak je pre nás vnútro Zeme čiernou skrinkou, jednak v seizmológii principiálne nemôžeme realizovať príslušný fyzikálny experiment. Z toho vyplýva zásadná dôležitosť teoretického výskumu a hlavne numerického modelovania. Analýzou záznamov skutočného seizmického pohybu a ich porovnávaním s numericky simulovaným seizmickým pohybom skúmame jednak zlomový proces a vyžarovanie seizmických vĺn, jednak samotné šírenie seizmických vĺn a vplyv lokálnych povrchových geologických štruktúr na seizmický pohyb.

Numerické modelovanie seizmického pohybu môže byť v súčasnosti efektívnym nástrojom výskumu, ak uvažujeme dostatočne zložité laterálne nehomogénne modely, ktoré dostatočne presne vystihujú prostredie zemského vnútra. V množstve dosiaľ použitých matematických metód je v súčasnom trojrozmernom (3D) modelovaní seizmického pohybu dominantnou metódou konečných diferencií. Je to dôsledkom robustnosti tejto metódy. Na druhej strane, aj keď je metóda konečných diferencií používaná v seizmológii už vyše 30 rokov, nedá sa povedať, že by nebolo čo riešiť a zlepšovať v rozpracovanosti jej aplikácie na veľké 3D realistické modely. Skôr naopak.

Zámerom tejto dizertačnej práce je prispieť práve k rozpracovaniu aplikovateľnosti metódy konečných diferencií na problém výpočtu seizmického pohybu v 3D zložitých nehomogénnych modeloch povrchových geologických štruktúr.

Kapitola 1 obsahuje stručný prehľad súčasného stavu problematiky. V kapitole 2 je formulovaný cieľ dizertačnej práce. Kapitola 3 obsahuje výsledky dizertačnej práce. Ťažiskom kapitoly je prezentácia úplnej výpočtovej metódy založenej na pôvodnej konečno-diferenčnej schéme pre vnútorné sieťové body a pôvodnej konečno-diferenčnej schéme na simuláciu rovinného voľného povrchu. Súčasťou výsledkov je aj výpočtový program DVS 5.0 v jazyku Fortran 95, ktorý tvorí obsah Prílohy (CD ROM). V kapitole 4 sú formulované závery práce.

Výsledky dizertačnej práce sú súčasťou výsledkov dosiahnutých v uplynulých rokoch v Oddelení seizmológie Geofyzikálneho ústavu SAV a pri riešení grantových projektov NATO Linkage Grant ENVIR.LG 940714 (1994-1996), INCO-COPERNICUS PL963311 (1997-1999), INCO-COPERNICUS PL963087 (1997-1999), VEGA 2/5131 (1998-2000), 5.rámcový program EÚ EVG1-2000-22024 (2001-2004) a VEGA 1/1090/21 (2001-2003).

Časť výsledkov dizertačnej práce bola publikovaná v zahraničných časopisoch a prezentovaná na konferenciách v zahraničí a doma.

1 SÚČASNÝ STAV PROBLEMATIKY: 3D NUMERICKÉ MODELOVANIE SEIZMICKÉHO POHYBU

1.1 Metódy výpočtu seizmického pohybu

Trojrozmerné (3D) numerické modelovanie šírenia seizmických vln a seizmického pohybu pôdy sa v súvislosti s rozvojom výkonnej výpočtovej techniky stáva významným nástrojom v mnohých seizmologických výskumoch a v seizmickom prieskume. Pri modelovaní seizmického pohybu je často potrebné zahrnúť bodový dislokačný zdroj alebo realistický kinematický model zdroja (perspektívne i dynamický model zdroja), zložitú heterogenitu prostredia (ostré rozhrania, veľké rýchlostné kontrasty, veľký Poissonov pomer) a topografiu voľného povrchu. Existuje mnoho výpočtových metód, ktoré sa od seba líšia aplikovateľnosťou, presnosťou a efektívnosťou. Existencia veľkého množstva výpočtových metód indikuje fakt, že žiadna z metód nie je univerzálna, t.j. aplikovateľná s dostatočnou presnosťou a efektívnosťou na ľubovoľnú konfiguráciu prostredia a vlnového poľa.

Zásadné metódy používané na výpočet seizmického pohybu možno rozdeliť na tri skupiny – hraničné metódy, doménové metódy a hybridné metódy. Reprezentantmi hraničných metód sú metóda hraničných integrálnych rovníc, metóda hraničných elementov a rôzne metódy diskretných vlnových čísel. K doménovým metódam patria napr. metóda konečných diferencií, metóda konečných elementov, pseudospektrálna metóda a metóda spektrálnych elementov. Ako zdôrazňujú Takenaka et al. (1998) v porovnaní obidvoch skupín metód, hraničné metódy sú vo všeobecnosti presnejšie ako doménové metódy, avšak nie sú aplikovateľné na realistické (t.j. dostatočne zložené) modely zemského vnútra. Je to preto, lebo ich aplikácia na modely zložené z viac ako dvoch-troch homogénnych vrstiev či blokov vyžaduje príliš veľký výkon počítačov. Seizmický pohyb v zložitých modeloch možno oveľa efektívnejšie počítať doménovými metódami.

Osobitnou skupinou sú hybridné metódy. Hybridný prístup kombinuje dve alebo i tri rôzne metódy tak, aby z každej metódy využil ich najlepšiu vlastnosť a vyhol sa slabšej stránke danej metódy. Kombinácia môže spočívať alebo v riešení rôznych častí výpočtovej oblasti rôznymi metódami alebo v riešení závislosti napr. vektoru posunutia od rôznych premenných rôznymi metódami. Príkladmi hybridných metód sú metóda separácie premenných + metóda konečných diferencií, Fourierova transformácia + metóda konečných diferencií, metóda integrálnych hraničných rovníc + metóda konečných elementov, metóda diskretných vlnových čísel + metóda konečných diferencií + metóda konečných elementov, metóda diskretných vlnových čísel + metóda hraničných elementov, metóda diskretných vlnových čísel + metóda integrálnych hraničných rovníc. Stručný prehľad hybridných prístupov možno nájsť v prácach Zahradník a Moczo (1996) a Moczo, Bystrický, Kristek, Carcione a Bouchon (1997).

1.2 Metóda konečných diferencií

Metóda konečných diferencií, niekedy označovaná aj ako *metóda sietí*, je jednou z najznámejších doménových metód a je používaná takmer tri desaťročia ako efektívna metóda na numerickú simuláciu seizmického pohybu a šírenia seizmických vln. V súčasnosti je metóda konečných diferencií jednoznačne dominantnou metódou v numerickom modelovaní seizmického pohybu v trojrozmerné nehomogénnych modeloch povrchových geologických štruktúr. Je to zrejme zo súčasných štúdií seizmického pohybu – Olsen a Schuster (1992), Frankel (1993), Yomogida a Etgen (1993), Graves (1993), Olsen et al. (1995), Pitarka et al. (1997, 1998), Wald a Graves (1998), Graves et al. (1998), Matsushima et al. (1998), Cotton et al. (1998), Kristek et al. (1999), Aoi a Fujiwara (1999), Olsen et al. (2000), Frankel a Stephenson (2000). Dôvodom dominantného postavenia metódy konečných diferencií je skutočnosť, že je aplikovateľná na relatívne zložité modely geologických štruktúr a pritom relatívne presná a výpočtovo efektívna. Navyše je metóda konečných diferencií jednoducho programovateľná. Žiadna iná súčasná metóda nespája v tak rozumnej rovnováhe uvedené vlastnosti. Dobré porovnanie metódy konečných diferencií s inými metódami možno nájsť v prácach Takenaka et al. (1998) a Mizutami et al. (2000).

Ako každá výpočtová metóda má aj metóda konečných diferencií svoje nedostatky. Jedným z nich je principiálna obtiažnosť zahrnutia hraničných podmienok na geometricky zložitých rozhraniach, najmä zahrnutie okrajovej podmienky nulového napätia na nerovinnom voľnom povrchu. Ďalšie problémy v podobe numerických nestabilit vznikajú pri aplikácii metódy konečných diferencií na modely s veľkými Poissonovými pomermi alebo pri niektorých typoch aproximácií transparentných hraníc výpočtovej oblasti. Nie každá diferenčná schéma je však na tieto problémy rovnako citlivá a rôzni autori riešia problémy rôzne.

Aplikácia metódy konečných diferencií na riešenie problému formulovaného pomocou parciálnej diferenciálnej rovnice a okrajových alebo počiatkových podmienok znamená realizovať nasledujúci postup:

1. Zostaviť konečno-diferenčný model problému, t.j. pokryť výpočtovú oblasť sieťou, aproximovať derivácie v rovnici konečno-diferenčnými vzorcami, aproximovať funkcie v rovnici a okrajové alebo počiatkové podmienky. Inými slovami – zostaviť konečno-diferenčnú schému.
2. Analyzovať vlastnosti zostaveného konečno-diferenčného modelu, t.j., analyzovať konzistenciu, stabilitu a konvergenciu.
3. Uskutočniť numerické výpočty.

Z uvedeného postupu je zrejme, že pri riešení jedného a toho istého problému možno zostaviť niekoľko konečno-diferenčných modelov či schém. Daná schéma závisí jednak od voľby siete, jednak od druhu konečno-diferenčných aproximácií.

Principiálna rôznosť konečno-diferenčných schém v prípade riešenia pohybovej rovnice kontinua vyplýva už z rôznych formulácií samotnej pohybovej rovnice. Môžeme uvažovať štyri základné formulácie pohybovej rovnice izotropného kontinua – a. v posunutí a napätí, b. v posunutí, rýchlosti (posunutia) a napätí, c. v rýchlosti a napätí a d. v posunutí. Prehľad uvedených formulácií je vo Vsuvke 1.

V závislosti od problému je viac alebo menej realizovateľná analýza vlastností

Vsuvka 1

Formulácie pohybovej rovnice

Predpokladajme kartézsky súradnicový systém (x_1, x_2, x_3) . Nech $\rho(\vec{x})$ je hustota, $\lambda(\vec{x})$ a $\mu(\vec{x})$ Lamého elastické koeficienty, $\vec{u}(\vec{x}, t)$ vektor posunutia, t čas, $\tau_{ij}(\vec{x}, t)$; $i, j \in \{1, 2, 3\}$ tenzor napätia a $\vec{f}(\vec{x}, t)$ hustota objemovej sily. Nech $v_i(\vec{x}, t)$ je i -tá zložka vektoru rýchlosti posunutia. Potom zápis pohybovej rovnice a Hookovho zákona v tvare

$$\begin{aligned} \rho \ddot{u}_i &= \tau_{ij,j} + f_i \quad , \\ \tau_{ij} &= \lambda u_{k,k} \delta_{ij} + \mu (u_{i,j} + u_{j,i}) \end{aligned}$$

budeme nazývať formulácia pohybovej rovnice **v posunutí a napätí** (*displacement-stress formulation*). Pritom uvažujeme sumačnú konvenciu opakujúcich sa indexov a skrátene označenia $u_{,i} = \frac{\partial u}{\partial x_i}$ a $\dot{u} = \frac{\partial u}{\partial t}$. Ak rozpíšeme pohybovú rovnicu na dve rovnice prvého rádu

$$\begin{aligned} \rho \dot{v}_i &= \tau_{ij,j} + f_i \quad , \\ \dot{u}_i &= v_i \quad , \\ \tau_{ij} &= \lambda u_{k,k} \delta_{ij} + \mu (u_{i,j} + u_{j,i}) \end{aligned}$$

budeme hovoriť o formuláciu pohybovej rovnice **v posunutí, rýchlosti a napätí** (*displacement-velocity-stress formulation*). Ak vo formulácii v posunutí a napätí dosadíme do pohybovej rovnice napätie vyjadrené Hookovým zákonom dostaneme formuláciu pohybovej rovnice **v posuntí** (*displacement formulation*)

$$\rho \ddot{u}_i = (\lambda u_{k,k})_{,i} + (\mu u_{i,j})_{,j} + (\mu u_{j,i})_{,j} + f_i \quad .$$

Ak vo formulácii v posunutí a napätí zderivujeme rovnicu vyjadrujúcu Hookov zákon podľa času, získame formuláciu pohybovej rovnice **v rýchlosti a napätí** (*velocity-stress formulation*)

$$\begin{aligned} \rho \dot{v}_i &= \tau_{ij,j} + f_i \quad , \\ \dot{\tau}_{ij} &= \lambda v_{k,k} \delta_{ij} + \mu (v_{i,j} + v_{j,i}) \quad . \end{aligned}$$

zostavenej konečno-diferenčnej schémy. Rigorózná a úplná analýza je v súčasnosti možná len pre extrémne jednoduché modely prostredia. Výsledky analýzy pre homogénne neobmedzené prostredie alebo pre homogénny polpriestor je preto potrebné kombinovať s numerickými testami pre zložitejšie modely.

Konečno-diferenčné schémy môžu byť explicitné alebo implicitné. Explicitnou schémou sa vypočíta pohyb v danom bode siete a v danej časovej hladine len z hodnôt pohybu v predchádzajúcich časových hladinách a z materiálových sieťových parametrov. V implicitnej schéme sa počíta pohyb v danej časovej hladine súčasne vo všetkých bodoch siete z hodnôt pohybu v predchádzajúcich časových hladinách a z materiálových sieťových parametrov pomocou inverznej matice. Obe typy konečno-diferenčných schém riešia pohybovú rovnicu rekurzívne v čase. Je zrejmé, že explicitné schémy sú principiálne jednoduchšie najmä z výpočtového hľadiska. Všetky v súčasnosti publikované práce o konečno-diferenčnom modelovaní seizmického pohybu používajú explicitné schémy.

Ak neuvažujeme pórovité alebo všeobecne viackomponentné prostredie, musíme prostredie zemského vnútra modelovať zahrnutím aj vrstiev či blokov so spojitými meniacimi materiálovými parametrami aj materiálových diskontinuit – t.j. rozhraní medzi dvomi materiálmi, na ktorých sa skokom menia hodnoty materiálových parametrov.

Pohyb v spojitom nehomogénnom prostredí je určený pohybovou rovnicou. Pravdepodobne najpresnejšími konečno-diferenčnými schémami pre spojitú nehomogénne prostredie sú schémy vyvinuté Gellerom a Takeuchim (1998) a Takeuchim a Gellerom (2000). Relatívne vysoká presnosť je za cenu akceptovateľne zvýšených výpočtových nárokov.

Ak sa v prostredí nachádza materiálová diskontinuita, platia na nej okrajové podmienky. V princípe sú dve možnosti. Prvá, vedúca k tzv. homogénnej formulácii, znamená aplikovať 1. konečno-diferenčnú schému pre spojitú nehomogénne prostredie (alebo, v jednoduchšom prípade, pre homogénne prostredie) v sieťových bodoch, ktoré neležia na materiálovej diskontinuite, 2. konečno-diferenčnú schému, ktorá vznikne konečno-diferenčnou aproximáciou okrajových podmienok, na sieťové body ležiace na materiálovej diskontinuite. Takýto prístup je všeobecne vo fyzike tradičný a relatívne vhodný v niektorých kanonických problémoch. V každom prípade predpokladá správnu konečno-diferenčnú aproximáciu okrajových podmienok, čo nie je triviálny problém.

Homogénna formulácia je v každom prípade špecifická pre uvažovaný model. Jej aplikácia na prostredie so zložitou geometriou materiálových diskontinuit je teoreticky i výpočtovo veľmi náročná. Pre numerické modelovanie seizmického pohybu v zložitých trojrozmerných nehomogénnych prostrediach je prakticky nepoužiteľná.

Rozumnejšou alternatívou je preto tzv. heterogénna formulácia, v ktorej pre každý vnútorný sieťový bod používame jednu a tú istú konečno-diferenčnú schému a to bez ohľadu na to, či daný sieťový bod leží na materiálovej diskontinuite alebo mimo nej. Prítomnosť materiálovej diskontinuity je zohľadnená len v hodnotách materiálových sieťových parametrov. Zrejmom otázkou je, ako určiť materiálové

sieťové parametre tak, aby správne zahŕňali prítomnosť materiálovej diskontinuity. Od začiatku 70-tych rokov, odkedy sa heterogénna formulácia používa, navrhli mnohí autori rôzne spôsoby určenia tzv. efektívnych materiálových parametrov. Nie všetci si však dôsledne položili základnú otázku – je heterogénna formulácia vôbec oprávnená? Je principiálne možné nájsť heterogénnu formuláciu pohybovej rovnice, t.j. takú formuláciu, ktorá na materiálovej diskontinuite zabezpečí splnenie okrajových podmienok?

Keďže jedným zo základných cieľov dizertačnej práce je prezentovať konečno-diferenčnú schému, ktorá je dostatočne presná aj pre zložité prostredia, uvedieme tu stručný historický prehľad základných prístupov k problému zahrnutia nehomogenity prostredia, najmä materiálových diskontinuit.

V prvých relevantných prácach, používajúcich formuláciu v posunutí, (Alterman a Karal, 1968 a nasledujúce práce Altermanovej a jej spolupracovníkov) bola použitá homogénna formulácia na zahrnutie materiálových diskontinuit veľmi jednoduchšej geometrie. Základným problémom bola preto vhodná konečno-diferenčná aproximácia okrajových podmienok. Altermanová a jej kolegovia použili tzv. fiktívne sieťové body. Príslušné konečno-diferenčné aproximácie boli 1. rádu presnosti, kým schéma pre vnútorné homogénne prostredie bola 2. rádu presnosti. Schéma bola navyše nestabilná pre vyššie hodnoty Poissonovho pomeru.

Zásadné problémy s aplikáciou homogénnej formulácie na zložitejšie modely si uvedomil Boore (1970, 1972) a navrhol tzv. explicitnú metódu spojitého napätia (explicit continuous stress method). Bol to v podstate pokus explicitne zahrnúť podmienku spojitosti napätia na nerovinných materiálových diskontinuitách inak ako homogénnou alebo heterogénnou formuláciou. Zlé numerické vlastnosti príslušnej schémy napokon neumožnili jej širšie využitie. Boore (1972) preto (v prípade SH problému) použil aj heterogénnu formuláciu, v ktorej efektívne moduly torzie boli počítané ako integrálne harmonické priemery v smeroch sieťových čiar medzi dvomi sieťovými bodmi. Harmonické priemerovanie bolo navrhnuté Tichonovom a Samarským (napr. Mitchell 1969).

Ilan et al. (1975) a Ilan a Loeventhal (1976) navrhli v prípade P-SV problému na horizontálnych a vertikálnych rovinných rozhraniach alternatívu ku konceptu fiktívnych sieťových bodov. Väzbu medzi okrajovou podmienkou a pohybovou rovnicou riešili pomocou Taylorových rozvojev posunutia. Príslušná schéma bola 2. rádu presnosti, čo bolo zlepšením vo vzťahu k jednoduchším schémam založeným na fiktívnych sieťových bodoch. Na výsledok nadviazali Fuyuki a Matsumoto (1980), ktorí odvodili schémy pre 90° a 270° roh dvoch rovinných rozhraní.

Kelly et al. (1976) prezentovali jednak svoju P-SV heterogénnu formuláciu a zdôraznili veľké problémy pri aplikácii homogénnej formulácie na zložité prostredia, jednak porovnali heterogénnu formuláciu s homogénnou formuláciou pomocou numerických testov pre vybrané jednoduché modely. V prípade modelu pravoúhlého rohu demonštrovali v podstate neakceptovateľný rozdiel medzi heterogénnou a homogénnou formuláciou.

Kummer a Behle (1982) nadviazali na prístup Ilana et al. (1975) a odvodili SH konečno-diferenčné schémy 2. rádu presnosti pre rôzne typy sieťových bodov po

častiach rovinného polygonálneho rozhrania medzi dvomi homogénnymi blokmi. Analogický prístup pre P-SV a 3D problém nebol publikovaný a ani SH schéma samotná nebola neskôr používaná.

Zásadným zlomom v aplikácii metódy konečných diferencií na výpočet seizmického pohybu a šírenia seizmických vln v nehomogénnych prostrediach boli práce Virieuxa (1984, 1986), ktorý použil myšlienku striedavo usporiadanej siete (Madariga 1976). Aj keď Virieux sám explicitne nič nehovorí o určovaní materiálových sieťových parametrov v svojich heterogénnych SH a P-SV schémach vychádzajúcich z formulácie v rýchlosti a napätí, jeho numerické výsledky sú na tú dobu výborné a navyše nie sú obmedzené na nízke hodnoty Poissonovho pomeru.

Virieux (1986) diskutuje aj rozdiel medzi homogénnou a heterogénnou formuláciou nájdený Kellym et al. (1976). Jeho analýza favorizuje heterogénnu formuláciu a nepriamo tým poukazuje na problém správnej konečno-diferenčnej aproximácie okrajových podmienok na materiálových diskontinuitách v homogénnej formulácii.

Značné zvýšenie efektívnosti konečno-diferenčného modelovania zložitých modelov prezentoval Levander (1988) svojou P-SV schémou 4. rádu presnosti formulovanej v rýchlosti a napätí na striedavo usporiadanej sieti. Moczko (1989) navrhol SH schému v posunutí na pravouhlej sieti s premennou veľkosťou sieťových krokov v oboch smeroch. Ďalším dôležitým krokom k vyššej výpočtovej efektívnosti a tým aj aplikovateľnosti metódy konečných diferencií na zložitá prostredia bola P-SV schéma formulovaná v posunutí a napätí Luo a Schustera (1990). V porovnaní so schémou v rýchlosti a napätí je nová schéma menej náročná na výpočtovú pamäť.

Sochacki et al. (1991) sa pokúsili o zahrnutie okrajových podmienok do P-SV schémy v posunutí. A-priori predpokladali platnosť pohybovej rovnice na diskontinuite, uvažovali pravú stranu rovnice v tvare divergencie a integrovali rovnicu cez materiálovú diskontinuitu. Iným pokusom bol približný prístup Muira et al. (1992). Muir et al. aplikovali metódu Schoenberga-Muira (1989) na sieťovú bunku, ktorou prechádzala materiálová diskontinuita. Uvažovali bunku ako súvrstvie, ktoré môže byť priemerované metódou Schoenberga-Muira. Metóda bola pôvodne vyvinutá na priemerovanie súvrstvia elastických vrstiev ľubovoľnej anizotropie.

Olsen a Schuster (1992) prezentovali 3D schému v rýchlosti a napätí a začali tak dôležité obdobie 3D konečno-diferenčného modelovania na striedavo usporiadaných sieťach. Yomogida a Etgen (1993) navrhli 3D schému v posunutí a napätí približne 8. rádu presnosti.

Metodicky dôležitou bola práca Zahradníka a Priola (1995). Zahradník a Priolo pravdepodobne ako prví formulovali zásadnú otázku, či je heterogénnu formuláciu vôbec oprávnená, t.j., či možno nájsť heterogénnu formuláciu pohybovej rovnice. Predpokladajúc diskontinuitu v materiálových parametroch dostali (jej dosadením do pohybovej rovnice) výraz, ktorého dominantný člen je ekvivalentný podmienke spojitosti napätia. Tento výsledok interpretovali ako oprávnenie konečno-diferenčných schém zostavených len aproximáciou samotnej pohybovej rovnice (bez explicitného zahrnutia podmienky spojitosti napätia). Zahradník (1995) vyvi-

nul P-SV schému formulovanú v posunutí na konvenčnej sieti, v ktorej boli použité harmonické priemery elastických modulov λ a μ . V prípade $\alpha/\beta < 2$ bola schéma presnejšia než vtedy používané schémy na striedavo usporiadaných sieťach.

Graves (1996) publikoval metodicky veľmi dôležitú prácu, v ktorej navrhol určovanie efektívnych materiálových sieťových parametrov pre schémy v rýchlosti a napätí na striedavo usporiadanej sieti a opísal efektívnu optimalizáciu nárokov na operačnú pamäť. Gravesova práca bola vlastne prvá, ktorá detailne a zrozumiteľne popisala určovanie materiálových sieťových parametrov pre schému na striedavo usporiadanej sieti.

Moczo, Lucká, Kristek a Kristeková (1999) aplikovali Zahradníkov (1995) prístup na 3D prípad a navyše vyvinuli kombinovanú optimalizáciu nárokov na operačnú a diskovú pamäť, ktorá organicky spája Gravesovu (1996) optimalizáciu s optimalizáciou nárokov na diskovú pamäť. Optimalizácia nárokov na diskovú pamäť je založená na kompresii dát vo wavelet oblasti.

Aoi a Fujiwara (1999) prezentovali 3D schému v rýchlosti a napätí 2. rádu presnosti na kombinovanej sieti $h \times h \times h$ – $3h \times 3h \times 3h$.

Moczo, Kristek a Bystrický (2001) navrhli kombináciu prístupov a optimalizácií, ktorá umožňuje redukovať pamäťové nároky v 3D konečno-diferenčnom modelovaní viac ako o jeden rád.

Moczo, Kristek, Archuleta a Halada (zaslané do tlače) našli heterogénnu formuláciu pohybovej rovnice a vyvinuli 3D schému 4. rádu presnosti na striedavo usporiadanej sieti, ktorá je konzistentná s okrajovými podmienkami na materiálových diskontinuitách. Nová schéma je presnejšia ako dosiaľ používané schémy.

V uvedenom prehľade sme sa nevenovali dvom dôležitým aspektom konečno-diferenčného modelovania seizmického pohybu v zložitých prostrediach – zahrnutiu realistického útlmu a simulácii nulového napätia na voľnom povrchu. Stručné prehľady prístupov k riešeniu obidvoch problémov možno nájsť v prácach Moczo, Bystrický, Kristek, Carcione a Bouchon (1997) a Moczo, Kristek a Bystrický (2001).

2 CIEĽ DIZERTAČNEJ PRÁCE

Cieľom dizertačnej práce je prispieť k vývoju metód na výpočet seizmického pohybu pôdy a šírenie seizmických vln v trojrozmerné nehomogénnych (3D) zložitých viskoelastických modeloch povrchových geologických štruktúr:

1. Vypracovať novú metódu výpočtu založenú na metóde konečných diferencií
 - 3D schému 4. rádu presnosti pre vnútorné body formulovanú v posunutí, rýchlosti a napätí na kombinovanej striedavo usporiadanej sieti,
 - 3D schému na simuláciu rovinného voľného povrchu,
 - 3D schému na simuláciu neodrážajúcej hranice siete.
2. Vypracovať príslušný výpočtový algoritmus a výpočtový program v jazyku Fortran 95.

3 VÝSLEDKY DIZERTAČNEJ PRÁCE

Výsledky dizertačnej práce možno rozdeliť na dve časti. V prvej, ťažiskovej časti, bude prezentovaná základná teória, konečno-diferenčné schémy, výpočtový algoritmus a výpočtový program DVS 5.0. Podrobný návod na použitie programu ako i zdrojový text programu v jazyku Fortran 95 bude obsahom Prílohy na CD ROM. V druhej, ilustratívnej časti, bude uvedený numerický príklad výpočtu seizmického pohybu pre trojrozmerné nehomogénne viskoelastické prostredie.

3.1 Výpočtová metóda

Obsah kapitoly 3.1 vychádza najmä z publikovaných časopiseckých článkov Moczo, Labák, Kristek a Hron (1996), Moczo, Bystrický, Kristek, Carcione a Bouchon (1997), Moczo, Lucká, Kristek a Kristeková (1999), Kristek, Moczo, Irikura, Iwata a Sekiguchi (1999, zborník medzinárodnej konferencie v Japonsku), Moczo, Kristek a Halada (2000), Moczo, Kristek a Bystrický (2001), z rukopisu zaslaného do Bull. Seism. Soc. Am. – Moczo, Kristek, Archuleta a Halada (2001), z rukopisu v príprave na zaslanie do Bull. Seism. Soc. Am. – Kristek, Moczo a Archuleta (2001) a z dosiaľ nepublikovaných materiálov.

3.1.1 Pohybová rovnica

Vo všeobecnosti uvažujeme trojrozmerné šírenie seizmických vln v trojrozmerné nehomogénnom viskoelastickom prostredí. Obmedzíme sa len na prípad izotropných prostredí, pretože v pripovrchových geologických štruktúrach je anizotropia prostredia zanedbateľná. Pre jednoduchosť najskôr popíšeme rovnice pre nehomogénne izotropné elastické prostredie, ktoré potom rozšírime na izotropné heterogénne viskoelastické prostredie.

3.1.1.1 Nehomogénne izotropné elastické kontinuum

Vychádzajme z formulácie pohybovej rovnice v *posunutí, rýchlosti a napätí* ale s odlišným zápisom Hookovho zákona ako vo Vsuvke 1.

Predpokladajme kartézsky súradnicový systém (x, y, z) . Nech \vec{r} je polohový vektor, $\rho(\vec{r})$ je hustota, $\kappa(\vec{r})$ modul stlačiteľnosti, $\mu(\vec{r})$ modul torzie, $(U(\vec{r}, t), V(\vec{r}, t), W(\vec{r}, t))$ vektor posunutia, t čas, $\tau_{ij}(\vec{r}, t)$; $i, j \in \{x, y, z\}$ tenzor napätia a $\vec{f}(\vec{r}, t)$ hustota objemovej sily. Nech $(u(\vec{r}, t), v(\vec{r}, t), w(\vec{r}, t))$ je vektor rýchlosti posunutia. Potom môžeme pohybovú rovnicu písať v tvare

$$\begin{aligned}
\rho \dot{u} &= \tau_{xx,x} + \tau_{yx,y} + \tau_{zx,z} + f_x \quad , \\
\rho \dot{v} &= \tau_{xy,x} + \tau_{yy,y} + \tau_{zy,z} + f_y \quad , \\
\rho \dot{w} &= \tau_{xz,x} + \tau_{yz,y} + \tau_{zz,z} + f_z \quad ,
\end{aligned}
\tag{1}$$

$$\begin{aligned}
\dot{U} &= u \quad , \\
\dot{V} &= v \quad , \\
\dot{W} &= w \quad ,
\end{aligned}
\tag{2}$$

a Hookov zákon pre izotropné elastické prostredie v tvare

$$\begin{aligned}
\tau_{xx} &= \kappa(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \frac{2}{3}\mu(+2\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz}) \quad , \\
\tau_{yy} &= \kappa(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \frac{2}{3}\mu(-\varepsilon_{xx} + 2\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz}) \quad , \\
\tau_{zz} &= \kappa(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \frac{2}{3}\mu(-\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} + 2\varepsilon_{zz}) \quad , \\
\tau_{xy} &= 2\mu\varepsilon_{xy} \quad , \\
\tau_{yz} &= 2\mu\varepsilon_{yz} \quad , \\
\tau_{zx} &= 2\mu\varepsilon_{zx} \quad ,
\end{aligned}
\tag{3}$$

kde ε je tenzor deformácií definovaný vzťahmi

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{xx} &= U_{,x} \quad , \\
\varepsilon_{yy} &= V_{,y} \quad , \\
\varepsilon_{zz} &= W_{,z} \quad , \\
\varepsilon_{xy} &= \frac{1}{2}(U_{,y} + V_{,x}) \quad , \\
\varepsilon_{yz} &= \frac{1}{2}(V_{,z} + W_{,y}) \quad , \\
\varepsilon_{zx} &= \frac{1}{2}(W_{,x} + U_{,z}) \quad .
\end{aligned}
\tag{4}$$

3.1.1.2 Nehomogénne izotropné viskoelastické kontinuum

Viskoelastické prostredie sa od elastického prostredia líši vzťahom deformácie a napätia. Zatiaľ čo v elastickom prostredí je napätie úmerné deformácii, vo viskoelastickom prostredí je napätie úmerné aj rýchlosti zmeny deformácie, čoho dôsledkom je útlm seizmických vln šíriacich sa vo viskoelastickom prostredí. Rovnice (1) a (2) platia aj vo viskoelastickom prostredí. Úlohou však je nájsť ekvivalentné rovnice rovniciam (3) pre viskoelastické prostredie.

Uvažujme len lineárnu viskoelasticitu. Vzťah medzi napätím τ a deformáciou ε je v jednorozmernom prípade jednoducho formulovaný vo frekvenčnej oblasti ako

$$\tau(\omega) = M(\omega)\varepsilon(\omega) \quad , \quad (5)$$

kde $M(\omega)$ je komplexný, frekvenčne závislý, viskoelastický modul. Definujme faktor kvality Q

$$Q(\omega) = \frac{\operatorname{Re} M(\omega)}{\operatorname{Im} M(\omega)} = \frac{1}{\tan \phi(\omega)} \quad , \quad (6)$$

kde ϕ je fáza komplexného modulu $M(\omega)$. Aby bola rovnica (5) kauzálna, reálna a imaginárna časť $M(\omega)$ musia spĺňať Kramersove-Krönigove pravidlá. Potom $M(\omega)$ je jednoznačne určené daným $Q(\omega)$.

Zahrnutie realistického útlmu v dôsledku viskoelastických vlastností prostredia vo výpočtoch v časovej oblasti je pomerne náročné. V článku Emmerich a Korn (1987) možno nájsť detailný výklad zahrnutia viskoelastických vlastností prostredia pri modelovaní šírenia SH vln. Neskôr, nezávisle na sebe, Emmerich (1992) a Fäh (1992) aplikovali takýto prístup na prípad šírenia P-SV vln. Podobný prístup bol použitý pri zavedení hybridnej metódy na výpočet P-SV seizmického pohybu v nehomogénnych viskoelastických topografických štruktúrach (Moczo, Bystrický, Kristek, Carcione a Bouchon, 1997). Vychádzajme z týchto prác a popíšme princíp modelovania viskoelastického prostredia v časovej oblasti.

Keď transformujeme rovnicu (5) do časovej oblasti, dostaneme

$$\tau(t) = \int_{-\infty}^t M(t-p)\varepsilon(p)dp \quad . \quad (7)$$

Zavedme teraz *relaxačnú funkciu* $R(t)$ ako odozvu napätia na jednotkový skok deformácie a teda $M(t) = dR(t)/dt$. $R(t)$ môžeme písať ako (pozri Obr. 1)

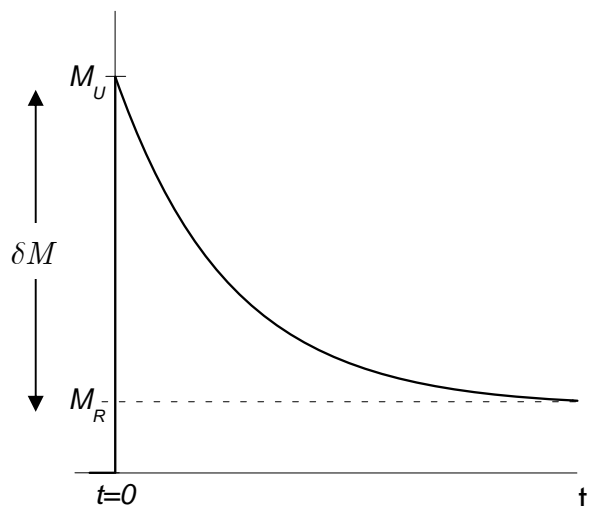
$$R(t) = \left[M_R + \delta M \int_0^{\infty} r(\tilde{\omega}) e^{-\tilde{\omega}t} d\tilde{\omega} \right] H(t) \quad , \quad (8)$$

kde

$$M_R = \lim_{t \rightarrow \infty} R(t) \quad ,$$

je *relaxovaný modul* a $r(\omega)$ je normalizované relaxačné spektrum spĺňajúce podmienku

$$\int_0^{\infty} r(\tilde{\omega}) d\tilde{\omega} = 1 \quad .$$



Obr. 1 Typická relaxačná funkcia

Vzťah

$$M_U = M_R + \delta M = \lim_{t \rightarrow 0} R(t) \quad (9)$$

definuje *nerelaxovaný modul*, t.j. modul okamžitej reakcie. $H(t)$ je funkcia jednotkového skoku. Predpokladajme, že relaxačné spektrum tvorí n jednotlivých pikov veľkosti a_j v diskretných relaxačných frekvenciách ω_j , teda

$$r(\omega) = \sum_{j=1}^n a_j \delta(\omega - \omega_j); \quad \sum_{j=1}^n a_j = 1. \quad (10)$$

Dosadením rovnice (10) do rovnice (8) dostávame

$$R(t) = \left[M_R + \delta M \sum_{j=1}^n a_j e^{-\omega_j t} \right] H(t) .$$

Zderivovaním tejto rovnice dostaneme

$$M_n(t) = \frac{dR(t)}{dt} = \left[-\delta M \sum_{j=1}^n a_j \omega_j e^{-\omega_j t} \right] H(t) + \left[M_R + \delta M \sum_{j=1}^n a_j e^{-\omega_j t} \right] \delta(t) , \quad (11)$$

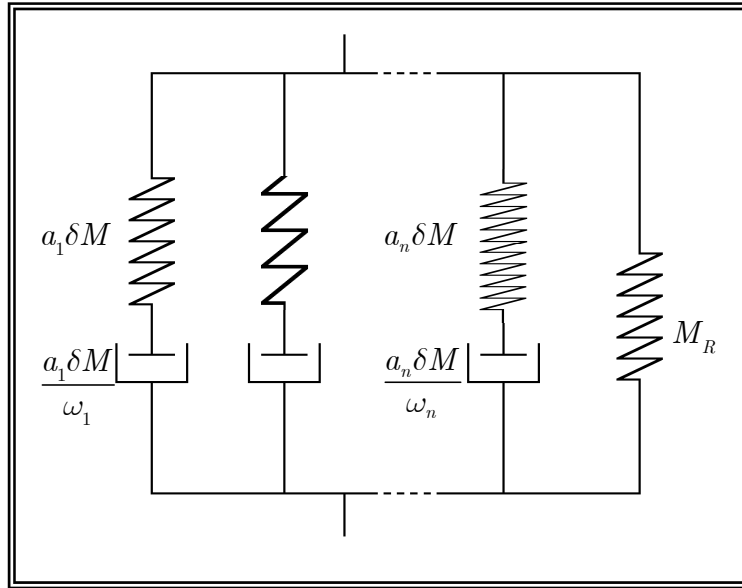
a potom aplikovaním Fourierovej transformácie a vzťahu (9) dostaneme

$$M_n(\omega) = M_U - \delta M \sum_{j=1}^n \frac{a_j \omega_j}{i\omega + \omega_j} . \quad (12)$$

Ak túto rovnicu prepíšeme na tvar

$$M_n(\omega) = M_R + \sum_{j=1}^n a_j \delta M \frac{i\omega}{i\omega + \omega_j} \quad (13)$$

zistujeme, že popisuje reologický model zovšeobecného Maxwellovho telesa, ktoré je reprezentované n klasickými Maxwellovými telesami s viskozitou $a_j \delta M / \omega_j$ a elastickým modulom $a_j \delta M$ a aditívnym paralelne pripojeným elastickým prvkom s modulom M_R (Obr. 2).



Obr. 2 Zovšeobecnené Maxwellove teleso

Závislosť faktoru kvality $Q(\omega)$ od frekvencie pre zovšeobecnené Maxwellovo teleso môžeme odvodiť zo vzťahov (6) a (12)

$$Q^{-1}(\omega) = \frac{\text{Im } M_n(\omega)}{\text{Re } M_n(\omega)} = \frac{\delta M}{M_U} \frac{\sum_{j=1}^n a_j \frac{\omega \omega_j}{\omega^2 + \omega_j^2}}{1 - \frac{\delta M}{M_U} \sum_{j=1}^n a_j \frac{\omega_j^2}{\omega^2 + \omega_j^2}} \quad (14)$$

Za predpokladu $\delta M \ll M_U$ sa dá ukázať, že Q^{-1} zovšeobecného Maxwellovho telesa je približne suma n Debyeovských funkcií s maximom $a_j \delta M / 2M_U$ lokalizovanom na frekvencii ω_j . Tieto funkcie sú symetrické na logaritmickú škále a majú polšíрку 1.144 dekády. Ak chceme mať Q^{-1} takmer nezávislé od frekvencie, najlepšie je vybrať relaxačné frekvencie ω_j logaritmicky ekvidistantne na skúmanom frekvenčnom intervale. Vzdialenosť medzi dvomi relaxačnými frekvenciami môže byť odvodená z polšírky Debyeovských funkcií, čo dáva horný limit na pomer ω_j / ω_{j-1} . Samozrejme, menší pomer dáva lepšiu aproximáciu.

Na určenie váhových koeficientov a_j použijeme metódu navrhnutú v práci Emmerich a Korn (1987). Táto procedúra môže byť použitá pre akúkoľvek požadovanú frekvenčnú závislosť $Q(\omega)$ od frekvencie. Požadujeme, aby Q zovšeobecneného Maxwellovho telesa daného rovnicou (14) bolo identické danému $\tilde{Q}(\omega)$ na určitých diskretných frekvenciách $\tilde{\omega}_k$; $k = 1, \dots, K$. Z rovnice (14) môžeme odvodiť

$$\sum_{j=1}^n \frac{\omega_j \tilde{\omega}_k + \omega_j^2 \tilde{Q}^{-1}(\tilde{\omega}_k)}{\tilde{\omega}_k^2 + \omega_j^2} Y_j = \tilde{Q}^{-1}(\tilde{\omega}_k); \quad k = 1, \dots, K, \quad (15)$$

kde

$$Y_j = a_j \frac{\delta M}{M_U}. \quad (16)$$

Bežne vyberáme $\tilde{\omega}_k$ tie isté ako relaxačné frekvencie ω_j plus frekvencie medzi dvomi po sebe nasledujúcimi relaxačnými frekvenciami. To znamená, že $\tilde{\omega}_1 = \omega_1$ a $\tilde{\omega}_{k+1} = \tilde{\omega}_k \left(\omega_2 / \omega_1 \right)^{1/2}$. Potom $K = 2n - 1$ a systém rovníc (15) je preurčený a môžeme ho riešiť metódou najmenších štvorcov. Z rovnice (16) a normalizačnej podmienky

$$\sum_{j=1}^n Y_j = \frac{\delta M}{M_U}$$

dostaneme

$$a_j = \frac{Y_j}{\sum_{j=1}^n Y_j}.$$

Dosadením (16) do (12) dostaneme konečný výraz pre viskoelastický modul:

$$M_n(\omega) = M_U \left[1 - \sum_{j=1}^n \frac{Y_j \omega_j}{i\omega + \omega_j} \right]. \quad (17)$$

Zo vzťahu (17) vyplýva, že

$$M_U = \lim_{\omega \rightarrow \infty} M_n(\omega). \quad (18)$$

Vzťah medzi napätím a deformáciou po dosadení (17) do (5) je

$$\tau(\omega) = M_U \varepsilon(\omega) - \sum_{j=1}^n \xi_j(\omega), \quad (19)$$

kde

$$\xi_j(\omega) = \frac{M_U Y_j \omega_j}{i\omega + \omega_j} \varepsilon(\omega) \quad (20)$$

nazveme *anelastické funkcie*. Rovnica (19) bude mať v časovej oblasti tvar

$$\tau(t) = M_U \varepsilon(t) - \sum_{j=1}^n \xi_j(t) \quad , \quad (21)$$

pričom anelastické funkcie spĺňajú diferenciálne rovnice prvého rádu

$$\dot{\xi}_j(t) + \omega_j \xi_j(t) = \omega_j Y_j M_U \varepsilon(t) \quad . \quad (22)$$

Prejdime teraz k trojrozmernému izotropnému viskoelastickému kontinuu. Zavedme to isté označenie ako v časti 3.1.1.1. Ak v rovniciach (3) zmeníme obidva elastické moduly na viskoelastické podľa vzťahov (21) a (22) a združíme anelastické funkcie oboch modulov, môžeme napísať rovnice pre tenzor napätia vo viskoelastickom nehomogénnom izotropnom prostredí v tvare

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= \kappa(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \frac{2}{3}\mu(+2\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz}) - \sum_{j=1}^n \xi_j^{xx} \quad , \\ \tau_{yy} &= \kappa(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \frac{2}{3}\mu(-\varepsilon_{xx} + 2\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz}) - \sum_{j=1}^n \xi_j^{yy} \quad , \\ \tau_{zz} &= \kappa(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \frac{2}{3}\mu(-\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} + 2\varepsilon_{zz}) - \sum_{j=1}^n \xi_j^{zz} \quad , \\ \tau_{xy} &= 2\mu\varepsilon_{xy} - \sum_{j=1}^n \xi_j^{xy} \quad , \\ \tau_{yz} &= 2\mu\varepsilon_{yz} - \sum_{j=1}^n \xi_j^{yz} \quad , \\ \tau_{zx} &= 2\mu\varepsilon_{zx} - \sum_{j=1}^n \xi_j^{zx} \quad , \end{aligned} \quad (23)$$

pričom *anelastické funkcie* spĺňajú rovnice

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_j^{xx} + \omega_j \xi_j^{xx} &= \omega_j \left[\kappa Y_j^\kappa (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \frac{2}{3} \mu Y_j^\mu (+2\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz}) \right] \quad , \\ \dot{\xi}_j^{yy} + \omega_j \xi_j^{yy} &= \omega_j \left[\kappa Y_j^\kappa (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \frac{2}{3} \mu Y_j^\mu (-\varepsilon_{xx} + 2\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz}) \right] \quad , \\ \dot{\xi}_j^{zz} + \omega_j \xi_j^{zz} &= \omega_j \left[\kappa Y_j^\kappa (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \frac{2}{3} \mu Y_j^\mu (-\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} + 2\varepsilon_{zz}) \right] \quad , \\ \dot{\xi}_j^{xy} + \omega_j \xi_j^{xy} &= \omega_j [2\mu Y_j^\mu \varepsilon_{xy}] \quad , \\ \dot{\xi}_j^{yz} + \omega_j \xi_j^{yz} &= \omega_j [2\mu Y_j^\mu \varepsilon_{yz}] \quad , \\ \dot{\xi}_j^{zx} + \omega_j \xi_j^{zx} &= \omega_j [2\mu Y_j^\mu \varepsilon_{zx}] \quad , \end{aligned} \quad (24)$$

kde $\omega_j; j = 1, \dots, n$ sú relaxačné frekvencie. Keďže modul torzie priamo určuje rýchlosť šírenia S vln, koeficienty $Y_j^\mu; j = 1, \dots, n$ získame riešením systému rovníc (15)

$$\sum_{j=1}^n \frac{\omega_j \tilde{\omega}_k + \omega_j^2 \tilde{Q}_S^{-1}(\tilde{\omega}_k)}{\tilde{\omega}_k^2 + \omega_j^2} Y_j^\mu = \tilde{Q}_S^{-1}(\tilde{\omega}_k); \quad k = 1, \dots, 2n - 1 \quad , \quad (25)$$

kde $\tilde{Q}_S(\tilde{\omega}_k); k = 1, \dots, 2n - 1$ sú požadované hodnoty faktora kvality pre S vlny na špecifikovaných frekvenciách $\tilde{\omega}_k$. Podobne môžeme určiť koeficienty $Y_j^{\kappa + \frac{4}{3}\mu}; j = 1, \dots, n$ modulu ($\kappa + \frac{4}{3}\mu$) riešením systému

$$\sum_{j=1}^n \frac{\omega_j \tilde{\omega}_k + \omega_j^2 \tilde{Q}_P^{-1}(\tilde{\omega}_k)}{\tilde{\omega}_k^2 + \omega_j^2} Y_j^{\kappa + \frac{4}{3}\mu} = \tilde{Q}_P^{-1}(\tilde{\omega}_k); \quad k = 1, \dots, 2n - 1 \quad , \quad (26)$$

kde $\tilde{Q}_P(\tilde{\omega}_k); k = 1, \dots, n$ sú požadované hodnoty faktora kvality pre P vlny na špecifikovaných frekvenciách $\tilde{\omega}_k$. Koeficienty $Y_j^\kappa; j = 1, \dots, n$ potom vypočítame zo vzťahu

$$Y_j^\kappa = \frac{\left(\kappa + \frac{4}{3}\mu\right) Y_j^{\kappa + \frac{4}{3}\mu} - \frac{4}{3}\mu Y_j^\mu}{\kappa} \quad . \quad (27)$$

Reologické vlastnosti prostredia popísaného rovnicami (23) a (24) sú popísané modelmi dvoch zovšeobecnených Maxwellových telies. Jeden pre modul torzie a druhý pre modul stlačiteľnosti, pričom μ a κ sú nerelaxované moduly.

V praxi obyčajne poznáme fázové rýchlosti P a/alebo S vln na určitej frekvencii ω_r (nie nutne rovnakej pre oba typy vln). Teda potrebujeme vzťah medzi fázovými rýchlosťami a odpovedajúcim nerelaxovaným modulom, ktorý špecifikuje výpočtový model prostredia. Fázová rýchlosť $c(\omega)$ je daná vzťahom

$$\frac{1}{c(\omega)} = \text{Re} \left[\left(\frac{M_n(\omega)}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad . \quad (28)$$

Potom z rovníc (17) a (28) dostávame

$$\boxed{M_U = \rho c^2(\omega_r) \frac{R + \Theta_1}{2R^2}} \quad , \quad (29)$$

pričom $R = (\Theta_1^2 + \Theta_2^2)^{\frac{1}{2}}$ a

$$\begin{aligned}\Theta_1 &= 1 - \sum_{j=1}^n Y_j \frac{\omega_j^2}{\omega_j^2 + \omega_r^2} \quad , \\ \Theta_2 &= \sum_{j=1}^n Y_j \frac{\omega_j \omega_r}{\omega_j^2 + \omega_r^2} \quad .\end{aligned}\tag{30}$$

Ak poznáme fázovú rýchlosť $c_s(\omega_r)$ a faktor kvality Q_s S vln, potom zo vzťahu (25) určíme Y_j^μ ; $j = 1, \dots, n$ a z rovníc (30) a (29) vypočítame nerelaxovaný modul torzie μ . Ak poznáme fázovú rýchlosť $c_p(\omega_r)$ a faktor kvality Q_p P vln, potom zo vzťahu (26) vypočítame $Y_j^{\kappa+\frac{4}{3}\mu}$; $j = 1, \dots, n$ a z rovníc (30) a (29) vypočítame M_U zodpovedajúce nerelaxovanému modulu $\left(\kappa + \frac{4}{3}\mu\right)$. Pomocou známeho nerelaxovaného modulu μ ľahko určíme nerelaxovaný modul stlačiteľnosti κ .

3.1.1.3 Okrajové podmienky na materiálovej diskontinuite

Nech hustota ρ , modul torzie μ a modul stlačiteľnosti κ majú diskontinuitu prvého rádu cez povrch S s normálovým vektorom \vec{n} . Inými slovami, predpokladajme materiálovú diskontinuitu na ploche S . Potom okrajovými podmienkami na materiálovej diskontinuite sú

1. spojitosť posunutia \vec{u} na ploche S ,
2. spojitosť napätia $\vec{T}(\vec{u}, \vec{n})$ na ploche S .

Predtým, než nájdeme spôsob splnenia okrajových podmienok, vyslovme **teorému**:

Nech $A_1, A_2 \in \mathbb{R}^3$ sú neprázdne, otvorené, súvislé množiny s euklidovskou normou také, že $A_1 \cap A_2 = \emptyset$, $\bar{A}_1 \cap \bar{A}_2 \neq \emptyset$.

Nech $\varphi_i, c_i, g_i : A_i \times \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}$, pre $i = 1, 2$, také, že

$$\varphi_i = \varphi_i[x, y, z, t]; \quad c_i = c_i[x, y, z, t]; \quad g_i = g_i[x, y, z, t]$$

sú ohraničené na $\bar{A}_i \times \mathbb{R}_0^+$,

spĺňajú Dirichletove podmienky (Vsuška 2) v časovej premennej t a platí

$$\begin{aligned}\varphi_1(., t) &= c_1(., t) * g_1(., t) \quad \forall [x, y, z] \in A_1 \\ \varphi_2(., t) &= c_2(., t) * g_2(., t) \quad \forall [x, y, z] \in A_2,\end{aligned}\tag{31}$$

pričom operáciu konvolúcie $*$ definujeme vzťahom

$$c_i(t) * g_i(t) = \int_0^t c_i(\tau) g_i(t - \tau) d\tau.$$

Vsuvka 2

Definícia

Nech $A \subset \mathbb{R}^3$ je otvorená, súvislá množina s euklidovskou normou. Hovoríme, že funkcia $f : A \times \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}$; $f = f[x, y, z, t]$ spĺňa na množine A **Dirichletove podmienky** v časovej premennej t , ak

$$\int_0^{\infty} |f(x, y, z, t)| dt < \infty$$

a na množine A má najviac konečný počet lokálnych extrémov a maximálne konečný počet bodov nespojitosti prvého druhu v časovej premennej t .

Označme ďalej

$$\hat{\varphi}_i(., \omega) = \mathbf{F}[\varphi_i(., t)]; \quad \hat{c}_i(., \omega) = \mathbf{F}[c_i(., t)]; \quad \hat{g}_i(., \omega) = \mathbf{F}[g_i(., t)],$$

kde \mathbf{F} označuje Fourierovu transformáciu.

Potom vzhľadom na konvolučnú vetu platí:

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}_1(., \omega) &= \hat{c}_1(., \omega) \cdot \hat{g}_1(., \omega) \quad \forall [x, y, z] \in \bar{A}_1 \\ \hat{\varphi}_2(., \omega) &= \hat{c}_2(., \omega) \cdot \hat{g}_2(., \omega) \quad \forall [x, y, z] \in \bar{A}_2. \end{aligned} \quad (32)$$

Nech

$$\begin{aligned} B &= \{[x, y, z] \in \mathbb{R}^3; [x, y, z] \in \partial A_1 \cap \partial A_2, \\ &\quad \hat{\varphi}_1(., \omega) = \hat{\varphi}_2(., \omega) \quad \forall \text{ pevné } \omega \in \mathbb{R}_0^+, \\ &\quad \hat{c}_1(., \omega) \neq \hat{c}_2(., \omega) \quad \forall \text{ pevné } \omega \in \mathbb{R}_0^+, \\ &\quad \hat{c}_i(., \omega) \neq 0 \quad i = 1, 2\}. \end{aligned}$$

Potom pre $\forall [\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}] \in B$ a pre \forall pevné $\omega \in \mathbb{R}_0^+$ platí

$$\hat{\varphi}(., \omega) = \hat{\varphi}_1(., \omega) = \hat{\varphi}_2(., \omega) = \frac{2}{\frac{1}{\hat{c}_1(., \omega)} + \frac{1}{\hat{c}_2(., \omega)}} \cdot \frac{\hat{g}_1(., \omega) + \hat{g}_2(., \omega)}{2}. \quad (33)$$

Dôkaz je uvedený vo Vsuvke 3.

Vsuvka 3

Dôkaz

Riešme sústavu rovníc (32) v bode $[\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}] \in B$ pre ľubovoľné, ale pevné $\omega \in \mathbb{R}_0^+$. Potom pre $\forall [\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}] \in B, \omega \in \mathbb{R}_0^+$ platí

$$\hat{c}_2(., \omega) \cdot \hat{\varphi}_1(., \omega) = \hat{c}_1(., \omega) \cdot \hat{c}_2(., \omega) \cdot \hat{g}_1(., \omega)$$

$$\hat{c}_1(., \omega) \cdot \hat{\varphi}_2(., \omega) = \hat{c}_1(., \omega) \cdot \hat{c}_2(., \omega) \cdot \hat{g}_2(., \omega).$$

Sčítaním rovníc dostaneme

$$\begin{aligned} \hat{c}_2(., \omega) \cdot \hat{\varphi}_1(., \omega) + \hat{c}_1(., \omega) \cdot \hat{\varphi}_2(., \omega) = \\ \hat{c}_1(., \omega) \cdot \hat{c}_2(., \omega) \cdot [\hat{g}_1(., \omega) + \hat{g}_2(., \omega)]. \end{aligned}$$

Vzhľadom na vlastnosti množiny B , pre $\forall [\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}] \in B$, pevné $\omega \in \mathbb{R}_0^+$ platí $\hat{\varphi}_1(., \omega) = \hat{\varphi}_2(., \omega) = \hat{\varphi}(., \omega)$. Jednoduchou algebraickou úpravou dostaneme tvrdenie vety

$$\hat{\varphi}(., \omega) \cdot [\hat{c}_1(., \omega) + \hat{c}_2(., \omega)] = \hat{c}_1(., \omega) \cdot \hat{c}_2(., \omega) \cdot [\hat{g}_1(., \omega) + \hat{g}_2(., \omega)],$$

t.j.

$$\hat{\varphi}(., \omega) = \frac{\hat{c}_1(., \omega) \cdot \hat{c}_2(., \omega)}{[\hat{c}_1(., \omega) + \hat{c}_2(., \omega)]} \cdot [\hat{g}_1(., \omega) + \hat{g}_2(., \omega)]$$

alebo

$$\hat{\varphi}(., \omega) = \frac{2}{\frac{1}{\hat{c}_1(., \omega)} + \frac{1}{\hat{c}_2(., \omega)}} \cdot \frac{\hat{g}_1(., \omega) + \hat{g}_2(., \omega)}{2}.$$

Napišme teraz pohybovú rovnicu (1) pre u zložku rýchlosti posunutia v tvare

$$\dot{u} = \frac{1}{\rho} F^u,$$

kde $F^u = \tau_{xx}{}_{,x} + \tau_{yx}{}_{,y} + \tau_{zx}{}_{,z} + f_x$. Zrýchlenie častice \dot{u} musí byť cez materiálovú diskontinuitu spojité, pretože posunutie je spojité. Aplikáciou teorémy (33) dostávame

- a. aritmetické priemerovanie ρ na materiálovej diskontinuite,
- b. aritmetické priemerovanie F^u na materiálovej diskontinuite.

To isté platí aj o zložkách rýchlosti posunutia v a w .

Vektor napätia $\vec{T}(\vec{u}, \vec{n})$ je

$$[T_x, T_y, T_z] = [n_x, n_y, n_z] \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix}. \quad (34)$$

Ak je plocha S dostatočne hladká, zo spojitosti \vec{T} vyplýva aj spojitosť každej zložky tenzoru napätia.

Rozdeľme normálové zložky tenzoru napätia na izotropické a deviatorické časti tak, že

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= \tau_{\theta}^I + \tau_{xx}^D, \\ \tau_{yy} &= \tau_{\theta}^I + \tau_{yy}^D, \\ \tau_{zz} &= \tau_{\theta}^I + \tau_{zz}^D, \end{aligned} \quad (35)$$

kde

$$\tau_{\theta}^I = \kappa \theta - \sum_{j=1}^n \xi_j^{\theta}, \quad (36)$$

$$\dot{\xi}_j^{\theta} + \omega_j \xi_j^{\theta} = \omega_j \kappa Y_j^{\kappa} \theta$$

a

$$\begin{aligned} \tau_{xx}^D &= \frac{2}{3} \mu (2 \varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz}) - \sum_{j=1}^n \xi_j^{Dxx}, \\ \tau_{yy}^D &= \frac{2}{3} \mu (-\varepsilon_{xx} + 2\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz}) - \sum_{j=1}^n \xi_j^{Dyy}, \\ \tau_{zz}^D &= \frac{2}{3} \mu (-\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} + 2\varepsilon_{zz}) - \sum_{j=1}^n \xi_j^{Dzz}, \end{aligned} \quad (37)$$

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_j^{Dxx} + \omega_j \xi_j^{Dxx} &= \omega_j \frac{2}{3} \mu Y_j^{\mu} (2 \varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz}), \\ \dot{\xi}_j^{Dyy} + \omega_j \xi_j^{Dyy} &= \omega_j \frac{2}{3} \mu Y_j^{\mu} (-\varepsilon_{xx} + 2\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz}), \\ \dot{\xi}_j^{Dzz} + \omega_j \xi_j^{Dzz} &= \omega_j \frac{2}{3} \mu Y_j^{\mu} (-\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} + 2\varepsilon_{zz}), \end{aligned} \quad (38)$$

pričom sme anelastické funkcie rozdelili na časti príslušné izotropickým a deviatorickým častiam normálových zložiek tenzoru napätia

$$\begin{aligned} \xi_j^{xx} &= \xi_j^{\theta} + \xi_j^{Dxx}, \\ \xi_j^{yy} &= \xi_j^{\theta} + \xi_j^{Dyy}, \\ \xi_j^{zz} &= \xi_j^{\theta} + \xi_j^{Dzz}. \end{aligned} \quad (39)$$

Spojitosť normálových zložiek tenzoru napätia znamená aj spojitosť ich súčtu $\tau_{xx} + \tau_{yy} + \tau_{zz}$. Z rovníc (35) – (39) a z predpokladu, že súčet častí anelastických funkcií príslušných k deviatorickým častiam normálových zložiek tenzoru napätia sa rovná nule, vyplýva, že

$$\tau_{xx} + \tau_{yy} + \tau_{zz} = 3\kappa\theta - 3\sum_{j=1}^n \xi_j^\theta, \quad (40)$$

kde

$$\dot{\xi}_j^\theta + \omega_j \xi_j^\theta = \omega_j \kappa Y_j^\kappa \theta, \quad (41)$$

pričom $\theta = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$. Transformujme teraz rovnicu (40) do frekvenčnej oblasti Fourierovou transformáciou. Potom po dosadení (20) a (17) dostaneme

$$\tau_{xx}(\omega) + \tau_{yy}(\omega) + \tau_{zz}(\omega) = 3\kappa_n(\omega)\theta(\omega), \quad (42)$$

kde

$$\kappa_n(\omega) = \kappa \left[1 - \sum_{j=1}^n \frac{Y_j^\kappa \omega_j}{i\omega + \omega_j} \right] \quad (43)$$

je komplexný modul stlačiteľnosti. Zo spojitosti každej zložky tenzoru napätia, spojivosti súčtu normálových zložiek tenzoru napätia a vzťahov (35) môžeme zistiť aj spojitosť deviatorických častí normálových zložiek tenzoru napätia, ktoré majú vo frekvenčnej oblasti tvar

$$\begin{aligned} \tau_{xx}^D(\omega) &= \frac{2}{3} \mu_n(\omega) (2\varepsilon_{xx}(\omega) - \varepsilon_{yy}(\omega) - \varepsilon_{zz}(\omega)), \\ \tau_{yy}^D(\omega) &= \frac{2}{3} \mu_n(\omega) (-\varepsilon_{xx}(\omega) + 2\varepsilon_{yy}(\omega) - \varepsilon_{zz}(\omega)), \\ \tau_{zz}^D(\omega) &= \frac{2}{3} \mu_n(\omega) (-\varepsilon_{xx}(\omega) - \varepsilon_{yy}(\omega) + 2\varepsilon_{zz}(\omega)), \end{aligned} \quad (44)$$

kde

$$\mu_n(\omega) = \mu \left[1 - \sum_{j=1}^n \frac{Y_j^\mu \omega_j}{i\omega + \omega_j} \right]. \quad (45)$$

Na rovnice (42) a (44) môžeme aplikovať teorému (33) a dostávame

- harmonické priemerovanie komplexného modulu stlačiteľnosti $\kappa_n(\omega)$ vo frekvenčnej oblasti na materiállovej diskontinuite,
- harmonické priemerovanie komplexného modulu torzie $\mu_n(\omega)$ vo frekvenčnej oblasti na materiállovej diskontinuite,

c. aritmetické priemerovanie $u_{,x}$, $v_{,y}$ and $w_{,z}$ na materiálovej diskontinuite.

Podobne, spojitosť šmykových zložiek tenzoru napätia vedie na

- harmonické priemerovanie komplexného modulu torzie $\mu_n(\omega)$ vo frekvenčnej oblasti na materiálovej diskontinuite,
- aritmetické priemerovanie $u_{,y}$, $u_{,z}$, $v_{,x}$, $v_{,z}$, $w_{,x}$ a $w_{,y}$ na materiálovej diskontinuite.

3.1.1.4 Okrajové podmienky na voľnom povrchu

Rozhranie viskoelastického prostredia a vákuá sa nazýva *voľný povrch*. Predpokladajme, že toto rozhranie predstavuje plocha S s normálovým vektorom \vec{n} . Potom okrajovou podmienkou na voľnom povrchu je podmienka *nulového napätia*

$$\vec{T}(\vec{n}) = 0. \quad (46)$$

V prípade rovinného voľného povrchu a voľby súradnicového systému tak, aby voľný povrch odpovedal rovine $z = 0$ a kladná časť súradnicovej osi z smerovala do kontinua, môžeme okrajovú podmienku zapísať v tvare

$$\tau_{zx}|_{z=0} = \tau_{zy}|_{z=0} = \tau_{zz}|_{z=0} = 0, \quad (47)$$

kde $\tau_{zx}, \tau_{zy}, \tau_{zz}$ sú zložky tenzoru napätia.

3.1.2 Konečno-diferenčná schéma

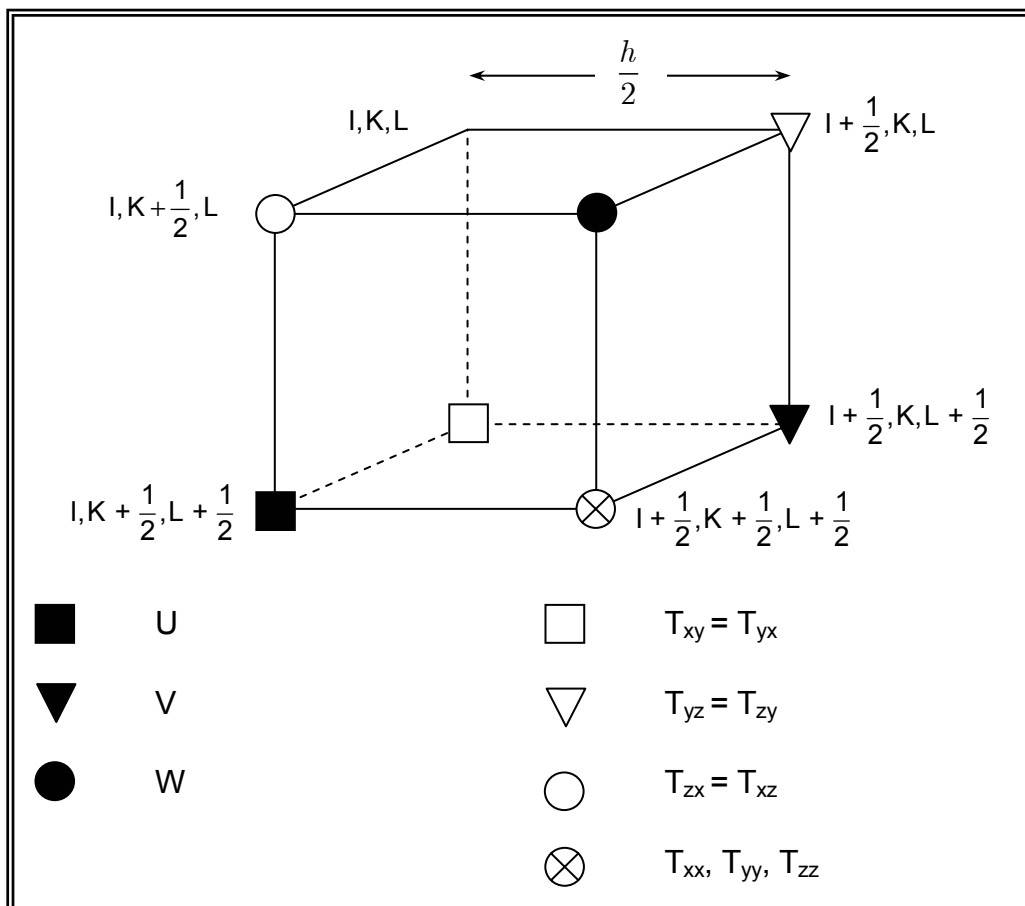
Rovnice (1), (23) a (24) môžeme riešiť rôznymi konečno-diferenčnými schémami líšiacimi sa presnosťou a stabilitou. Hľadáme však tzv. heterogénnu konečno-diferenčnú schému. To znamená rovnakú konečno-diferenčnú schému pre všetky vnútorné body siete (body siete neležiace na hraniciach siete) bez ohľadu na to, v akej pozícii sú voči materiálovým diskontinuitám. Prítomnosť materiálovej diskontinuity zahrnieme len hodnotami materiálových parametrov (hustota, moduly).

V práci Moczo, Kristek, Archuleta a Halada (2001), je odvodená heterogénnu konečno-diferenčná schéma na striedavo usporiadanej sieti v elastickom prostredí. Explicitná heterogénnu konečno-diferenčná schéma, odvodená z formulácie pohybovej rovnice v posunutí a napätí, v súčasnosti najpresnejšie rieši pohybové rovnice v elastickom kontinuu s materiálovými diskontinuitami. Odvodíme podobnú heterogénnu konečno-diferenčnú schému pre rovnice (1), (23) a (24) popisujúce pohyb vo viskoelastickom kontinuu.

3.1.2.1 Konečno-diferenčná sieť

Pokryme výpočtovú oblasť pravouhlou striedavo usporiadanou konečno-diferenčnou sieťou s konštantným sieťovým krokom h vo všetkých troch smeroch.

Jedna bunka tejto siete je zobrazená na Obr. 3, kde U, V, W označujú pozície diskretných aproximácií hodnôt posunutia. V rovnakých pozíciách sú aj diskkrétne aproximácie hodnôt rýchlosti posunutia. T_{xx} , T_{yy} , T_{zz} , T_{xy} , T_{yz} , T_{zx} označujú pozíciu diskretných aproximácií hodnôt zložiek tenzora napätia.



Obr. 3 Konečno-diferenčná bunka

3.1.2.2 Objemové aritmetické a harmonické priemerovanie

Predpokladajme sieťovú bunku veľkosti $h \times h \times h$ so stredom v $\left(x_I, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}\right)$ a definujme objemový integrál

$$\iiint_{V^u} dV^u = \int_{x_{I-\frac{1}{2}}}^{x_{I+\frac{1}{2}}} \int_{y_K}^{y_{K+1}} \int_{z_L}^{z_{L+1}} dx \, dy \, dz \quad .$$

Integrovanie rovnice (1) pre u zložku rýchlosti posunutia

$$\iiint_{V^u} \rho \dot{u} \, dV^u = \iiint_{V^u} (\tau_{xx} \gamma_x + \tau_{yx} \gamma_y + \tau_{zx} \gamma_z + f_x) \, dV^u \quad (48)$$

a aplikovanie vety o strednej hodnote vedie k aproximácii

$$\begin{aligned} \rho_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^A \dot{u} \left(x_I, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) \doteq \\ \tau_{xx, x} \left(x_I, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) + \tau_{yy, y} \left(x_I, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) \\ + \tau_{zz, z} \left(x_I, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) + f_x \left(x_I, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right), \end{aligned} \quad (49)$$

kde

$$\rho_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^A = \frac{1}{h^3} \iiint_{V^u} \rho \, dV^u \quad (50)$$

je *objemový aritmetický priemer hustoty*.

Analogicky aplikovaním objemových integrálov

$$\iiint_{V^v} dV^v = \int_{x_I}^{x_{I+1}} \int_{y_{K-\frac{1}{2}}}^{y_{K+\frac{1}{2}}} \int_{z_L}^{z_{L+1}} dx \, dy \, dz$$

a

$$\iiint_{V^w} dV^w = \int_{x_I}^{x_{I+1}} \int_{y_K}^{y_{K+1}} \int_{z_{L-\frac{1}{2}}}^{z_{L+\frac{1}{2}}} dx \, dy \, dz$$

na rovnice (1) pre v a w zložky rýchlosti posunutia získame rovnice pre $\dot{v} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_K, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right)$ a $\dot{w} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_L, t \right)$.

Transformujme rovnicu (36) pre izotropickú časť τ_θ^I normálových zložiek tenzoru napätia do frekvenčnej oblasti. Potom

$$\tau_\theta^I(\omega) = \kappa_n(\omega) \theta(\omega), \quad (51)$$

pričom $\kappa_n(\omega)$ je komplexný modul definovaný vzťahom (43). Predpokladajme sieťovú bunku veľkosti $h \times h \times h$ s centrom v $\left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}} \right)$ a definujme objemový integrál

$$\iiint_{V^\theta} dV^\theta = \int_{x_I}^{x_{I+1}} \int_{y_K}^{y_{K+1}} \int_{z_L}^{z_{L+1}} dx \, dy \, dz \quad . \quad (52)$$

Delenie rovnice (51) modulom $\kappa_n(\omega)$ a následná integrácia

$$\iiint_{V^\theta} \frac{\tau_\theta^I(\omega)}{\kappa_n(\omega)} dV^\theta = \iiint_{V^\theta} (\varepsilon_{xx}(\omega) + \varepsilon_{yy}(\omega) + \varepsilon_{zz}(\omega)) dV^\theta$$

vedie po aplikácii vety o strednej hodnote na rovnicu

$$\begin{aligned} \tau_\theta^I \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, \omega \right) &\doteq \kappa_n^H \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, \omega \right) \times \\ &\left[\varepsilon_{xx} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, \omega \right) \right. \\ &+ \varepsilon_{yy} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, \omega \right) \\ &\left. + \varepsilon_{zz} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, \omega \right) \right], \end{aligned} \quad (53)$$

kde

$$\begin{aligned} \kappa_n^H \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, \omega \right) &= \left[\frac{1}{h^3} \iiint_{V^\theta} \frac{dV^\theta}{\kappa_n(\omega)} \right]^{-1} \\ &= \left[\frac{1}{h^3} \iiint_{V^\theta} \frac{dV^\theta}{\kappa \left(1 - \sum_{j=1}^n \frac{Y_j^\kappa \omega_j}{i\omega + \omega_j} \right)} \right]^{-1} \end{aligned} \quad (54)$$

je objemový harmonický priemer komplexného modulu stlačiteľnosti.

Rovnica (53) s efektívnym modulom (54) je vo frekvenčnej oblasti. My však chceme konečno-diferenčnú schému v časovej oblasti. To znamená, musíme nájsť efektívne nerelaxované moduly κ a μ a koeficienty Y_j , ktoré zodpovedajú vzťahom (53) a (54) a ktoré budú potom dosadené do rovnic (23) a (24), ktoré chceme schémou riešiť.

Efektívny modul κ_n^H daný vzťahom (54) reprezentuje efektívne (priemerné) viskoelastické teleso v príslušnej sieťovej bunke. Predpokladáme, že reológia tohto telesa zodpovedá zovšeobecnenému Maxwellovmu telesu. To znamená, že podľa vzťahu (17) môžeme κ_n^H vyjadriť v tvare

$$\kappa_n^H \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, \omega \right) = \kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \left[1 - \sum_{j=1}^n \frac{\bar{Y}_{j;I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^\kappa \omega_j}{i\omega + \omega_j} \right], \quad (55)$$

pričom $\kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H$ je nerelaxovaný modul. Ide o to, ako nájsť hodnoty $\kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H$ a $\bar{Y}_{j;I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^\kappa$; $j = 1, \dots, n$. Na základe vzťahu (6) vypočítame faktor kvality $\bar{Q}_\kappa(\tilde{\omega}_k)$ objemového harmonického priemeru $\kappa_n^H(\omega)$ pre frekvencie $\tilde{\omega}_k$; $k = 1, \dots, 2n - 1$

$$\bar{Q}_\kappa^{-1}(\tilde{\omega}_k) = \frac{\text{Im } \kappa_n^H \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, \tilde{\omega}_k \right)}{\text{Re } \kappa_n^H \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, \tilde{\omega}_k \right)}. \quad (56)$$

Potom riešením sústavy rovníc (15) pre $\bar{Q}_\kappa(\tilde{\omega}_k)$,

$$\sum_{j=1}^n \frac{\omega_j \tilde{\omega}_k + \omega_j^2 \bar{Q}_\kappa^{-1}(\tilde{\omega}_k)}{\tilde{\omega}_k^2 + \omega_j^2} \bar{Y}_{j;I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^\kappa = \bar{Q}_\kappa^{-1}(\tilde{\omega}_k); \quad k = 1, \dots, 2n - 1, \quad (57)$$

vypočítame $\bar{Y}_{j;I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^\kappa$; $j = 1, \dots, n$. Ako vyplýva zo vzťahu (18), nerelaxovaný modul $\kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H$ sa rovná limite $\kappa_n^H(\omega)$. Potom

$$\kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H = \lim_{\omega \rightarrow \infty} \kappa_n^H \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, \omega \right) = \left[\frac{1}{h^3} \iiint_{V^\theta} \frac{dV^\theta}{\kappa} \right]^{-1}. \quad (58)$$

Rovnica (58) hovorí, že nerelaxovaný modul objemového harmonického priemeru komplexného modulu stlačiteľnosti je rovný objemovému harmonickému priemeru nerelaxovaných modulov, čo sme aj očakávali.

Transformujme rovnicu (53) naspäť do časovej oblasti. Potom

$$\begin{aligned} \tau_\theta^I \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) &\doteq \kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \left[\begin{aligned} &\varepsilon_{xx} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) \\ &+ \varepsilon_{yy} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) \\ &+ \varepsilon_{zz} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) \end{aligned} \right] \\ &- \sum_{j=1}^n \xi_j^\theta \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right), \end{aligned} \quad (59)$$

kde

$$\begin{aligned}
& \dot{\xi}_j^\theta \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) + \omega_j \xi_j^\theta \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) \doteq \\
& \omega_j \kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \bar{Y}_{j; I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^\kappa \left[\begin{aligned} & \varepsilon_{xx} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) \\ & + \varepsilon_{yy} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) \\ & + \varepsilon_{zz} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) \end{aligned} \right] .
\end{aligned} \tag{60}$$

Podobne z rovnice (44) pre deviatorickú časť zložky τ_{xx}^D tenzoru napätia získame

$$\begin{aligned}
\tau_{xx}^D \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) & \doteq \frac{2}{3} \mu_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \left[\begin{aligned} & 2\varepsilon_{xx} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) \\ & - \varepsilon_{yy} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) \\ & - \varepsilon_{zz} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) \end{aligned} \right] \\
& - \sum_{j=1}^n \xi_j^{Dxx} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) ,
\end{aligned} \tag{61}$$

kde

$$\begin{aligned}
& \dot{\xi}_j^{Dxx} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) + \omega_j \xi_j^{Dxx} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) \doteq \\
& \omega_j \frac{2}{3} \mu_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \bar{Y}_{j; I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^\mu \left[\begin{aligned} & 2\varepsilon_{xx} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) \\ & - \varepsilon_{yy} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) \\ & - \varepsilon_{zz} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) \end{aligned} \right] ,
\end{aligned} \tag{62}$$

a

$$\boxed{\mu_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H = \left[\frac{1}{h^3} \iiint_{V^\theta} \frac{dV^\theta}{\mu} \right]^{-1}} \tag{63}$$

je objemový harmonický priemer nerelaxovaného modulu torzie. Hodnoty $\bar{Y}_{j; I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^\mu$; $j = 1, \dots, n$ určíme riešením rovníc

$$\boxed{\sum_{j=1}^n \frac{\omega_j \tilde{\omega}_k + \omega_j^2 \bar{Q}_\mu^{-1}(\tilde{\omega}_k)}{\tilde{\omega}_k^2 + \omega_j^2} \bar{Y}_{j;I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^\mu = \bar{Q}_\mu^{-1}(\tilde{\omega}_k); \quad k = 1, \dots, 2n-1}, \quad (64)$$

pričom $\bar{Q}_\mu^{-1}(\tilde{\omega}_k)$ sú hodnoty faktora kvality objemového harmonického priemeru komplexného modulu torzie na frekvenciách $\tilde{\omega}_k$; $k = 1, \dots, 2n-1$

$$\bar{Q}_\mu^{-1}(\tilde{\omega}_k) = \frac{\text{Im } \mu_n^H \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, \tilde{\omega}_k \right)}{\text{Re } \mu_n^H \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, \tilde{\omega}_k \right)}, \quad (65)$$

kde

$$\begin{aligned} \mu_n^H \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, \omega \right) &= \left[\frac{1}{h^3} \iiint_{V^\theta} \frac{dV^\theta}{\mu_n(\omega)} \right]^{-1} \\ &= \left[\frac{1}{h^3} \iiint_{V^\theta} \frac{dV^\theta}{\mu \left(1 - \sum_{j=1}^n \frac{Y_j^\mu \omega_j}{i\omega + \omega_j} \right)} \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (66)$$

Substitúciu τ_θ^I z rovnice (59) a τ_{xx}^D z rovnice (61) do rovnice (35) dostaneme

$$\begin{aligned} \tau_{xx} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) &\doteq \kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \left(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} \right) \\ &+ \frac{2}{3} \mu_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \left(2\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz} \right) \\ &- \sum_{j=1}^n \xi_j^{xx}. \end{aligned} \quad (67)$$

Anelastickú funkciu ξ_j^{xx} získame dosadením ξ_j^θ z rovnice (60) a ξ_j^{Dxx} z rovnice (62) do rovnice (39)

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_j^{xx} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) &+ \omega_j \xi_j^{xx} \left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t \right) \doteq \\ &+ \omega_j \kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \bar{Y}_{j;I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^\kappa \left(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} \right) \\ &+ \frac{2}{3} \omega_j \mu_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \bar{Y}_{j;I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^\mu \left(2\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz} \right), \end{aligned} \quad (68)$$

kde ε_{xx} , ε_{yy} , ε_{zz} a ξ_j^{xx} sú hodnoty v bode $\left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t\right)$. Analogicky získame rovnice pre $\tau_{yy}\left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t\right)$ and $\tau_{zz}\left(x_{I+\frac{1}{2}}, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}, t\right)$.

Rovnakým postupom môžeme odvodiť rovnice pre šmykové zložky tenzoru napätia. Pre zložku $\tau_{xy}\left(x_I, y_K, z_{L+\frac{1}{2}}, t\right)$ bude mať rovnica (23) po integrovaní vo frekvenčnej oblasti a aplikácii vety o strednej hodnote tvar

$$\tau_{xy}\left(x_I, y_K, z_{L+\frac{1}{2}}\right) \doteq 2\mu^H_{I,K,L+\frac{1}{2}}\left(x_I, y_K, z_{L+\frac{1}{2}}\right)\varepsilon_{xy}\left(x_I, y_K, z_{L+\frac{1}{2}}\right) - \sum_{j=1}^n \xi_j^{xy}\left(x_I, y_K, z_{L+\frac{1}{2}}\right), \quad (69)$$

pričom

$$\dot{\xi}_j^{xy}\left(x_I, y_K, z_{L+\frac{1}{2}}\right) + \omega_j \xi_j^{xy}\left(x_I, y_K, z_{L+\frac{1}{2}}\right) \doteq \omega_j 2\mu^H_{I,K,L+\frac{1}{2}} \bar{Y}^\mu_{j:I,K,L+\frac{1}{2}} \varepsilon_{xy}\left(x_I, y_K, z_{L+\frac{1}{2}}\right), \quad (70)$$

kde $\bar{Y}^\mu_{j:I,K,L+\frac{1}{2}}$ sú vypočítané vzťahmi analogickými vzťahom (63) – (66) s použitím objemového integrálu

$$\iiint_{V^{xy}} dV^{xy} = \int_{x_{I-\frac{1}{2}}}^{x_{I+\frac{1}{2}}} \int_{y_{K-\frac{1}{2}}}^{y_{K+\frac{1}{2}}} \int_{z_L}^{z_{L+1}} dx dy dz.$$

V prípade ostatných zložiek postupujeme podobne.

3.1.2.3 Schéma pre vnútorné body

Odvozené rovnice (49), (67), (68), (69) a (70) nahradíme diferenčnými rovnicami pomocou aproximácie derivácií štandardnými konečno-diferenčnými formulami. Časové derivácie aproximujeme formulami 2. rádu presnosti

$$\dot{\varphi}(x, y, z, t) = \frac{\varphi\left(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2}\right) - \varphi\left(x, y, z, t - \frac{\Delta t}{2}\right)}{\Delta t} + O(\Delta^2 t), \quad (71)$$

kde Δt je časový krok a $\varphi(x, y, z, t)$ ľubovoľná veličina poľa (zložka posunutia, rýchlosti posunutia alebo tenzoru napätia). Priestorové derivácie aproximujeme formulami 4. rádu presnosti, napr. pre $\frac{\partial \varphi(x, y, z, t)}{\partial x}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi(x, y, z, t)}{\partial x} = & -\frac{1}{24h} \varphi\left(x + \frac{3}{2}h, y, z, t\right) \\ & + \frac{9}{8h} \varphi\left(x + \frac{1}{2}h, y, z, t\right) \\ & - \frac{9}{8h} \varphi\left(x - \frac{1}{2}h, y, z, t\right) \\ & + \frac{1}{24h} \varphi\left(x - \frac{3}{2}h, y, z, t\right) + O(\Delta^4 x) \quad , \end{aligned} \quad (72)$$

kde h je sieťový krok.

Nech $u_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}}$ je diskrétna aproximácia zložky u vektoru rýchlosti posunutia v sieťovom bode $I, K + \frac{1}{2}, L + \frac{1}{2}$ a v časovej hladine $m + \frac{1}{2}$. Nech $T_{I, K, L}^{\eta, \gamma, m}$; $\eta, \gamma \in \{x, y, z\}$ je diskrétna aproximácia zložky $\tau_{\eta\gamma}$ tenzoru napätia v bode I, K, L a časovej hladine m . Nech $F_{I, K, L}^{x, m}$ je diskrétna aproximácie zložky f_x hustoty objemovej sily v bode I, K, L a časovej hladine m . Potom konečno-diferenčná aproximácia rovnice (49) je

$$\begin{aligned} u_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} = & u_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} \\ & + \frac{\Delta t}{h} \frac{1}{\rho_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^A} \left[a \left(T_{I+\frac{3}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{xx, m} - T_{I-\frac{3}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{xx, m} \right) \right. \\ & + b \left(T_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{xx, m} - T_{I-\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{xx, m} \right) \\ & + a \left(T_{I, K+2, L+\frac{1}{2}}^{xy, m} - T_{I, K-1, L+\frac{1}{2}}^{xy, m} \right) \\ & + b \left(T_{I, K+1, L+\frac{1}{2}}^{xy, m} - T_{I, K, L+\frac{1}{2}}^{xy, m} \right) \\ & + a \left(T_{I, K+\frac{1}{2}, L+2}^{zx, m} - T_{I, K+\frac{1}{2}, L-1}^{zx, m} \right) \\ & \left. + b \left(T_{I, K+\frac{1}{2}, L+1}^{zx, m} - T_{I, K+\frac{1}{2}, L}^{zx, m} \right) \right] \\ & + \frac{\Delta t}{\rho_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^A} F_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{x, m} \quad , \end{aligned} \quad (73)$$

kde Δt je časový krok, m je časový index, $a = -1/24$, $b = 9/8$ a

$$\rho^A_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}} = \frac{1}{h^3} \int_{x_{I-\frac{1}{2}}}^{x_{I+\frac{1}{2}}} \int_{y_K}^{y_{K+1}} \int_{z_L}^{z_{L+1}} \rho \, dx \, dy \, dz \quad .$$

Nech $U^m_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}$, $V^m_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}$, $W^m_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}$ sú diskrétné aproximácie zložiek posunutia

U, V, W v bodoch siete a v časovej hladine m . Nech $X^{\eta_j, m+\frac{1}{2}}_{j; I, K, L}$ je diskrétna aproximácia anelastickej funkcie $\xi_j^{\eta_j}$ v sieťovom bode I, K, L a v časovej hladine $m + \frac{1}{2}$. Pre rovnicu (67) môžeme potom napísať konečno-diferenčnú aproximáciu v tvare

$$\begin{aligned} T^{xx, m}_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}} = & \frac{1}{h} \left\{ \left(\kappa^H_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}} + \frac{4}{3} \mu^H_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}} \right) \right. \\ & \left[a \left(U^m_{I+2, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}} - U^m_{I-1, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}} \right) \right. \\ & \left. + b \left(U^m_{I+1, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}} - U^m_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}} \right) \right] \\ & + \left(\kappa^H_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}} - \frac{2}{3} \mu^H_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}} \right) \\ & \left[a \left(V^m_{I+\frac{1}{2}, K+2, L+\frac{1}{2}} - V^m_{I+\frac{1}{2}, K-1, L+\frac{1}{2}} \right) \right. \\ & \left. + b \left(V^m_{I+\frac{1}{2}, K+1, L+\frac{1}{2}} - V^m_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}} \right) \right] \\ & + a \left(W^m_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+2} - W^m_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L-1} \right) \\ & \left. + b \left(W^m_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+1} - W^m_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L} \right) \right] \Big\} \\ & - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \left(X^{xx, m-\frac{1}{2}}_{j; I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}} + X^{xx, m+\frac{1}{2}}_{j; I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}} \right) \end{aligned} \quad (74)$$

kde

$$\kappa^H_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}} = \left[\frac{1}{h^3} \int_{x_I}^{x_{I+1}} \int_{y_K}^{y_{K+1}} \int_{z_L}^{z_{L+1}} \frac{1}{\kappa} \, dx \, dy \, dz \right]^{-1}$$

a

$$\mu_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H = \left[\frac{1}{h^3} \int_{x_I}^{x_{I+1}} \int_{y_K}^{y_{K+1}} \int_{z_L}^{z_{L+1}} \frac{1}{\mu} dx dy dz \right]^{-1} .$$

V rovnici (74) sme použili aproximáciu

$$X_{j;I,K,L}^{\eta\gamma,m} = \frac{1}{2} \left(X_{j;I,K,L}^{\eta\gamma,m-\frac{1}{2}} + X_{j;I,K,L}^{\eta\gamma,m+\frac{1}{2}} \right) . \quad (75)$$

Aproximáciu (75) použijeme aj v prípade rovnice (68)

$$\begin{aligned} X_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{xx,j,m+\frac{1}{2}} &= \frac{2 - \omega_j \Delta t}{2 + \omega_j \Delta t} X_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{xx,j,m-\frac{1}{2}} + \frac{2\omega_j \Delta t}{2 + \omega_j \Delta t} \times \\ &\frac{1}{h} \left\{ \left(K_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j + \frac{4}{3} M_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j \right) \right. \\ &\left[a \left(U_{I+2, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I-1, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right. \\ &+ b \left(U_{I+1, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m \right) \left. \right] \\ &+ \left(K_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j - \frac{2}{3} M_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j \right) \\ &\left[a \left(V_{I+\frac{1}{2}, K+2, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I+\frac{1}{2}, K-1, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right. \\ &+ b \left(V_{I+\frac{1}{2}, K+1, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^m \right) \\ &+ a \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+2}^m - W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L-1}^m \right) \\ &\left. \left. + b \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+1}^m - W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^m \right) \right] \right\} , \quad (76) \end{aligned}$$

kde

$$K_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j = \kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \bar{Y}_{j;I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^\kappa$$

a

$$M_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j = \mu_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \bar{Y}_{j;I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^\mu .$$

Pre úplnosť ešte uvedieme konečno-diferenčné aproximácie rovnice (2) pre zložku U vektoru posunutia

$$U_{I,K+\frac{1}{2},L+\frac{1}{2}}^{m+1} = U_{I,K+\frac{1}{2},L+\frac{1}{2}}^m + \Delta t u_{I,K+\frac{1}{2},L+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \quad (77)$$

Analogicky získame konečno-diferenčné aproximácie pre ostatné zložky vektoru posunutia, rýchlosti posunutia a tenzoru napätia. Kompletnú konečno-diferenčnú schému možno nájsť v Prílohe.

3.1.2.4 Schémy pre voľný povrch

Vzhľadom na to, že riešenie problému simulácie voľného povrchu v schémach na striedavo usporiadaných sieťach nie je obsiahnuté v publikovaných prácach, na ktorých sa dizertant podieľal a ani priamo nenadväzuje na tieto práce má táto kapitola iný charakter ako doterajšie kapitoly prezentujúce výpočtovú metódu. V tejto kapitole porovnáme alternatívne prístupy k simulácii rovinného voľného povrchu a nájdeme najlepší prístup.

Je zrejmé, že sú aspoň dve možnosti pre lokalizovanie voľného povrchu vzhľadom na striedavo usporiadanú priestorovú sieť. V prvom prístupe lokalizujeme voľný povrch na horizontálnej sieťovej rovine prechádzajúcej cez pozície W, T_{zx} a T_{zy} . V druhom prístupe voľný povrch koinciduje s horizontálnou sieťovou rovinou prechádzajúcou pozíciami $U, V, T_{xx}, T_{yy}, T_{zz}$ a T_{xy} . Pre stručnosť budeme používať označenie W formulácia pre prvý a H formulácia pre druhý prístup.

Metóda antisymetrického zobrazenia napätia (the stress-imaging technique)

Ako vyplýva z pohybovej rovnice, Hookovho zákona a konečno-diferenčnej aproximácie (72), výpočet zložiek vektoru posunutia a tenzoru napätia na voľnom povrchu a na rovinách $z = h/2$ a $z = h$ vyžaduje hodnoty zložiek vektoru posunutia a tenzoru napätia na sieťových rovinách $z = -h/2$ a $z = -h$, t.j. nad voľným povrchom. Metódu pôvodne navrhnutú Levanderom (1988) pre 2D P-SV schému 4. rádu v rýchlosti a napätí a dobre opísanú Gravesom (1996) pre 3D prípad môžeme nazvať metódou antisymetrického zobrazenia napätia. V princípe, metóda aplikuje explicitné hraničné podmienky na zložky tenzora napätia lokalizované priamo na voľnom povrchu a používa zobrazené hodnoty pre zložky tenzoru napätia nad voľným povrchom za predpokladu ich antisymetrie voči voľnému povrchu. Antisymetria

$$\begin{aligned} \tau_{zx}(-z) &= -\tau_{zx}(z) \\ \tau_{zy}(-z) &= -\tau_{zy}(z) \\ \tau_{zz}(-z) &= -\tau_{zz}(z) \end{aligned} \quad (78)$$

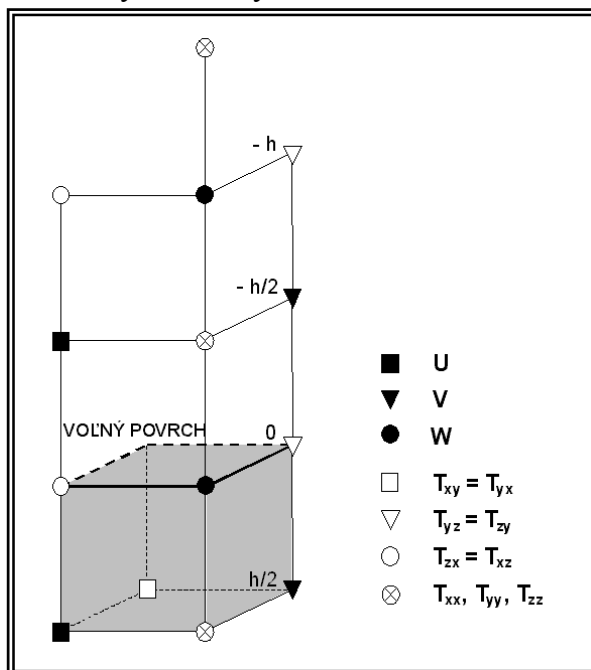
zaručuje, že

$$\tau_{zx}(0) = \tau_{zy}(0) = \tau_{zz}(0) = 0,$$

ako požaduje podmienka (47).

W formulácia

Pozícia voľného povrchu a veličín potrebných nad voľným povrchom je ukázaná na Obr. 4. Explicitná aplikácia okrajových podmienok, zobrazené hodnoty zložiek tenzoru napätia a počítané hodnoty zložiek vektoru posunutia nad voľným povrchom sú sumarizované v Tab. 1. Veličiny, ktoré nie sú uvedené v Tab. 1, sa počítajú rovnako ako v prípade vnútorných sieťových bodov.



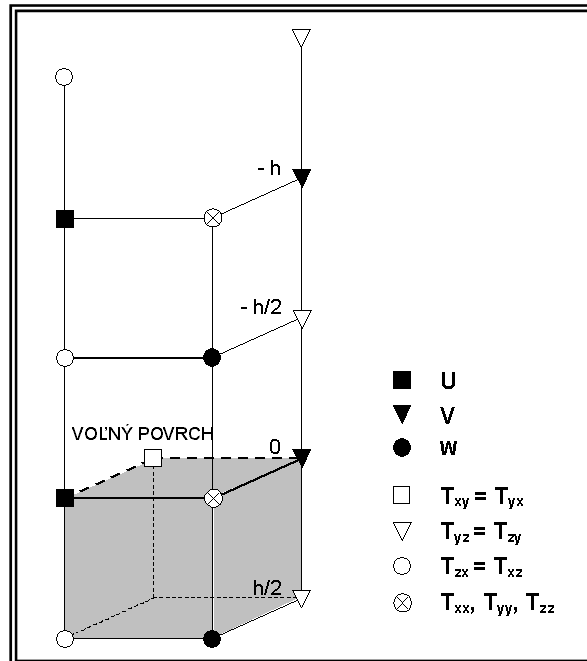
Obr. 4 Pozícia voľného povrchu vo W formulácii

Tab. 1 Sumarizácia W formulácie

Sumarizácia W formulácie	
$T_{zx}(0) = 0,$	$T_{zy}(0) = 0$
$T_{zz}(-h/2) = -T_{zz}(h/2)$	
$T_{zx}(-h) = -T_{zx}(h),$	$T_{zy}(-h) = -T_{zy}(h)$
$T_{zz}(-3h/2) = -T_{zz}(3h/2)$	
$U(-h/2)$ je získaná z aproximácie 2. rádu podmienky $\tau_{zx}(0) = 0$ a Hookovho zákona pre τ_{zx} .	
$V(-h/2)$ je získaná z aproximácie 2. rádu podmienky $\tau_{zy}(0) = 0$ a Hookovho zákona pre τ_{zy} .	
$W(-h)$ je získaná z aproximácie 2. rádu podmienky antisymetrie $\tau_{zz}(-h/2) = -\tau_{zz}(h/2)$ a Hookovho zákona pre τ_{zz} .	

H formulácia

Pozícia voľného povrchu a veličín potrebných nad voľným povrchom je ukázaná na Obr. 5. Analogicky k prípadu W formulácie je H formulácia sumarizovaná v Tab. 2



Obr. 5 Pozícia voľného povrchu v H formulácii

Tab. 2 Sumarizácia H formulácie

Sumarizácia H formulácie

$$T_{zz}(0) = 0$$

$T_{xx}(0)$ je získaná z aproximácie 4. rádu Hookovho zákona pre τ_{xx} , v ktorom je derivácia $w_{,z}$ nahradená deriváciami $u_{,x}$ a $v_{,z}$ podľa podmienky $\tau_{zz}(0) = 0$ a Hookovho zákona pre τ_{zz} .

$T_{yy}(0)$ to isté ako vyššie avšak pre τ_{yy} .

$$T_{zx}(-h/2) = -T_{zx}(h/2), \quad T_{zy}(-h/2) = -T_{zy}(h/2)$$

$$T_{zz}(-h) = -T_{zz}(h)$$

$$T_{zx}(-3h/2) = -T_{zx}(3h/2), \quad T_{zy}(-3h/2) = -T_{zy}(3h/2)$$

$U(0)$ je získané z aproximácie 4. rádu pohybovej rovnice, v ktorej τ_{zx} je získané aj použitím zobrazených hodnôt τ_{zx} .

$V(0)$ to isté ako vyššie avšak s τ_{zy} a τ_{zy} .

$W(-h/2)$ je získané z aproximácie 2. rádu podmienky $\tau_{zz}(0) = 0$ a Hookovho zákona pre τ_{zz} .

$U(-h)$ je získané z aproximácie 2. rádu podmienky antisymetrie $\tau_{zx}(-h/2) = -\tau_{zx}(h/2)$ a Hookovho zákona pre τ_{zx} .

$V(-h)$ to isté ako vyššie avšak s τ_{zy} .

Teoretické porovnanie W a H formulácií

Aj keď je princíp v obidvoch formuláciách rovnaký pohľadom na Tab. 1 a Tab. 2 si môžeme uvedomiť jasné rozdiely, ktoré indikujú možnosť rôznych numerických výsledkov W a H formulácií. Sumarizujme preto zásadné rozdiely v Tab. 3.

Tab. 3 Porovnanie W a H formulácií

Porovnanie W a H formulácií	
<i>W</i> formulácia	<i>H</i> formulácia
<i>Na voľnom povrchu</i>	
2 priamo predpísané zložky tenzoru napätia	1 priamo predpísaná zložka tenzoru napätia
1 zložka posunutia vypočítaná pomocou 2 zobrazených zložiek tenzoru napätia	2 zložky posunutia vypočítané pomocou 4 zobrazených zložiek tenzoru napätia
<i>Potrebné nad voľným povrchom</i>	
4 zobrazené zložky tenzoru napätia	5 zobrazených zložiek tenzoru napätia
3 zložky posunutia vypočítané pomocou schémy 2. rádu	3 zložky posunutia vypočítané pomocou schémy 2. rádu

Je zrejmé, že by bolo vhodné rigorózne teoreticky analyzovať stabilitu a sieťovú disperziu obidvoch formulácií aspoň v homogénnom polpriestore. Takáto analýza je však matematicky veľmi náročná a dosiaľ nebola vykonaná. Preto sme vykonali rozsiahle numerické simulácie a porovnania W a H formulácií.

Numerické porovnanie W a H formulácií

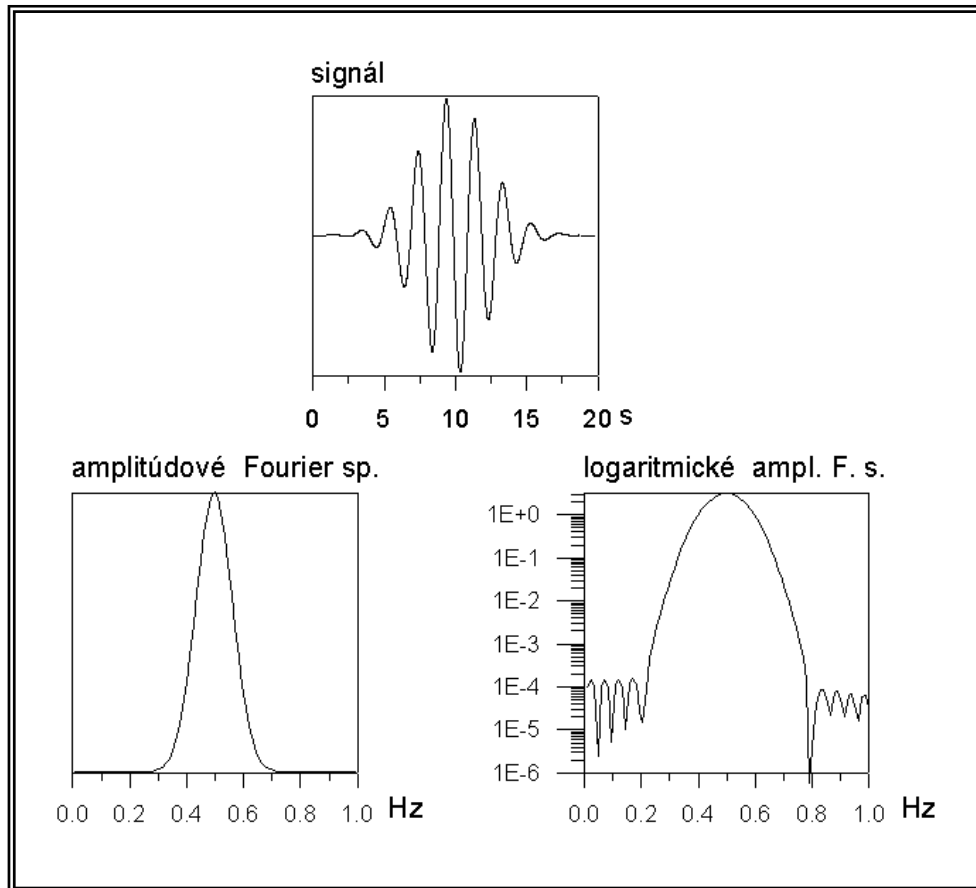
Testovali sme presnosť obidvoch formulácií porovnaním s metódou diskretných vlnových čísel (Bouchon, 1981). Numerické výpočty sme vykonali programom AXITRA (Coutant, 1989).

Model. Dokonale elastický izotropný homogénny polpriestor s rýchlosťou S vln $\beta = 300 \text{ m/s}$, hustotou $\rho = 1500 \text{ kg/m}^3$ a rýchlosťou P vln $\alpha = 520 \text{ m/s}$ alebo $\alpha = 995 \text{ m/s}$. Uvedené hodnoty α zodpovedajú hodnotám Poissonovho pomeru $\sigma = 0.25$ a $\sigma = 0.45$.

Zdroj. Bodový dislokačný zdroj s parametrami $\delta = 90^\circ$ (dip), $\lambda = 0^\circ$ (rake) a $\phi_S = 45^\circ$ (strike) alebo $\phi_S = 0^\circ$. Časová funkcia zdroja zodpovedá rýchlosti posunutia a je daná Gaborovým signálom

$$s(t) = \exp\left\{-\left[\omega(t - t_S)/\gamma\right]^2\right\} \cos[\omega(t - t_S) + \psi] \quad (79)$$

s $\omega = 2\pi f_P$ a $t_S = 0.45 \gamma / f_P$. Pretože v štandardnej teoretickej analýze stability analyzujeme stabilitu a sieťovú disperziu pre harmonický signál, zvolili sme parametre Gaborovho signálu $f_P = 0.5$ Hz, $\gamma = 11$ and $\psi = \pi/2$, ktorý má relatívne úzke spektrum (ukázané na Obr. 6). To znamená, že v zvolenom modeli je dominantná vlnová dĺžka S vlny $\lambda_{dom}^S = 600$ m a minimálna vlnová dĺžka S vlny $\lambda_{min}^S = 400$ m. Relatívne malá hĺbka zdroja, $h_S = 366.6$ m, $h_S/\lambda_{min}^S \doteq 0.9$, bola zvolená preto, aby boli generované silné povrchové vlny.

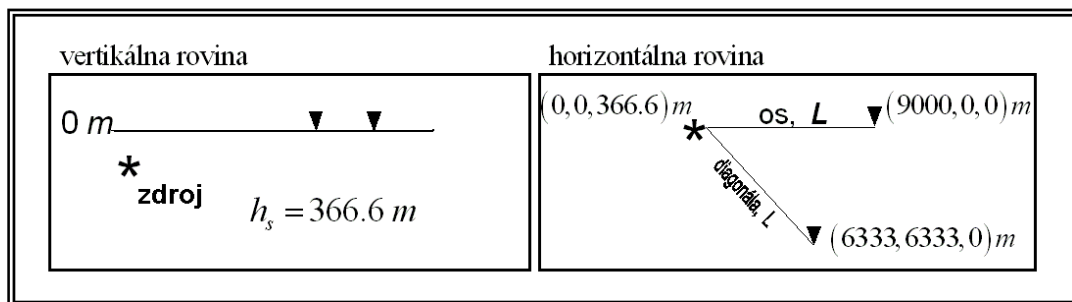


Obr. 6 Časová funkcia zdroja použitá na testovanie schém pre voľný povrch

Poloha prijímačov. Dva a dva prijímače umožňujú porovnanie šírenia vln v smere súradnicovej osi koincidujúcej so sieťovou čiarou so šírením vln v smere horizontálnej rovinnej diagonály. Epicentrálna vzdialenosť prvého a druhého prijímača v oboch smeroch sú $9\lambda_{dom}^S$ a $15\lambda_{dom}^S$. Konfigurácia zdroj – prijímače je schema-

ticky ukázaná na Obr. 7. Pri danej konfigurácii zdroj s $\phi_s = 45^\circ$ generuje silné Rayleighove vlny v smere osi x a SH vlny v smere diagonály. V prípade zdroja s $\phi_s = 0^\circ$ je to naopak.

Zdôraznime, že v každom výpočte metódou diskretných vlnových čísel sme uvažovali tri prijímače, aby sme presne dodržali pozície zložiek vektoru posunutia na striedavo usporiadanej sieti v konečno-diferenčnom výpočte.

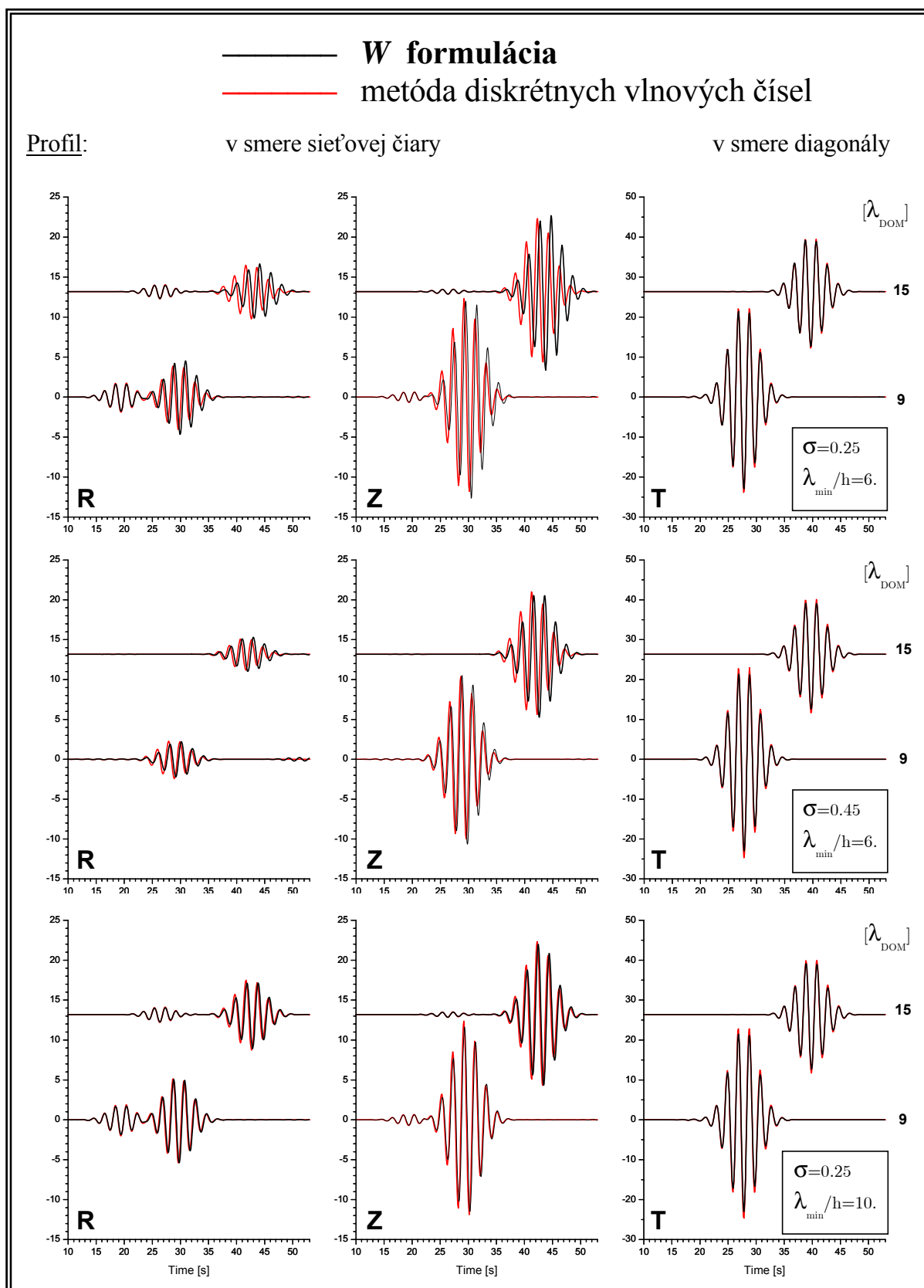


Obr. 7 Schematická konfigurácia zdroj – prijímače

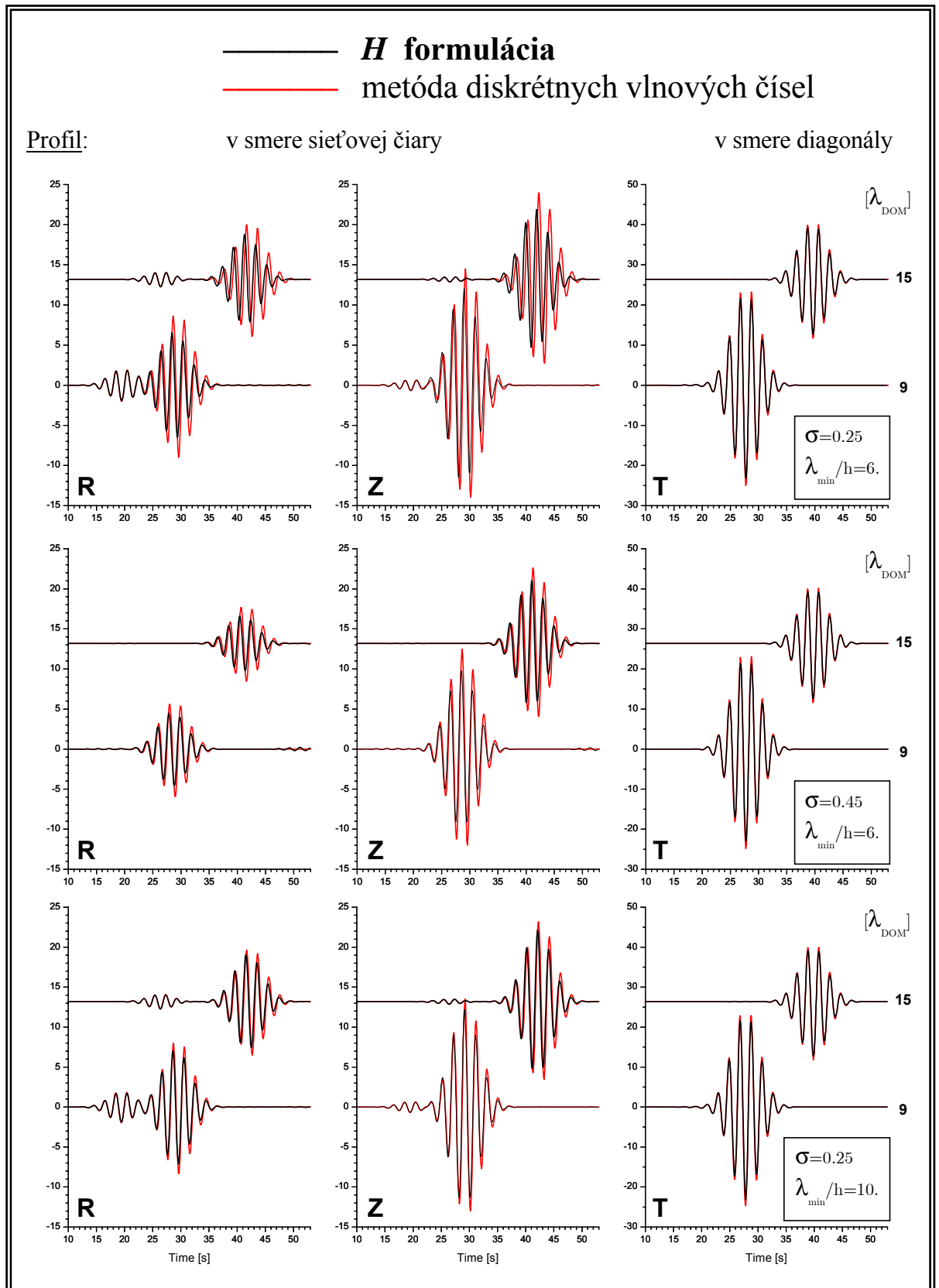
Výsledky. Časť numerických výsledkov je ukázaná na Obr. 8 a Obr. 9. Obr. 8 ukazuje syntetické seizmogramy vypočítané W formuláciou a seizmogramy vypočítané metódou diskretných vlnových čísel. Seizmogramy sú ukázané pre zdroj s $\phi_s = 45^\circ$, $\delta = 90^\circ$ a $\lambda = 0^\circ$, ktorý generuje silné Rayleighove vlny v smere osi x a SH vlny v smere horizontálnej diagonály. (Prípád s $\phi_s = 0^\circ$, $\delta = 90^\circ$ a $\lambda = 0^\circ$ bol tiež vypočítaný, nie je tu však ukázaný.) Horná a stredná časť obrázka ukazuje seizmogramy pre Poissonove pomery $\sigma = 0.25$ a $\sigma = 0.45$, obidve pre vzorkovací krok $\lambda_{\min}/h = 6$. Spodná časť ukazuje prípad so $\sigma = 0.25$ a $\lambda_{\min}/h = 10$. Obr. 9 ukazuje analogické výsledky pre H formuláciu.

Analýza všetkých vykonaných numerických výpočtov vedie k nasledovným záverom pre vzorkovací krok $\lambda_{\min}/h = 6$:

1. Šírenie P a SH vln je simulované dostatočne presne aj W aj H formuláciou.
2. Kým W formulácia spôsobuje oneskorenie Rayleighových vln, H formulácia spôsobuje skorší príchod Rayleighových vln.
3. W formulácia dáva lepšie amplitúdy Rayleighových vln.
4. Šírenie v smere sieťovej čiary je blízke šíreniu v smere diagonály.
5. Presnosť obidvoch formulácií temer nezávisí od Poissonovho pomeru.



Obr. 8 Syntetické seizmogramy vypočítané *W* formuláciou a metódou diskretných vlnových čísel



Obr. 9 Syntetické seizmogramy vypočítané *H* formuláciou a metódou diskretných vlnových čísel

Hlavné závery zo všetkých výpočtov pre vzorkovacie kroky $\lambda_{\min}/h = 6$ a $\lambda_{\min}/h = 10$ sú nasledovné:

- a) Najmenej 10 sieťových krokov na vlnovú dĺžku (t.j. $\lambda_{\min}/h = 10$) je potrebných na to, aby obidve formulácie s dostatočnou presnosťou simulovali šírenie Rayleighových vln.
- b) Ak $\lambda_{\min}/h = 10$, W formulácia je trochu lepšia ako H formulácia. W formulácia dáva výsledky blízke výsledkom metódy diskrétnych vlnových čísel.

Dôsledok uvedených záverov je zrejmý. Aplikácia každej formulácie vyžaduje najmenej 10 sieťových krokov na minimálnu vlnovú dĺžku, čo je o dosť viac ako 6 sieťových krokov na minimálnu vlnovú dĺžku, ktoré sú dostatočné v prípade aplikácie schém 4. rádu v neobmedzenom prostredí. To by však významne znížilo efektívnosť modelovania schémami 4. rádu. Preto by bolo vhodné nájsť metódu, ktorá by bola dostatočne presná aj pri 6 sieťových krokoch na minimálnu vlnovú dĺžku.

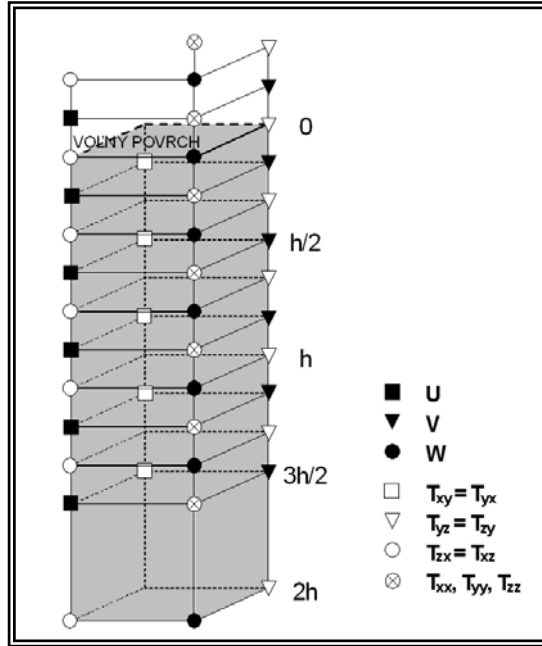
*W formulácia s vertikálne zjemnenou sieťou
(W-VRG)*

Rodrigues (1993) použil sieť, ktorá bola zjemnená vo vertikálnom smere a len do hĺbky nutnej pre jeho schému 8. rádu v rýchlosti a napätí. V jeho modelovaní boli normálové zložky tenzoru napätia lokalizované na voľnom povrchu, čo zodpovedá lokalizácii v H formulácii. Keďže sme numerickými testami zistili, že W formulácia je lepšia ako H formulácia, kombinujeme Rodriguesovu ideu s W formuláciou.

Princíp W -VRG metódy je nasledovný:

- a. antisymetrické zobrazovanie napätia ako vo W formulácii,
- b. sieť zjemnená vo vertikálnom smere v minimálne potrebnom páse pozdĺž voľného povrchu,
- c. adjustované konečno-diferenčné aproximácie z -ových derivácií v sieťových bodoch pri a na dolnej hranici zjemnenej siete.

Metódu W -VRG ilustruje Obr. 10. Okrem horizontálnych sieťových rovín v hĺbkach $h/2$, h a $3h/2$ (pravidelnej siete), je 6 nových horizontálnych sieťových rovín v hĺbkach $h/6$, $h/3$, $2h/3$, $5h/6$, $7h/6$ a $4h/3$. Ako časť zjemnenej siete sú nad voľným povrchom virtuálne horizontálne sieťové roviny lokalizované s vertikálnym sieťovým polkrokom $h/3$. z -ové derivácie sú aproximované vzorcom (72) v hĺbkach $3h/2$, $2h$, atď. z -ové derivácie v hĺbkach $z_0 = 0$, $h/6$, $h/3$, $h/2$, $2h/3$, $5h/6$ a h sú aproximované vzorcom 4. rádu



Obr. 10 Pozícia voľného povrchu v metóde *W-VRG*

$$\varphi_{,z}(z_0) = \frac{1}{h} \left\{ a_1 \left[\varphi \left(z_0 + \frac{1}{2}h \right) - \varphi \left(z_0 - \frac{1}{2}h \right) \right] + b_1 \left[\varphi \left(z_0 + \frac{1}{6}h \right) - \varphi \left(z_0 - \frac{1}{6}h \right) \right] \right\} \quad (80)$$

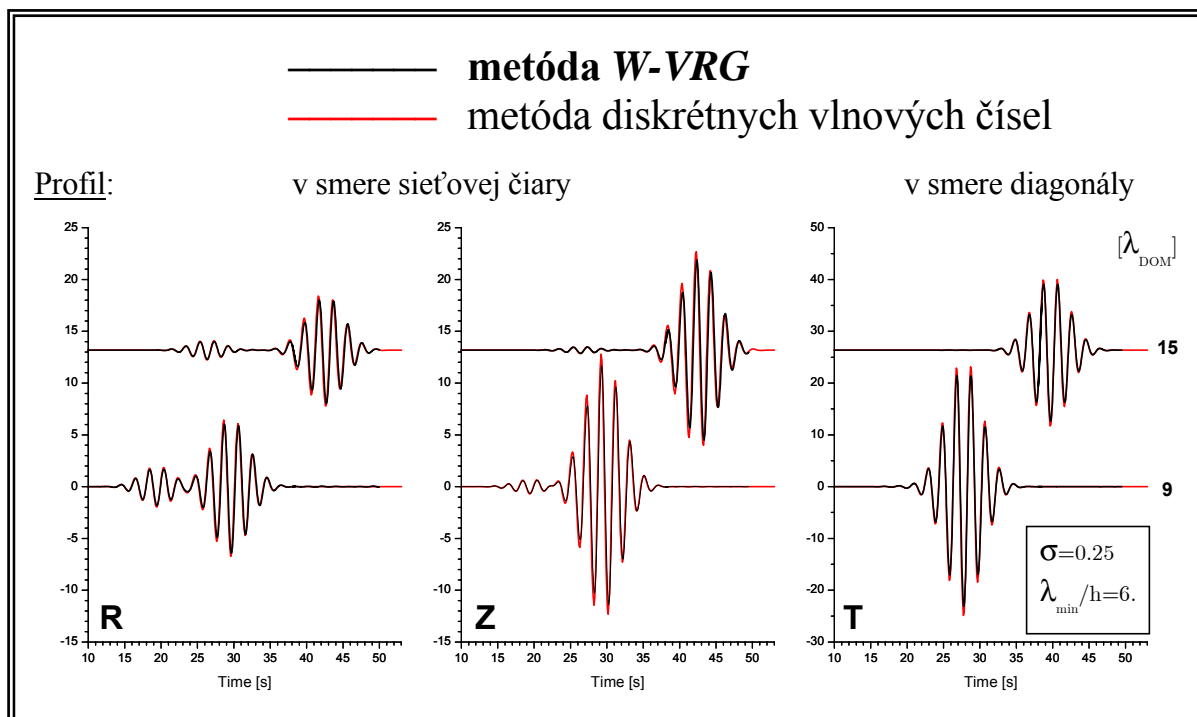
s $a_1 = -1/8$ a $b_1 = 27/8$, ktorý dostaneme so vzorca (72) po nahradení kroku h krokom $h/3$. z -ové derivácie v hĺbke $z_0 = 7h/6$ sú aproximované vzorcom 4. rádu

$$\varphi_{,z}(z_0) = \frac{1}{h} \left\{ a_2 \left[\varphi \left(z_0 + \frac{5}{6}h \right) - \varphi \left(z_0 - \frac{5}{6}h \right) \right] + b_2 \left[\varphi \left(z_0 + \frac{1}{3}h \right) - \varphi \left(z_0 - \frac{1}{3}h \right) \right] \right\} \quad (81)$$

s $a_2 = -1/120$ a $b_2 = 25/24$. z -ové derivácie v hĺbke $z_0 = 4h/3$ sú aproximované vzorcom 4. rádu

$$\varphi_{,z}(z_0) = \frac{1}{h} \left\{ a_3 \left[\varphi \left(z_0 + \frac{2}{3}h \right) - \varphi \left(z_0 - \frac{2}{3}h \right) \right] + b_3 \left[\varphi \left(z_0 + \frac{1}{6}h \right) - \varphi \left(z_0 - \frac{1}{6}h \right) \right] \right\} \quad (82)$$

s $a_3 = -1/336$ a $b_3 = 49/48$.



Obr. 11 Syntetické seizmogramy vypočítané metódou *W-VRG* a metódou diskretných vlnových čísel

Obr. 11 ukazuje syntetické seizmogramy vypočítané metódou *W-VRG* a seizmogramy vypočítané metódou diskretných vlnových čísel (porovnaj s vrchnou časťou Obr. 8 a Obr. 9). Je zrejme z týchto a iných výpočtov (tu neukázaných), že metóda *W-VRG* so vzorkovaním 6 krokov na minimálnu vlnovú dĺžku dáva výsledky veľmi blízke výsledkom metódy diskretných vlnových čísel.

W formulácia s adjustovanými konečno-diferenčnými aproximáciami
(*W-AFDA*)

Povrch s nulovým napätím môže byť v schéme na striedavo usporiadanej sieti simulovaný alternatívne – bez zobrazovania zložiek tenzoru napätia nad voľný povrch. Princíp našej metódy, s lokalizáciou *W* zložky posunutia na voľnom povrchu, je nasledovný:

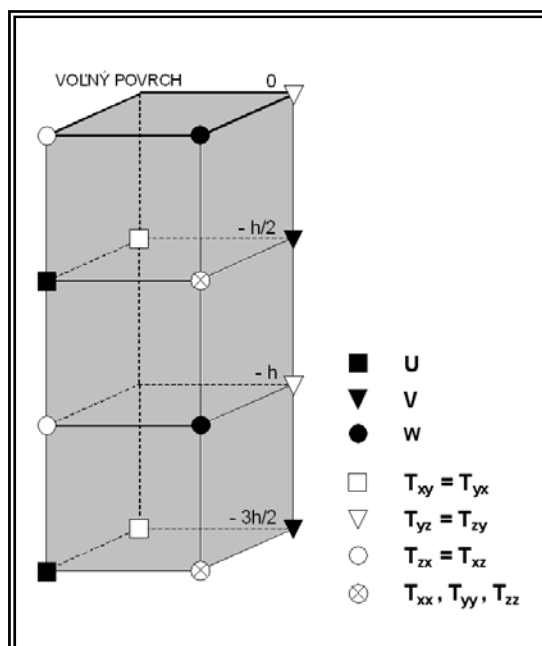
- priamo predpísané nulové hodnoty τ_{zx} a τ_{zy} na voľnom povrchu,
- žiadne antisymetrické zobrazovanie zložiek tenzoru napätia, t.j. žiadne virtuálne zložky tenzoru napätia a vektoru posunutia nad voľným povrchom,
- adjustované konečno-diferenčné aproximácie *z*-ových derivácií v sieťových bodoch na a pod voľným povrchom.

Ilustrácia metódy je na Obr. 12. Výpočet zložiek tenzoru napätia a vekturu posunutia na voľnom povrchu a v hĺbkach $h/2$ a h je sumarizovaný v Tab. 4. Vzorce pre konečno-diferenčné aproximácie z-ových derivácií sú uvedené v Tab. 5.

Tab. 4 Sumarizácia metódy *W-AFDA*

Sumarizácia metódy <i>W-AFDA</i>	
$T_{zx}(0) = 0,$	$T_{zy}(0) = 0$
$T_{xx}(h/2)$	je získaná z aproximácie 4. rádu Hookovho zákona pre τ_{xx} ; derivácia $w_{,z}$ je aproximovaná vzťahom č.2.
$T_{yy}(h/2)$ a $T_{zz}(h/2)$	– podobne ako $T_{xx}(h/2)$
$T_{zx}(h)$	je získaná z aproximácie 4. rádu Hookovho zákona pre τ_{zx} ; derivácia $u_{,z}$ je aproximovaná vzťahom č.3, v ktorom je $u_{,z}(0)$ nahradené $w_{,x}$ podľa podmienky $\tau_{zx}(0) = 0$.
$T_{zy}(h)$	je získaná z aproximácie 4. rádu Hookovho zákona pre τ_{zy} ; derivácia $v_{,z}$ je aproximovaná vzťahom č.3, v ktorom je $v_{,z}(0)$ nahradené $w_{,y}$ podľa podmienky $\tau_{zy}(0) = 0$.
$W(0)$	je získaná z aproximácie 4. rádu pohybovej rovnice pre w ; derivácia $\tau_{zz,z}$ je aproximovaná vzťahom č.1, v ktorom je použitá podmienka $\tau_{zz}(0) = 0$.
$U(h/2)$	je získaná z aproximácie 4. rádu pohybovej rovnice pre u ; derivácia $\tau_{zx,z}$ je aproximovaná vzťahom č.2.
$V(h/2)$	je získaná z aproximácie 4. rádu pohybovej rovnice pre v ; derivácia $\tau_{zy,z}$ je aproximovaná vzťahom č.2.
$W(h)$	je získaná z aproximácie 4. rádu pohybovej rovnice pre w ; derivácia $\tau_{zz,z}$ je aproximovaná vzťahom č.4, v ktorom je použitá podmienka $\tau_{zz}(0) = 0$.

Obr. 13 ukazuje syntetické seizmogramy vypočítané metódou *W-AFDA* a seizmogramy vypočítané metódou diskretných vlnových čísel (porovnaj s vrchnou časťou Obr. 8 a Obr. 9 a s Obr. 11). Aj pre ostatné konfigurácie modelu použité pri porovnaníach W a H formulácií boli vypočítané seizmogramy (tu neukázané). Metóda *W-AFDA* so vzorkovaním 6 krokov na minimálnu vlnovú dĺžku dáva výsledky veľmi blízke výsledkom metódy diskretných vlnových čísel a výsledkom vypočítaným metódou *W-VRG*.



Obr. 12 Pozícia voľného povrchu v metóde *W-AFDA*

Tab. 5 Konečno-diferenčné aproximácie použité v metóde *W-AFDA*

Konečno-diferenčné aproximácie použité v metóde *W-AFDA*

vzorec č. 1

$$\varphi_{,z}(z_0) = \frac{1}{h} \left[-\frac{352}{105} \varphi(z_0) + \frac{35}{8} \varphi\left(z_0 + \frac{h}{2}\right) - \frac{35}{24} \varphi\left(z_0 + \frac{3}{2}h\right) + \frac{21}{40} \varphi\left(z_0 + \frac{5}{2}h\right) - \frac{5}{56} \varphi\left(z_0 + \frac{7}{2}h\right) \right] + O(h^4)$$

vzorec č. 2

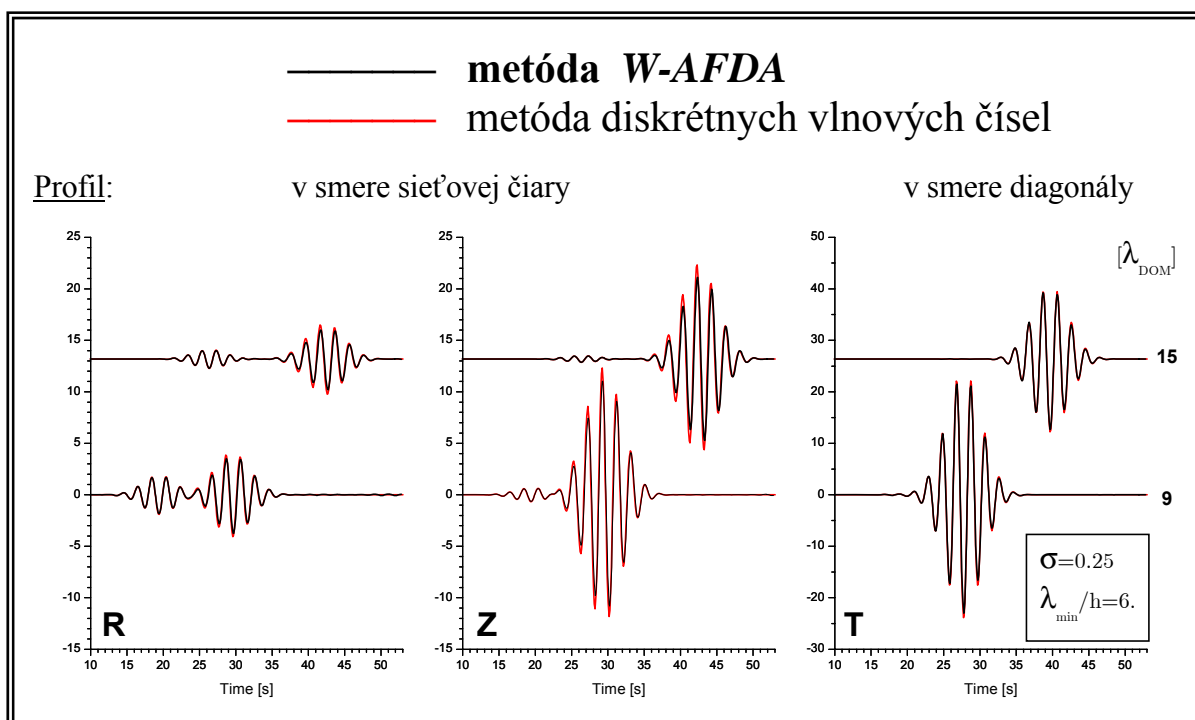
$$\varphi_{,z}(z_0) = \frac{1}{h} \left[-\frac{11}{12} \varphi\left(z_0 - \frac{h}{2}\right) + \frac{17}{24} \varphi\left(z_0 + \frac{h}{2}\right) + \frac{3}{8} \varphi\left(z_0 + \frac{3}{2}h\right) - \frac{5}{24} \varphi\left(z_0 + \frac{5}{2}h\right) + \frac{1}{24} \varphi\left(z_0 + \frac{7}{2}h\right) \right] + O(h^4)$$

vzorec č. 3

$$\varphi_{,z}(z_0) = \frac{1}{h} \left[-\frac{h}{22} \varphi_{,z}(z_0 - h) - \frac{577}{528} \varphi\left(z_0 - \frac{h}{2}\right) + \frac{201}{176} \varphi\left(z_0 + \frac{h}{2}\right) - \frac{9}{176} \varphi\left(z_0 + \frac{3}{2}h\right) + \frac{1}{528} \varphi\left(z_0 + \frac{5}{2}h\right) \right] + O(h^4)$$

vzorec č. 4

$$\varphi_{,z}(z_0) = \frac{1}{h} \left[\frac{16}{105} \varphi(z_0 - h) - \frac{31}{24} \varphi\left(z_0 - \frac{h}{2}\right) + \frac{29}{24} \varphi\left(z_0 + \frac{h}{2}\right) - \frac{3}{40} \varphi\left(z_0 + \frac{3}{2}h\right) + \frac{1}{168} \varphi\left(z_0 + \frac{5}{2}h\right) \right] + O(h^4)$$



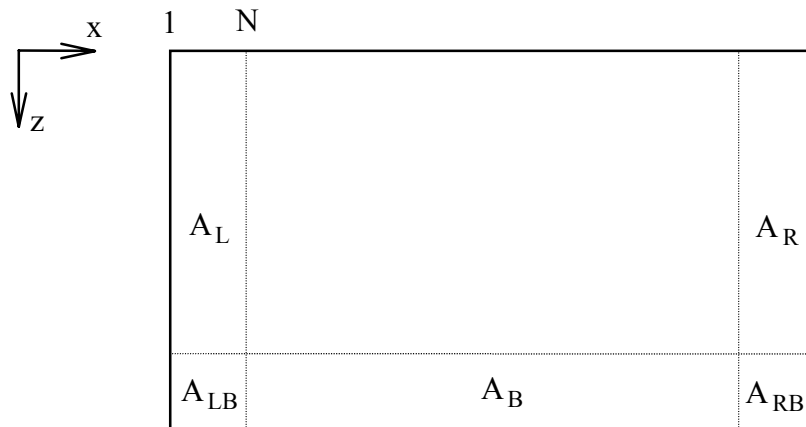
Obr. 13 Syntetické seizmogramy vypočítané metódou *W-AFDA* a metódou diskretných vlnových čísel

3.1.2.5 Schémy pre neodrážajúce hranice

Priestorová konečno-diferenčná sieť je ohraničená umelými hranicami. V ideálnom prípade by tieto hranice mali byť úplne transparentné pre ľubovoľnú vlnu dopadajúcu na hranicu. V skutočnosti transparentnosť môžeme len aproximovať. Na simuláciu transparentných hraníc bolo vyvinutých veľa metód, no žiadna nie je univerzálne použiteľná na ľubovoľnú kombináciu materiálového prostredia a seizmického vlnového poľa pretože aspoň pre nejaké konfigurácie je nepresná alebo nestabilná. Pri numerických výpočtoch seizmických vlnových polí je preto potrebné vždy otestovať niekoľko rôznych simulácií a vybrať tú najvhodnejšiu.

V tejto kapitole budeme približne sledovať výklad v učebnom texte Moczu (1998), ktorý doplníme o nové druhy neodrážajúcich hraníc.

Existujú dva hlavné prístupy k riešeniu problému umelých hraníc a to *absorbujúce* a *neodrážajúce hranice*. Prvým prístupom je vytvorenie umelej hranice ako absorbčnej zóny. Je to napríklad umelá útlmová zóna navrhnutá v práci Cerjan et al. (1985). Ide o jednoduchý spôsob, v ktorom je na obvode priestorovej výpočtovej siete definovaná hraničná zóna A (Obr. 14). Zóna je definovaná počtom sieťových riadkov/rovín N a útlmovou funkciou $A(i)$. Hodnoty posunutia alebo rýchlosti posunutia odpovedajúce aktualizovanej aj predchádzajúcej časovej hladine sú po každom časovom kroku redukované (násobené funkciou $A(i)$).



Obr. 14 Umelá útlmová zóna A pozostávajúca z pásu N sieťových riadkov/rovín

V prácach Korn a Stöckl (1982) a Sochacki et al. (1987) je použitý odlišný typ hraničnej zóny, založený na zahrnutí útlmového člena do pohybovej rovnice. Vo všetkých týchto prípadoch je však potrebné adjustovať určité voľné parametre od prípadu k prípadu. Nezanedbateľné sú aj väčšie výpočtové nároky spojené s rozšírením siete o hraničnú zónu.

Takmer bez zmeny výpočtových nárokov je druhý prístup tzv. *neodrážajúcich hraníc*. Zvyčajne ide o aplikovanie paraxiálnej (jednosmernej) vlnovej rovnice na hranicu siete. Takáto rovnica popisuje šírenie energie len v limitovanom rozsahu uhlov. Príkladom *paraxiálnej rovnice prvého rádu* je rovnica šírenia SH vlny v smere osi x

$$\frac{1}{\beta} \dot{V} + V_{,x} = 0 \quad ,$$

kde β je rýchlosť šírenia S vln a V je y -ová zložka vektoru posunutia. Príkladom *paraxiálnej rovnice druhého rádu* je

$$\frac{1}{\beta} \ddot{V} + \dot{V}_{,x} - \frac{\beta}{2} V_{,zz} = 0 \quad .$$

Paraxiálne rovnice sú nahradené konečno-diferenčnými schémami a potom aplikované na hranice konečno-diferenčnej siete tak, že zložky posunutia polarizované v rovine hranice sú aktualizované konečno-diferenčnou schémou odvodenou z paraxiálnej vlnovej rovnice S vln a zložka posunutia kolmá na rovinu hranice schémou odvodenou z paraxiálnej vlnovej rovnice pre P vlnu. Tento prístup prvý krát použili Clayton a Engquist (1977) a potom napr. Fuyuki a Matsumoto (1980), Emerman a Stephen (1983) a Stacey (1988).

Emerman a Stephen (1983) ukázali, že Claytonova - Engquistova aproximácia je nestabilná pre pomer rýchlostí priečných a pozdĺžnych vln $\beta/\alpha < 0.46$. Stacey (1988) ukázal, že jeho aproximácia je stabilná pre $\alpha/\beta < 2.2$. Emerman a Stephen

(1983) navrhli modifikáciu aproximácie Claytona a Engquista (1977) , ktorá je stabilná pre všetky $\beta/\alpha > 0$.

Neodrážajúce hranice odvodené z požiadavky minimalizácie koeficientov odrazu na hraniciach siete môžeme nájsť v prácach Reynolds (1978), Peng a Toksöz (1994, 1995).

Higdon (1991) odvodil aproximáciu neodrážajúcej hraničnej podmienky, ktorá je založená na kompozícii jednoduchých diferenciálnych operátorov prvého rádu. Každý operátor odpovedá paraxiálnej rovnici prvého rádu pre rovinnú vlnu dopadajúcu určitou rýchlosťou a pod určitým uhlom na hranicu. Konečno-diferenčnú schému simulujúcu neodrážajúcu hraničnú podmienku získal aproximovaním operátora

$$\left[\left(\cos \theta_p \frac{\partial}{\partial t} - \alpha \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \left[\left(\cos \theta_s \frac{\partial}{\partial t} - \beta \frac{\partial}{\partial x} \right) \right]$$

aplikovaného na každú zložku posunutia. Tu θ_p a α (θ_s a β) sú uhol dopadu P vlny a rýchlosť šírenia P vlny (uhol dopadu S vlny a rýchlosť šírenia S vlny).

Nevýhodou neodrážajúcich hraníc v porovnaní s absorbujúcimi je ich citlivosť na uhol a rýchlosť dopadajúcej vlny. Túto nevýhodu je možné potlačiť kombináciou viacerých aproximácií a formulácií paraxiálnej rovnice. Takto Liu a Archuleta (2000) skombinovali jednoduchú aproximáciu A1 Claytona a Engquista (1977) s jedným diferenciálnym operátorom Higdon (1991), pričom Claytonov-Engquistovu hraničnú podmienku použili pre P-vlny a Higdonov operátor pre S vlny. Celú podmienku potom aplikovali na každú zložku rýchlosti.

Aproximáciu neodrážajúcich hraníc navrhnutú Liuom a Archuletom sme modifikovali tak, že sme použili presnejšiu aproximáciu Claytonovej-Engquistovej podmienky A1. Tým sme v niektorých prípadoch dosiahli slabšie odrazy od umelých hraníc siete.

Rôzne aproximácie neodrážajúcich hraníc možno jednotne reprezentovať. Uvažujme napr. ľavú hranicu. Hodnota rýchlosti posunutia u_{1KL}^{m+1} môže byť vypočítaná podľa aproximácie

$$\begin{aligned} u_{1KL}^{m+1} = & A_{01} u_{2KL}^{m+1} + A_{02} u_{3KL}^{m+1} \\ & + A_{10} u_{1KL}^m + A_{11} u_{2KL}^m + A_{12} u_{3KL}^m \\ & + A_{20} u_{1KL}^{m-1} + A_{21} u_{2KL}^{m-1} + A_{22} u_{3KL}^{m-1} \quad , \end{aligned} \quad (83)$$

kde koeficienty A_{pq} ; $p, q \in \{0, 1, 2\}$ sú dané v Tab. 6. V tabuľke je $i \in \{1, 2\}$, pričom $i = 1$ pre zložku rýchlosti posunutia kolmú na rovinu hranice a $i = 2$ pre zložky rýchlosti posunutia ležiace v rovine hranice a

$$\begin{aligned}
q_{01} &= \frac{\nu_1 - b(1 + \nu_1)}{(1 - b)(1 + \nu_1)} \quad , & r_{01} &= \frac{\nu_2 - b(1 + \nu_2)}{(1 - b)(1 + \nu_2)} \quad , \\
q_{10} &= \frac{1 - b(1 + \nu_1)}{(1 - b)(1 + \nu_1)} \quad , & r_{10} &= \frac{1 - b(1 + \nu_2)}{(1 - b)(1 + \nu_2)} \quad , \\
q_{11} &= \frac{b}{1 - b} \quad , & r_{11} &= \frac{b}{1 - b} \quad ,
\end{aligned}$$

kde $\nu_1 = \alpha\Delta t/h$, α je rýchlosť šírenia P vln, $\nu_2 = \beta\Delta t/h$, β je rýchlosť šírenia S vln, Δt je časový krok, h je sieťový krok a b je váhový koeficient. Koeficienty $c_{pq} = A_{pq}$, $pq \in \{0,1\}$ pre jednoduchú aproximáciu A1 Claytona a Engquista (1977) a $\tilde{c}_{pq} = A_{pq}$, $pq \in \{0,1\}$ pre presnejšiu aproximáciu A1 Claytona a Engquista (1977).

Tab. 6 Koeficienty neodrážajúcej hraničnej podmienky (83)

	A_{01}	A_{10}	A_{11}	A_{02}	A_{20}	A_{12}	A_{21}	A_{22}
Clayton a Engquist (A1, jednoduchá), 1977	0	$1 - \nu_i$	ν_i	0	0	0	0	0
Clayton a Engquist (A1, presnejšia), 1977	$-\frac{1 - \nu_i}{1 + \nu_i}$	$\frac{1 - \nu_i}{1 + \nu_i}$	1	0	0	0	0	0
Reynolds, 1978	0	$1 - \nu_i$	$1 + \nu_i$	0	0	0	$-1 - \nu_i$	ν_i
Emerman a Stephen, 1983	$-\frac{1 - \nu_i}{1 + \nu_i}$	$\frac{2}{1 + \nu_i}$	$\frac{2}{1 + \nu_i}$	0	$-\frac{1 - \nu_i}{1 + \nu_i}$	0	-1	0
Peng a Toksöz, 1995	Vzťahy sú príliš zložité, podprogram na výpočet koeficientov, napísaný Ch. Pengom pod názvom OptAbsBc, je možné nájsť v Prílohe na CD ROM.							
Higdon, 1991	$q_{01} + r_{01}$	$q_{10} + r_{10}$	$q_{11} + r_{11}$ $-q_{01}r_{10}$ $-q_{10}r_{01}$	$-q_{01}r_{01}$	$-q_{10}r_{10}$	$-q_{01}r_{11}$ $-r_{01}q_{11}$	$-q_{10}r_{11}$ $-r_{10}q_{11}$	$-q_{11}r_{11}$
Liu a Archuleta, 2001	$c_{01} + r_{01}$	$c_{10} + r_{10}$	$c_{11} + r_{11}$ $-c_{01}r_{10}$ $-c_{10}r_{01}$	$-c_{01}r_{01}$	$-c_{10}r_{10}$	$-c_{01}r_{11}$ $-c_{01}q_{11}$	$-c_{10}r_{11}$ $-c_{10}q_{11}$	$-c_{11}r_{11}$
Liu a Archuleta, modifikovaná	$\tilde{c}_{01} + r_{01}$	$\tilde{c}_{10} + r_{10}$	$\tilde{c}_{11} + r_{11}$ $-\tilde{c}_{01}r_{10}$ $-\tilde{c}_{10}r_{01}$	$-\tilde{c}_{01}r_{01}$	$-\tilde{c}_{10}r_{10}$	$-\tilde{c}_{01}r_{11}$ $-\tilde{c}_{01}q_{11}$	$-\tilde{c}_{10}r_{11}$ $-\tilde{c}_{10}q_{11}$	$-\tilde{c}_{11}r_{11}$

Podľa formulácie pohybovej rovnice, z ktorej bola odvodená konečno-diferenčná schéma, sa aproximačný vzorec neodrážajúcej hraničnej podmienky (83) aplikuje na zložky posunutia alebo na zložky rýchlosti posunutia. V našej konečno-diferenčnej schéme (formulácia pohybovej rovnice v posunutí, rýchlosti a napätí) aplikujeme vzorec (83) na zložky rýchlosti posunutia.

V prípade konvenčnej konečno-diferenčnej siete je potrebné odvodiť špeciálne aproximácie pre hrany a rohy siete. V striedavo usporiadanej sieti tento problém odpadá.

3.1.3 Simulácia seizmického zdroja

Vzhľadom na to, že v zostavenom výpočtovom programe DVS5.0 sme zahrnuli možnosť ľubovoľného bodového dislokačného zdroja a tiež kinetické modelovanie zlomového procesu na ploche konečných rozmerov, zaradili sme pre úplnosť do prezentácie výpočtovej metódy aj simuláciu seizmického zdroja. Budeme pritom sledovať vzhľad v učebnom texte Moczu (1998).

Modelovanie seizmického zdroja delíme na *kinematické* a *dynamické*. Pri dynamickom modelovaní seizmického zdroja predpokladáme určité rozloženie poľa napätia na zlomovej ploche tesne pred vznikom zemetrasenia. V priebehu výpočtu simulujeme šírenie trhliny priamo porovnávaním napätia a medze pevnosti materiálu na zlome. Pri kinematickom modelovaní seizmického zdroja modelujeme šírenie trhliny veľkým počtom bodových dislokačných zdrojov, ktoré vyžarujú vo vopred definovaných časoch a s vopred definovanou časovou funkciou. Takto teda nemôžeme postihnúť interakciu zlomového procesu s vyžiareným vlnovým poľom. V tejto práci sa venujeme len kinematickému modelovaniu, ktoré je omnoho jednoduchšie ako dynamické. Základom kinematického modelovania seizmického zdroja sú nasledujúce vzťahy.

Vychádzajme z **reprezentačnej teóremy**

$$U_n(\vec{x}, t) = \iint_{\Sigma} m_{pq} * G_{np,q} d\Sigma \quad ,$$

kde U_n je zložka vektoru posunutia a *tenzor hustoty momentu* m_{pq} je definovaný vzťahom

$$m_{pq}(\vec{\xi}, t) = c_{pqrs}(\vec{\xi}) [u_r(\vec{\xi}, t)] \nu_s(\vec{\xi}) \quad ,$$

kde $\vec{\xi}$ špecifikuje pozíciu na *zlomovej ploche* Σ , c_{pqrs} je *tenzor elastických modulov*, $[u]$ je *vektor sklzu* a $\vec{\nu}$ je *normálový vektor zlomu*. $G_{np,q}$ je *derivácia Greenovho tenzora*. $G_{np,q}$ je fyzikálne ekvivalentná dvojici síl s ramenom v smere q a silami v smere p na zlomovej ploche Σ v bode $\vec{\xi}$. $m_{pq} * G_{np,q}$ je posunutie v bode \vec{x} v dôsledku dvojíc síl v bode $\vec{\xi}$ a m_{pq} je sila (p, q) -tej dvojice.

V bodovej aproximácii zdroja môžeme povrch Σ považovať za systém dvojíc síl lokalizovaných v bode, potom

$$U_n(\vec{x}, t) = \left(\iint_{\Sigma} m_{pq} d\Sigma \right) * G_{np,q} .$$

Tenzor momentu M_{pq} je definovaný vzťahom

$$M_{pq} = \iint_{\Sigma} m_{pq} d\Sigma .$$

Potom

$$U_n(\vec{x}, t) = M_{pq} * G_{np,q} ,$$

kde M_{pq} je sila výslednej (p, q) dvojice v danom bode.

V prípade tangenciálneho sklzu ($\vec{\nu} \cdot \vec{n} = 0$; $[\vec{u}] = \Delta u \vec{n}$, Obr. 15) v izotropnom prostredí má tenzor hustoty momentu jednoduchý tvar

$$m_{pq} = \mu (\nu_p [u_q] + \nu_q [u_p]) ,$$

alebo

$$m_{pq} = \mu \Delta u (\nu_p n_q + \nu_q n_p) .$$

Potom tenzor momentu je

$$M_{pq} = \iint_{\Sigma} \mu \Delta u (\nu_p n_q + \nu_q n_p) d\Sigma .$$

Ak predpokladáme homogénne prostredie v zdrojovej oblasti alebo priemerný modul torzie μ , potom

$$M_{pq} = \mu (\nu_p n_q + \nu_q n_p) \iint_{\Sigma} \Delta u(\vec{\xi}, t) d\Sigma .$$

Integrál môžeme aproximovať

$$\iint_{\Sigma} \Delta u(\vec{\xi}, t) d\Sigma \doteq \overline{\Delta u}(t) \iint_{\Sigma} d\Sigma = \overline{\Delta u}(t) A = \overline{\Delta u} s(t) A ,$$

kde $s(t) = \frac{\overline{\Delta u}(t)}{\overline{\Delta u}}$ a $\overline{\Delta u} = \overline{\Delta u}(t \rightarrow \infty)$. Potom tenzor momentu bude

$$M_{pq} = \mu A \overline{\Delta u} s(t) (\nu_p n_q + \nu_q n_p) .$$

Skalárny seizmický moment M_0 je definovaný vzťahom

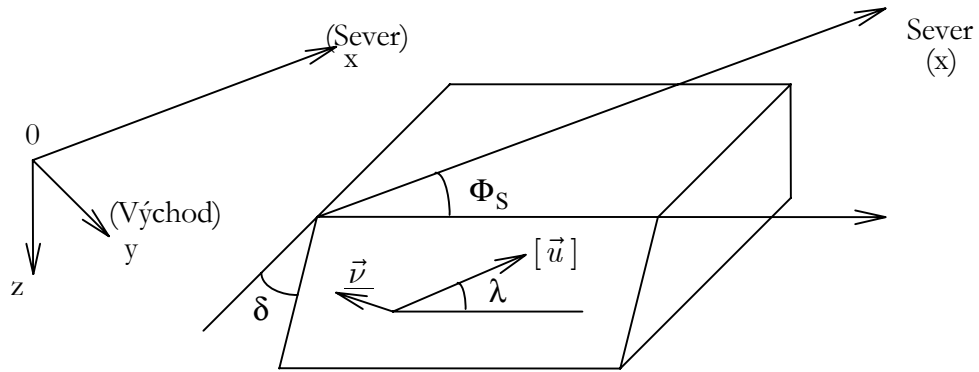
$$M_0 = \mu A \overline{\Delta u} .$$

Potom pre tangenciálny sklz platí

$$M_{pq} = M_0 (\nu_p n_q + \nu_q n_p) s(t) . \quad (84)$$

V súradnicovom systéme na Obr. 15 sú zložky vektora $\vec{\nu}$ a vektora \vec{n} definované pomocou uhlov Φ_s (strike), δ (dip) a λ (rake) nasledovne

$$\begin{aligned} n_x &= \cos \lambda \cos \Phi_s + \cos \delta \sin \lambda \sin \Phi_s , & \nu_x &= -\sin \delta \sin \Phi_s , \\ n_y &= \cos \lambda \sin \Phi_s - \cos \delta \sin \lambda \cos \Phi_s , & \nu_y &= \sin \delta \cos \Phi_s , \\ n_z &= -\sin \lambda \sin \delta , & \nu_z &= -\cos \delta . \end{aligned} \quad (85)$$



Φ_s	strike	$\vec{\nu}$	normála k zlomu
δ	dip	$[\vec{u}] = \Delta u \vec{n}$	
λ	rake	sklz $[\vec{u}]$	

Obr. 15 Definícia parametrov orientácie zlomovej plochy a súradnicového systému

Z rovníc (84) a (85) potom vyplýva

$$\begin{aligned} M_{xx}(t) &= -M_0 (\sin \delta \cos \lambda \sin 2\Phi_s + \sin 2\delta \sin \lambda \sin^2 \Phi_s) s(t) , \\ M_{xy}(t) &= M_0 (\sin \delta \cos \lambda \cos 2\Phi_s + \frac{1}{2} \sin 2\delta \sin \lambda \sin 2\Phi_s) s(t) , \\ M_{xz}(t) &= -M_0 (\cos \delta \cos \lambda \cos \Phi_s + \cos 2\delta \sin \lambda \sin \Phi_s) s(t) , \\ M_{yy}(t) &= M_0 (\sin \delta \cos \lambda \sin 2\Phi_s - \sin 2\delta \sin \lambda \cos^2 \Phi_s) s(t) , \\ M_{yz}(t) &= -M_0 (\cos \delta \cos \lambda \sin \Phi_s - \cos 2\delta \sin \lambda \cos \Phi_s) s(t) , \\ M_{zz}(t) &= M_0 \sin 2\delta \sin \lambda s(t) . \end{aligned} \quad (86)$$

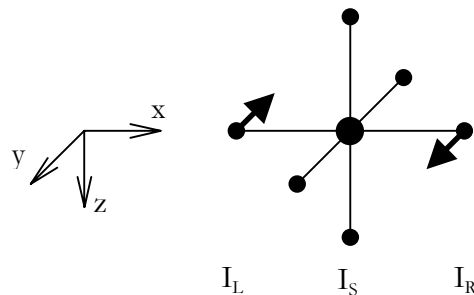
V dôsledku symetrie tenzoru momentu platí

$$M_{xy} = M_{yx} , \quad M_{xz} = M_{zx} , \quad M_{yz} = M_{zy} .$$

3.1.3.1 Simulácia bodového zdroja s ľubovoľným mechanizmom ohniska pomocou objemovej sily

Simulovanie bodového dislokačného zdroja v konečno-diferenčnej schéme znamená simuláciu systému dvojíc síl (p, q) s veľkosťou M_{pq} pôsobiacich v sieťovom bode. Takúto možnosť poskytuje člen pohybovej rovnice reprezentujúci objemovú silu. Frankel (1993) navrhol takýto prístup a použil ho v konečno-diferenčnej schéme odvodennej z pohybovej rovnice formulovanej v posunutí na konvenčnej sieti. Graves (1996) jeho prístup adaptoval na konečno-diferenčnú schému formulovanú v rýchlosti a napätí na striedavo usporiadanej sieti. Gravesov (1996) postup používame aj v našich simuláciách a preto ho v stručnosti popíšeme.

Uvažujme napr. dvojicu síl (y, x) pôsobiacu v sieťovom bode (I_s, K_s, L_s) , pozri Obr. 16.



Obr. 16 Ilustrácia simulácie dvojice síl (y, x) na konvenčnej sieti

Potom odpovedajúci člen objemovej sily v pohybovej rovnici, t.j. f_y môže byť aproximovaný vzťahom

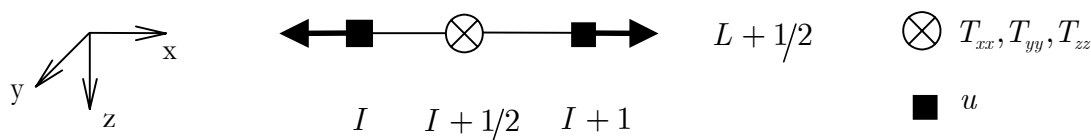
$$f_y \doteq \frac{1}{h^3} \frac{1}{2h} M_{yx}(t) (\delta_{I_R} \delta_{KK_R} \delta_{LL_R} - \delta_{I_L} \delta_{KK_L} \delta_{LL_L}) ,$$

kde $2h$ je dĺžka ramena a $1/h^3$ normalizuje silu na jednotkový objem.

Simulácia zdroja na striedavo usporiadanej sieti je zložitejšia. Je to preto, lebo každá zložka posunutia (alebo rýchlosti posunutia) je umiestnená na inej pozícii v sieti. Predpokladajme dvojicu síl pôsobiacu v bode $I + 1/2, K + 1/2, L + 1/2$, t.j. tam, kde sú normálové zložky tenzoru napätia T_{xx}, T_{yy}, T_{zz} . Uvažujme x -ovú zložku člena objemovej sily. Pretože tento člen je prítomný len v rovnici pre u zložku rýchlosti posunutia, môžeme ho aplikovať len v tej sieťovej pozícii, v ktorej je táto zložka lokalizovaná.

Do člena f_x prispievajú dvojice síl majúce sily v smere osi x . Uvažujme najskôr dvojicu síl (x, x) . Táto môže byť simulovaná v sieťových bodoch $I, K + 1/2, L + 1/2$ a $I + 1, K + 1/2, L + 1/2$, (pozri Obr. 17) takto

$$F_{I+1, K+1/2, L+1/2}^x = -F_{I, K+1/2, L+1/2}^x = \frac{1}{h^3} \frac{1}{h} M_{xx}(t) = \frac{1}{h^4} M_{xx}(t) \quad .$$



Obr. 17 Ilustrácia simulácie dvojice síly (x, x) na striedavo usporiadanej sieti

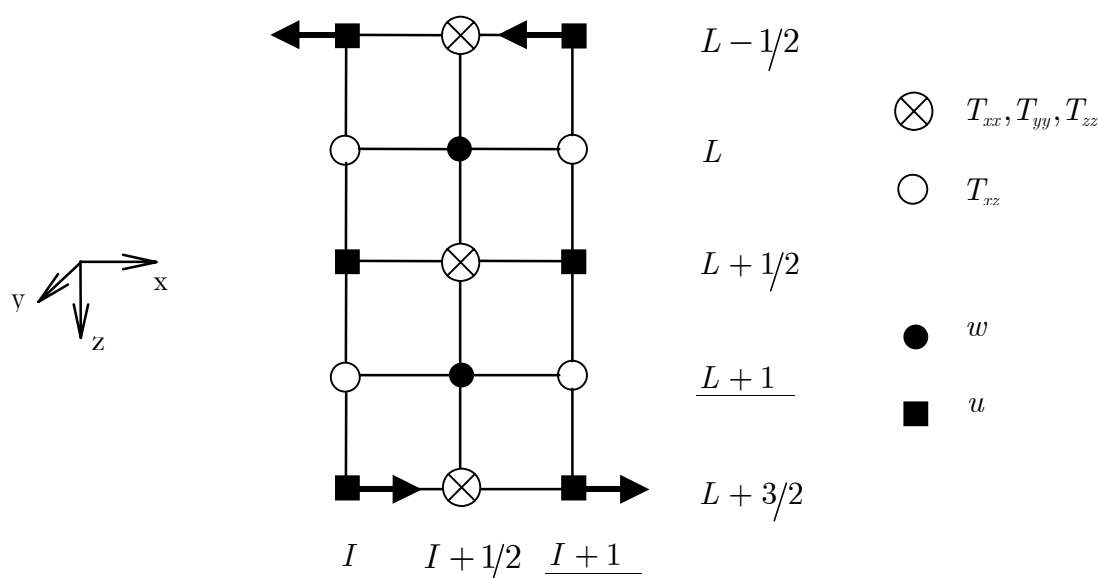
Uvažujme teraz dvojicu síl (x, z) . Nemôžeme ju simulovať v bodoch $I + 1/2, K + 1/2, L + 1$ a $I + 1/2, K + 1/2, L$, pretože u nie je lokalizované v týchto bodoch. Môžeme však uvažovať jednu dvojicu pozdĺž sieťovej čiary $I + 1$ a druhú pozdĺž sieťovej čiary I , t.j.

$$F_{I+1, K+1/2, L+3/2}^x = -F_{I+1, K+1/2, L-1/2}^x = \frac{1}{2} \frac{1}{h^3} \frac{1}{2h} M_{xz}(t) = \frac{1}{4h^4} M_{xz}(t)$$

a

$$F_{I, K+1/2, L+3/2}^x = -F_{I, K+1/2, L-1/2}^x = \frac{1}{2} \frac{1}{h^3} \frac{1}{2h} M_{xz}(t) = \frac{1}{4h^4} M_{xz}(t)$$

a potom vziať priemer týchto dvoch dvojíc (Obr. 18).



Obr. 18 Ilustrácia simulácie dvojice síly (x, z) na striedavo usporiadanej sieti

Všeobecne, pre dvojice síl pôsobiace v sieťovom bode $I + 1/2, K + 1/2, L + 1/2$ pre striedavo usporiadanú sieť ako na Obr. 3 máme vzťahy

$$\begin{aligned}
F_{I+1, K+1/2, L+1/2}^x &= -F_{I, K+1/2, L+1/2}^x = \frac{1}{h^4} M_{xx}(t) , \\
F_{I+1, K+3/2, L+1/2}^x &= -F_{I+1, K-1/2, L+1/2}^x = \frac{1}{4h^4} M_{xy}(t) , \\
F_{I, K+3/2, L+1/2}^x &= -F_{I, K-1/2, L+1/2}^x = \frac{1}{4h^4} M_{xy}(t) , \\
F_{I+1, K+1/2, L+3/2}^x &= -F_{I+1, K+1/2, L-1/2}^x = \frac{1}{4h^4} M_{xz}(t) , \\
F_{I, K+1/2, L+3/2}^x &= -F_{I, K+1/2, L-1/2}^x = \frac{1}{4h^4} M_{xz}(t) , \\
F_{I+1/2, K+1, L+1/2}^y &= -F_{I+1/2, K, L+1/2}^y = \frac{1}{h^4} M_{yy}(t) , \\
F_{I+3/2, K+1, L+1/2}^y &= -F_{I-1/2, K+1, L+1/2}^y = \frac{1}{4h^4} M_{yx}(t) , \\
F_{I+3/2, K, L+1/2}^y &= -F_{I-1/2, K, L+1/2}^y = \frac{1}{4h^4} M_{yx}(t) , \\
F_{I+1/2, K+1, L+3/2}^y &= -F_{I+1/2, K+1, L-1/2}^y = \frac{1}{4h^4} M_{yz}(t) , \\
F_{I+1/2, K, L+3/2}^y &= -F_{I+1/2, K, L-1/2}^y = \frac{1}{4h^4} M_{yz}(t) , \\
F_{I+1/2, K+1/2, L+1}^z &= -F_{I+1/2, K+1/2, L}^z = \frac{1}{h^4} M_{zz}(t) , \\
F_{I+3/2, K+1/2, L+1}^z &= -F_{I-1/2, K+1/2, L+1}^z = \frac{1}{4h^4} M_{zx}(t) , \\
F_{I+3/2, K+1/2, L}^z &= -F_{I-1/2, K+1/2, L}^z = \frac{1}{4h^4} M_{zx}(t) , \\
F_{I+1/2, K+3/2, L+1}^z &= -F_{I+1/2, K-1/2, L+1}^z = \frac{1}{4h^4} M_{zy}(t) , \\
F_{I+1/2, K+3/2, L}^z &= -F_{I+1/2, K-1/2, L}^z = \frac{1}{4h^4} M_{zy}(t) .
\end{aligned} \tag{87}$$

V prípade tangenciálneho sklzu je $M_{pq}(t)$ dané vzťahom (86).

3.1.3.2 Simulácia seizmických zdrojov konečných rozmerov

Simulácia seizmických zdrojov konečných rozmerov sa v prípade kinematického modelovania realizuje veľkým počtom bodových zdrojov. Základnými predpokladmi je znalosť *kinematického modelu zdroja a orientácia zlomovej plochy*. Kinematický model zdroja je určený

- priestorovým rozložením vektoru sklzu na zlomovej ploche,
- časovou funkciou bodových zdrojov,
- polohou hypocentra a skalárnym seizmickým momentom,
- priestorovým rozložením vektoru rýchlosti šírenia trhliny, resp. časov vzniku jednotlivých elementárnych bodových zdrojov.

Podľa kinematického modelu zdroja rozdelíme zlomovú plochu na subplochy a každej subploche priradíme jeden alebo viacero bodových zdrojov tak, aby sme subplochy rovnomerne pokryli. Podľa rozloženia vektoru rýchlosti šírenia trhliny priradíme jednotlivým bodovým zdrojom čas, v ktorom začnú vyžarovať. Uhly ϕ_s a δ sú pre jednotlivé bodové zdroje známe z orientácie zlomovej plochy, uhol λ sa odvodí z rozloženia vektoru sklzu na zlomovej ploche. Škálovanie seizmického momentu bodových zdrojov je úmerné veľkosti konečného sklzu v danom mieste tak, aby celkový skalárny seizmický moment odpovedal seizmickému momentu modelovaného zemetrasenia.

3.1.3.3 Simulácia vzdialených seizmických zdrojov

V niektorých štúdiách seizmického pohybu pôdy na záujmovej lokalite je potrebné poznať odozvu štruktúry na vzdialené seizmické zdroje. Keďže konečno-diferenčná sieť musí pokrývať aj zdrojovú oblasť aj záujmovú lokalitu, nie je možné v konečno-diferenčných výpočtoch priamo zahrnúť vzdialený zdroj. V takom prípade je potrebné pristúpiť buď k hybridným metódam (napr. Moczo, Bystrický, Kristek, Carcione a Bouchon, 1997) alebo použiť len relatívne jednoduchú simuláciu dopadu rovinnej vlny. Všeobecne šikmý dopad rovinnej vlny je principiálne nemožné modelovať doménovými metódami, pretože odrazená rovinná vlna od voľného povrchu by musela prichádzať spoza hraníc výpočtovej oblasti. Preto je možná len simulácia dopadajúcej rovinnej vlny kolmo na voľný povrch.

Obvykle ako zdroj rovinnej vlny berieme spodné roviny výpočtovej oblasti. Označme spodnú rovinu MZ . Podľa toho, aký typ vlny chceme generovať (P alebo S), predpisujeme hodnoty zodpovedajúcej zložke/zložkám posunutia alebo rýchlosti posunutia. V konečno-diferenčnej schéme odvodennej z pohybovej rovnice formulovanej v rýchlosti. Konkrétne, v prípade generovania rovinnej P vlny dopadajúcej kolmo zospodu, predpisujeme v našej schéme v rovine MZ z -tovým zložkám rýchlosti posunutia.

Na simuláciu dopadajúcej rovinatej vlny je potrebné zabezpečiť špeciálne hraničné podmienky na umelých hraniciach výpočtovej oblasti.

3.1.4 Presnosť a stabilita schémy

Analyzovať prezentovanú konečno-diferenčnú schému v homogénnom neobmedzenom prostredí nie je potrebné, pretože v homogénnom neobmedzenom prostredí je identicky zhodná so schémami, pre ktoré sme vykonali detailnú teoretickú i numerickú analýzu stability a sieťovej disperzie v práci Moczo, Kristek a Halada (2000).

Stabilita a sieťová disperzia v prípade voľného povrchu homogénneho polpriestoru sme skúmali numericky v podkapitole 3.1.2.4.

Dosiaľ vykonané numerické testy a výpočty (viď aj kapitolu 3.2) ukazujú, že aplikovateľnou podmienkou stability aj v prípade nehomogénnych modelov je podmienka (viď Moczo, Kristek a Halada 2000)

$$\Delta t \leq \frac{6}{7} \frac{h}{\sqrt{3}\alpha_{\max}}, \quad (88)$$

kde α_{\max} je maximálna rýchlosť šírenia P vln, h je sieťový krok, Δt je časový krok a aplikovateľným vzorkovacím kritériom je

$$h \leq \frac{\lambda_{\min}}{6} = \frac{\beta_{\min}}{6f_{AC}}, \quad (89)$$

kde f_{AC} je frekvencia, po ktorú je výpočet dostatočne presný (t.j. so zanedbateľnou nepresnosťou v dôsledku sieťovej disperzie), λ_{\min} je minimálna vlnová dĺžka a β_{\min} je minimálna rýchlosť šírenia S vln.

3.1.5 Algoritmus výpočtu a optimalizácia pamäťových nárokov a výpočtového času

3D konečno-diferenčné viskoelastické modelovanie seizmického pohybu vo veľko-rozmerných modeloch sedimentárnych bazénov kladie extrémne požiadavky na výpočtový čas a pamäť počítačov. Samotné použitie efektívnej konečno-diferenčnej schémy odvodené v predchádzajúcich kapitolách nie je postačujúce.

V tejto kapitole v stručnosti zmienime optimalizačné procedúry detailne popísané v prácach Moczo, Lucká, Kristek a Kristeková (1999) a Moczo, Kristek a Bys-trický (2001).

3.1.5.1 Pamäťové nároky

Z odvodenej konečno-diferenčnej schémy (kapitola 3.1.2) vyplýva nutnosť definovať v každej sieťovej bunke so stredom v $\left(x_I, y_{K+\frac{1}{2}}, z_{L+\frac{1}{2}}\right)$ tieto efektívne materiálové sieťové parametre:

$$\begin{aligned} \rho_{I,K+\frac{1}{2},L+\frac{1}{2}}^A, & \quad \rho_{I+\frac{1}{2},K,L+\frac{1}{2}}^A, & \quad \rho_{I+\frac{1}{2},K+\frac{1}{2},L}^A, \\ \mu_{I,K+\frac{1}{2},L}^H, & \quad \mu_{I+\frac{1}{2},K,L}^H, & \quad \mu_{I,K,L+\frac{1}{2}}^H, & \quad \mu_{I+\frac{1}{2},K+\frac{1}{2},L+\frac{1}{2}}^H, & \quad \kappa_{I+\frac{1}{2},K+\frac{1}{2},L+\frac{1}{2}}^H, \\ \bar{Y}_{j;I,K+\frac{1}{2},L}^\mu, & \quad \bar{Y}_{j;I+\frac{1}{2},K,L}^\mu, & \quad \bar{Y}_{j;I,K,L+\frac{1}{2}}^\mu, & \quad \bar{Y}_{j;I+\frac{1}{2},K+\frac{1}{2},L+\frac{1}{2}}^\mu, & \quad \bar{Y}_{j;I+\frac{1}{2},K+\frac{1}{2},L+\frac{1}{2}}^\kappa \end{aligned} \quad (90)$$

kde $j = 1, \dots, n$ a n je počet relaxačných frekvencií. Vidíme, že v prípade, že sa materiálové parametre v uvažovanom modeli prostredia menia „od bodu k bodu“, potrebujeme uchovávať pre každú sieťovú bunku

$$3 + 5(n + 1)$$

hodnôt. Keďže väčšina modelov prostredia obsahuje veľké časti oblastí s rovnakými materiálovými parametrami, charakterizujeme každú sieťovú bunku jedným číslom, nazývaným *typ bunky*. Potom pre výpočtovú oblasť s rozmermi

$$MX \times MY \times MZ$$

sieťových buniek potrebujeme uchovávať len

$$MX \cdot MY \cdot MZ + [3 + (5n + 1)]K$$

hodnôt, kde K je počet rôznych typov buniek, ktorých je spravidla aj rádovo menej než počet všetkých sieťových buniek v modeli.

Okrem veličín popisujúcich materiálové vlastnosti prostredia je pri výpočte potrebné uchovávať aj veličiny počítaného vlnového poľa. Konečno-diferenčné aproximácie časových derivácií (71), použité v odvodenej konečno-diferenčnej schéme sú druhého rádu, to znamená, že na vypočítanie ďalšej časovej hladiny potrebujeme poznať jednu predchádzajúcu. V nami použitej konečno-diferenčnej schéme v rýchlosti, posunutí a napätí integrujeme zložky rýchlosti, posunutia a anelastické funkcie, teda potrebujeme uchovávať veličiny

$$\begin{aligned} u_{I,K+\frac{1}{2},L+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}}, & \quad v_{I+\frac{1}{2},K,L+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}}, & \quad w_{I+\frac{1}{2},K+\frac{1}{2},L}^{m-\frac{1}{2}}, \\ U_{I,K+\frac{1}{2},L+\frac{1}{2}}^m, & \quad V_{I+\frac{1}{2},K,L+\frac{1}{2}}^m, & \quad W_{I+\frac{1}{2},K+\frac{1}{2},L}^m, \\ X_{j;I,K+\frac{1}{2},L}^{xz,m-\frac{1}{2}}, & \quad X_{j;I+\frac{1}{2},K,L}^{yz,m-\frac{1}{2}}, & \quad X_{j;I,K,L+\frac{1}{2}}^{xy,m-\frac{1}{2}}, \\ X_{j;I+\frac{1}{2},K+\frac{1}{2},L+\frac{1}{2}}^{xx,m-\frac{1}{2}}, & \quad X_{j;I+\frac{1}{2},K+\frac{1}{2},L+\frac{1}{2}}^{yy,m-\frac{1}{2}}, & \quad X_{j;I+\frac{1}{2},K+\frac{1}{2},L+\frac{1}{2}}^{zz,m-\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

kde $j = 1, \dots, n$. To znamená potrebu uchovávať až

$$MX \cdot MY \cdot MZ \cdot 6(n + 1)$$

veličín. Ako vidieť, podstatnú časť z toho tvoria hodnoty anelastických funkcií. Redukciu pamäťových nárokov vyplývajúcich z anelastických funkcií navrhol Day (1998). Anelastické funkcie priestorovo rozmiestnil tak, aby vytvárali striedavo usporiadanú redšiu sieť. Jedna anelastická funkcia $\xi_j^{\gamma n}$ pre jednu relaxačnú frekvenciu ω_j je distribuovaná s priestorovou periódou $2h$, kde h je sieťový krok. Dôsledkom toho je, že máme fixný počet 8 relaxačných frekvencií. Uvažujme napríklad kocku $h \times h \times h$, ktorá má v každom rohu zložku T_{xz} tenzoru napätia. Každé z 8 pozícií (rohy kocky) je priradená len jedna z 8 relaxačných frekvencií ξ_j^{xz} ($j = 1, \dots, 8$), povedzme, ξ_1^{xz} je priradená jednej pozícii, ξ_2^{xz} ďalšej, atď. Potom počet všetkých ξ_j^{xz} ($j = 1, \dots, 8$) v celej výpočtovej sieti je $\frac{MX}{2} \cdot \frac{MY}{2} \cdot \frac{MZ}{2} \cdot 8 = MX \cdot MY \cdot MZ$. Pretože máme šesť nezávislých zložiek tenzoru napätia, celkový počet anelastických funkcií $\xi_j^{\gamma n}$ ($j = 1, \dots, 8$) v celej výpočtovej sieti je $MX \cdot MY \cdot MZ \cdot 6$. Pretože \bar{Y}_j^{κ} a \bar{Y}_j^{μ} sú v sieti rozložené rovnakým spôsobom, celkový počet \bar{Y}_j^{κ} a \bar{Y}_j^{μ} ($j = 1, \dots, 8$) v celej výpočtovej sieti je $MX \cdot MY \cdot MZ \cdot 5$.

Vidíme, že pamäťové nároky zavedením redukcie podľa Daya je ekvivalentné uvažovaniu len jednej relaxačnej frekvencie v pôvodnej formulácii.

3.1.5.2 Optimalizácia pamäťových nárokov a výpočtového času

Existuje mnoho prístupov na skrátenie výpočtového času a redukciu pamäťových nárokov. Redukcia celkového počtu sieťových bodov a z toho plynúca redukcia nárokov na operačnú pamäť a výpočtový čas môže byť dosiahnutá okrem použitia schém vyšších rádov presnosti aj použitím sietí s premenlivým krokom (Moczo 1989, Pitarka 1999) a kombinovanou (diskontinuitnou) sieťou (Jastram a Behle 1992; Moczo, Labák, Kristek a Hron 1996; Moczo, Bystrický, Kristek, Carcione a Bouchon 1997; Aoi a Fujiwara 1999). Redukcia operačnej pamäti a použitie diskovej pamäti je možné aplikovaním *optimalizácie operačnej pamäti* (Olsen a Schuster 1992, Graves 1996). Redukcia aj diskovej aj operačnej pamäti a ich vyvážené používanie je dosiahnuté aplikovaním *kombinovanej optimalizácie pamäťových nárokov*, CDMO, (Moczo, Lucká, Kristek a Kristeková 1999). Samozrejmosťou sa v súčasnosti stáva urýchľovanie výpočtov ich paralelným programovaním.

Optimalizácia operačnej pamäti (CMO)

Optimalizácia operačnej pamäti (Graves, 1996) je založená na uchovávaní len malého počtu sieťových rovín v operačnej pamäti a vykonaní maximálneho počtu časových krokov pre tieto roviny. Táto podmnožina rovín sa opakovane presúva celou

výpočtovou sieťou a veličiny vlnového poľa (rýchlosť, posunutie a anelastické funkcie) sú postupne (rovinu za rovinou) a periodicky prepisované na disk.

Táto optimalizácia signifikantne redukuje nároky na operačnú pamäť, avšak nároky na diskovú pamäť môžu byť veľmi veľké. Navyše, veľké množstvo vstupno-výstupných operácií zvyšuje výpočtový čas.

Kombinovaná optimalizácia pamäťových nárokov (CDMO)

Kombinovaná optimalizácia pamäťových nárokov (Moczo, Lucká, Kristek a Kristeková 1999) vychádza z optimalizácie operačnej pamäti, ktorú dopĺňa o redukcii nárokov na diskovú pamäť. Pri optimalizácii diskovej pamäti sa aplikuje wavelet transformácia na dvojrozmerné pole veličín vlnového poľa (separátne pre každú zložku) čím sa dosiahne zníženie informačnej entropie. Následne je vykonaná kompresia vo wavelet oblasti. Potom sa pre každú zložku a každú sieťovú rovinu uchovávajú na disk len reťazce núl a jednotiek namiesto dvojrozmerných polí ako je to v prípade optimalizácie len operačnej pamäti.

CDMO signifikantne redukuje počet vstupno-výstupných operácií a navyše je pomerne dobre paralelizovateľná.

Kombinovaná konečno-diferenčná sieť

Hoci CDMO redukuje nároky na operačnú a diskovú pamäť, nároky na výpočtový čas určite neznižuje. Jedným z možných riešení ako redukovat' výpočtový čas je zníženie počtu sieťových bodov vo výpočtovom modeli. Keďže prevažná väčšina modelov obsahuje pripovrchové vrstvy nízkych rýchlostí, ktoré určujú sieťový krok a zároveň zasahuje do skalného podložia s vysokými rýchlosťami, je prirodzené pokryť model viacerými konečno-diferenčnými sieťami s rôznymi sieťovými krokmi. Takéto siete sa nazývajú *kombinované* alebo *diskontinuitné* (Jastram a Behle 1992; Moczo, Labák, Kristek a Hron 1996; Moczo, Bystrický, Kristek, Carcione a Bouchon 1997; Aoi a Fujiwara, 1999).

Vo výpočtovom programe DVS5.0 používame kombinovanú sieť, ktorej spodná časť je pravouhlá sieť $h \times h \times h$ a vrchná časť je zjemnená pravouhlá sieť $\frac{h}{3} \times \frac{h}{3} \times \frac{h}{3}$. Tretinové zjemnenie sieťového kroku je najjednoduchšie vzhľadom k štruktúre striedavo usporiadanej siete. Vertikálny rez konečno-diferenčnou sieťou prechádzajúci pozíciou normálových zložiek tenzoru napätia je na Obr. 19. Veličiny v blízkosti prechodu (rovina označená LPAS v oboch sieťach) medzi redšou a hustejšou sieťou sú vypočítavané konečno-diferenčnou schémou 2. rádu a najspodnejšie veličiny hustejšej siete (na Obr. 19 označené žltou farbou) sú vypočítavané lineárnou interpoláciou z hodnôt v rovinách nad a pod. Vo vertikálnom reze konečno-diferenčnou sieťou prechádzajúcom pozíciou V zložky vektoru posunutia je situácia podobná.

Numerické testy ukázali zanedbateľný vplyv kombinovanej siete na výsledné vlnové pole, ak kontaktom sietí neprechádza materiálová diskontinuita.

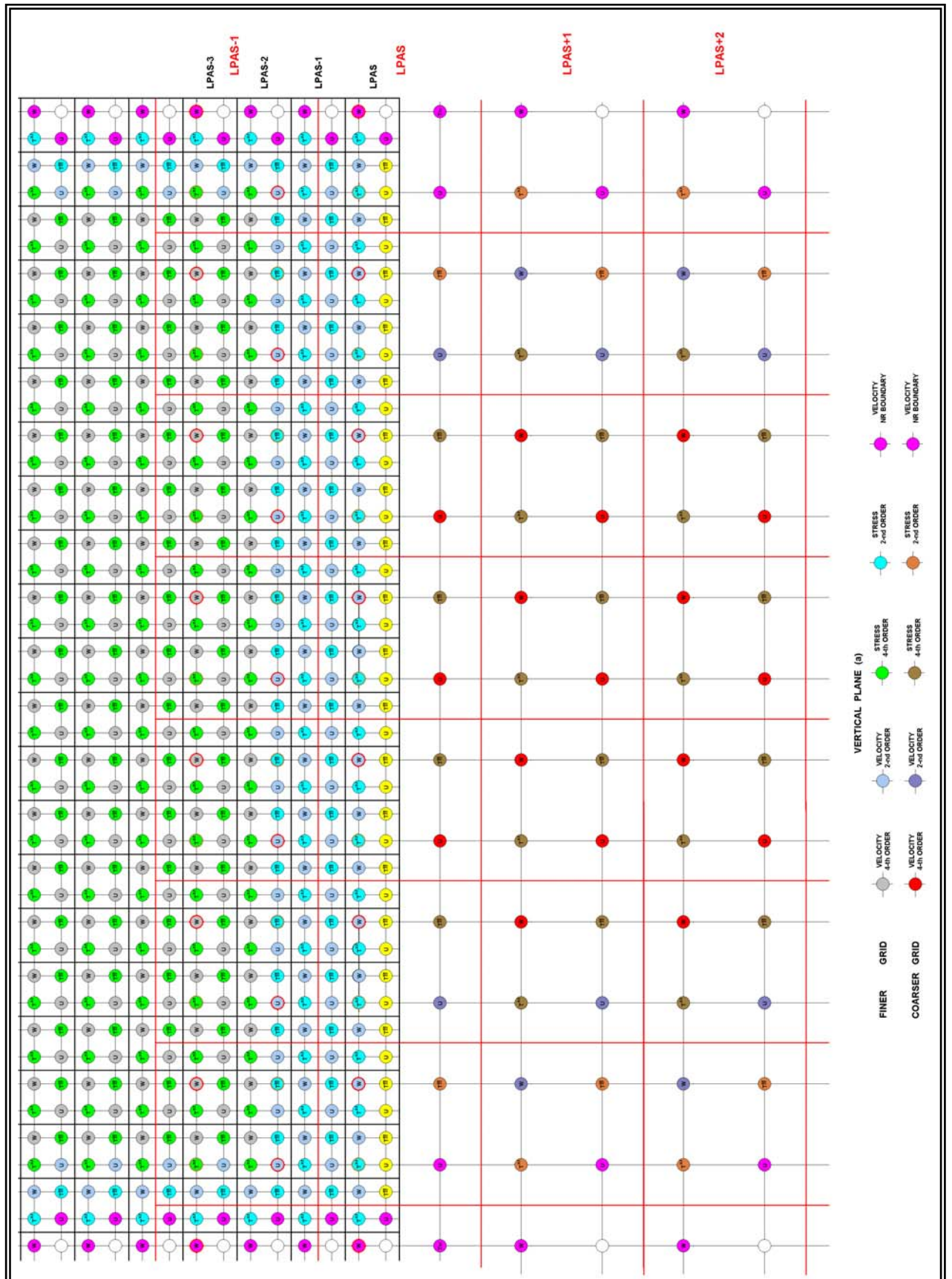
*Numerický príklad optimalizácie –
simulácia zemetrasenia 17. januára 1995, Hyogoken-Nanbu (Kobe), Japonsko*

Popísané optimalizácie pamäťových nárokov môžeme ilustrovať na príklade výpočtu seizmického pohybu počas zemetrasenia 17. januára 1995, Hyogoken-Nanbu (Kobe), Japonsko publikovanom v práci Kristek et al. (1999). Parametre použitého modelu ako aj pamäťové nároky sú dané v Tab. 7. Pamäťové nároky sa vzťahujú na konečno-diferenčný výpočet s jednoduchou rovnomernou sieťou a na tri úrovne optimalizácie pre schému 4. rádu na striedavo usporiadanej sieti. V tabuľke sú MX , MY , MZ počty sieťových buniek v x -ovom, y -ovom a z -ovom smere, $LPAS$ je počet sieťových buniek v smere z v hornej ($h \times h \times h$) časti kombinovanej siete $h \times h \times h _ 3h \times 3h \times 3h$, $MZ3H$ je počet sieťových buniek v smere z v spodnej ($3h \times 3h \times 3h$) časti kombinovanej siete $h \times h \times h _ 3h \times 3h \times 3h$, h je vzorkovací krok, β_{\min} je minimálna rýchlosť šírenia S vln, f_{ac} je maximálna frekvencia po ktorú by mal byť výpočet dostatočne presný, NP je počet horizontálnych sieťových rovín uchovávaných naraz v operačnej pamäti, CR je minimálny kompresný pomer, p je počet bajtov použitých na reprezentáciu reálneho čísla, q je počet bajtov použitých na reprezentáciu celého čísla.

Veľké pamäťové nároky na numerické modelovanie bez optimalizácie jasne ukazujú potrebu pamäťovej optimalizácie.

Tab. 7 Príklad pamäťových nárokov pri rôznych optimalizáciách

$MX = 1054,$ $MY = 247,$ $MZ = 501,$ $LPAS = 47,$ $MZ3H = 151,$ $h = 55m,$ $\beta_{\min} = 333m/s,$ $f_{ac} \leq 1Hz$				
optimali- zácia pamäť	sieť $h \times h \times h$	typy materiálových buniek	CDMO	$h \times h \times h$ $3h \times 3h \times 3h$ + CDMO
operačná	8458 MB	6291 MB	124 MB	124 MB
disková	—	—	746 MB	95 MB



Obr. 19 Vertikálny rez kombinovanou konečno-diferenčnou sieťou

3.1.6 Výpočtový program DVS 5.0

Výpočtový program DVS 5.0, napísaný v programovacom jazyku Fortran 95, je určený na výpočet seizmického pohybu v trojrozmernom nehomogénnom viskoelastickom prostredí s rovinným voľným povrchom metódou konečných diferencií. Konečno-diferenčná schéma je zostavená na striedavo usporiadanej kombinovanej sieti a je 4. rádu presnosti pre priestorové derivácie a 2. rádu pre časové. Odvodená je z formulácie pohybovej rovnice a Hookeovho zákona v rýchlosti, posunutí a napätí. Na simuláciu okrajovej podmienky na voľnom povrchu je použitá W formuláciu s adjustovanými konečno-diferenčnými formulami.

Zdrojový súbor DVS 5.0 pozostáva z hlavného programu, 11 modulov a 121 podprogramov/funkcií. Počet riadkov súboru je 14894. Zdrojový súbor tvorí súčasť dizertačnej práce a je uvedený v Prílohe (CD ROM). Podrobný návod na použitie programu a vytvorenie vstupných dát, DVS 5.0 User's Guide je tiež súčasťou dizertačnej práce a je uvedený v Prílohe (CD ROM).

3.1.6.1 Súradnicový systém

V programe sa používa pravotočivý súradnicový systém tak, že voľný povrch odpovedá rovine $z = 0$, kladná časť súradnicovej osi z smeruje do vnútra výpočtovej oblasti a súradnicová os x spravidla smeruje na sever (dôležité kvôli parametrom bodového dislokačného zdroja).

3.1.6.2 Výpočtová oblasť a jej pokrytie kombinovanou konečno-diferenčnou sieťou

Program rieši pohybové rovnice v pravouhlej výpočtovej oblasti, pričom vrchná stena odpovedá voľnému povrchu.

Výpočtovú oblasť môžeme pokryť jednou alebo dvomi pravouhlými rovnomernými konečno-diferenčnými sieťami, pričom v druhom prípade ide o trojnásobné zjemnenie siete v hornej časti. Geometria kombinovanej siete je na Obr. 19.

3.1.6.3 Model prostredia

Popis formátov vstupných súborov so sieťovými materiálovými parametrami je možné nájsť v Prílohe. Efektívne materiálové sieťové parametre musia byť určené podľa vzorcov (50), (57), (58), (63) a (64).

3.1.6.4 Hranice výpočtovej oblasti

V programe je možnosť voľby aproximácie neodrážajúcej hranice pre každú hranicu výpočtového modelu osobitne. Celkovo je možné si vybrať z viac ako 8 typov neodrážajúcich hraníc (popísaných v časti 3.1.2.5). Je možné simulovať aj pevné hranice.

Špeciálne sa správajú hranice pri výpočtoch s excitáciou rovinnou vlnou. Vtedy, v závislosti od typu rovinatej vlny, je možné simulovať symetriu príslušných zložiek poľa rýchlosti bez ohľadu na zvolený typ neodrážajúcej hranice.

3.1.6.5 Optimalizácia pamäťových nárokov

V programe je implementovaná kombinovaná optimalizácia pamäťových nárokov s možnosťou nasledovnej voľby:

- Výpočet s aplikovaním kompletnej kombinovanej optimalizácie pamäťových nárokov, t.j.
 - v diskovej pamäti sú uchovávané komprimované (wavelet kompresiou) hodnoty veličín vlnového poľa,
 - v operačnej pamäti je len malá podmnožina všetkých sieťových rovín výpočtového modelu.

Vhodné pre extrémne modely realistických štruktúr.

- Výpočet s aplikovaním optimalizácie operačnej pamäti, t.j.
 - v diskovej pamäti sú uchovávané veličiny vlnového poľa,
 - v operačnej pamäti je len malá podmnožina všetkých sieťových rovín výpočtového modelu.

Vhodné pre extrémne modely realistických štruktúr pri rýchlej a dostatočne veľkej diskovej kapacite.

- Výpočet s aplikovaním modifikovanej kombinovanej optimalizácie pamäťových nárokov, t.j.
 - v operačnej pamäti sú uchovávané komprimované (wavelet kompresiou) hodnoty veličín vlnového poľa,
 - v operačnej pamäti je len malá podmnožina všetkých sieťových rovín výpočtového modelu uchovaná nekomprimovane.

Vhodné pre menšie modely alebo pri dostatočne veľkej kapacite operačnej pamäti.

- Výpočet bez optimalizácie pamäťových nárokov.

Vhodné pre malé modely alebo pri dostatočne veľkej kapacite operačnej pamäti.

3.1.6.6 Optimalizácia výpočtového času

Program je napísaný v jazyku Fortran 95 s implementovanými direktívami pre paralelizáciu na systémoch so zdieľanou operačnou pamäťou podľa štandardu OpenMP Fortran API 1.1 (OpenMP Fortran Application Program Interface v1.1, 1999).

Dôležité vlastnosti použitej paralelizácie:

- Počas jednej numerickej simulácie je možné meniť počet podprocesov.
- Plne paralelizovaná wavelet kompresia.
- Efektívne škálovanie až do 8 procesorov.

3.1.6.7 Implementácia seizmických zdrojov

Program umožňuje tri typy excitácie vlnového poľa:

- bodové dislokačné zdroje,
- bodové explozívne zdroje,
- rovinnú vlnu excitovanú spodnou rovinou výpočtového modelu.

Pritom bodové zdroje je možné vzájomne kombinovať a ich počet je ľubovoľný. Každý bodový zdroj môže mať vlastnú časovú funkciu a jej začiatok môže byť definovaný nezávisle od iných. Časová funkcia sa zadáva ako normovaná závislosť sklzu od času. To znamená, že jej trvanie musí byť definované do konca zvoleného výpočtového časového okna. Vhodnou konfiguráciou bodových zdrojov a ich časových funkcií je možné kinematicky modelovať zdroje konečných rozmerov. Pri excitácii rovinnou vlnou nie je možné počas trvania jej excitácie používať ďalší bodový zdroj.

Pri excitácii rovinnou vlnou môžeme voliť typ rovinatej vlny a to

- P vlna dopadajúca zdola nahor,
- S vlna polarizovaná v smere osi x dopadajúca zdola nahor,
- S vlna polarizovaná v smere osi y dopadajúca zdola nahor.

Počas šírenia rovinatej vlny sú na hraniciach výpočtovej oblasti simulované podmienky symetrie. Preto je potrebné pred príchodom odrazených/difragovaných vln od nehomogenity k hraniciam výpočtovej oblasti výpočet prerušiť a znovu spustiť bez excitácie rovinnou vlnou. V tejto časti výpočtu už môžu byť použité aj bodové zdroje.

V prípade potreby je jednoduché doplniť program o excitáciu vtláčenou silou v sieťovom bode.

3.1.6.8 Výstupy programu

Počet a poloha prijímačov, t.j. bodov siete, v ktorých chceme zaznamenávať vlnové pole vypočítaného seizmického pohybu, môžu byť ľubovoľné. V programe je možnosť voľby či chceme zaznamenávať rýchlosť častice a/alebo posunutie. Pri špecifikácii prijímačov je potrebné uviesť si, že používame striedavo usporiadanú sieť a pre voľný povrch používame W formuláciu (kapitola 3.1.2.4), čo má za následok, že jednotlivé zložky vektoru rýchlosti (alebo posunutia) častice sú v rôznych pozíciách a len W zložka leží skutočne na voľnom povrchu.

Pri výpočte je možné zvoliť zaznamenávanie vlnového poľa aj v celých zvolených horizontálnych rovinách. Podľa toho, či používame pri pamäťovej optimalizácii wavelet kompresiu, sú aj tieto veličiny uchovávané komprimovane. Takto zaznamenané charakteristiky môžu byť použité na tvorbu animácií, alebo je možné určiť z nich integrálne charakteristiky seizmického pohybu (Ariasova intenzita, PGA, PGV, CAV, trvanie silných pohybov) pre všetky body vo zvolenej rovine. Pozn. *Pri zaznamenávaní vlnového poľa v rovinách sa extrémne zvyšujú požiadavky na diskovú pamäť.*

3.2 Numerický príklad

Zásadné numerické testy výpočtovej metódy sú prezentované jednak v práci Mocz, Kristek, Archuleta a Halada (2001), jednak v podkapitole 3.1.2.4. Uvedené numerické testy ukazujú, že vyvinutá konečno-diferenčná schéma je v prípade elastického kontinua presnejšia ako dosiaľ používané schémy. Preto tu ukážeme len dosiaľ nepublikovaný numerický príklad výpočtu seizmického vlnového poľa v modeli viskoelastickej trojrozsomernej nehomogenity ponorenej do elastického polpriestoru. Výber tohto modelu bol podmienený dostupnosťou referenčného riešenia.

Popis modelu

Mäkký materiál údolia je ohraničený dvomi kružnicami s polomerami a a b , kde $a > b$ (Obr. 20). V tejto oblasti je geometria rozhrania medzi polpriestorom a sedimentmi daná vzťahom

$$f(x, y) = H(b^2 + R^2)[1 - 2a(a - x)/R^2], \quad (91)$$

kde H je parameter, ktorý určuje hĺbku údolia a $R^2 = (x - a)^2 + y^2$. Zvolili sme $b = 0.7a$ a $H = 0.4/a$, kde $a = 4000m$ (Obr. 21).

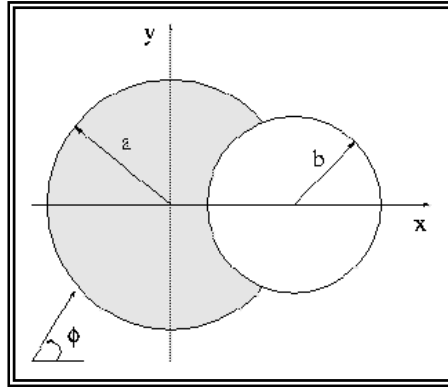
Materiálové parametre

Homogénny elastický polpriestor má nasledovné parametre:

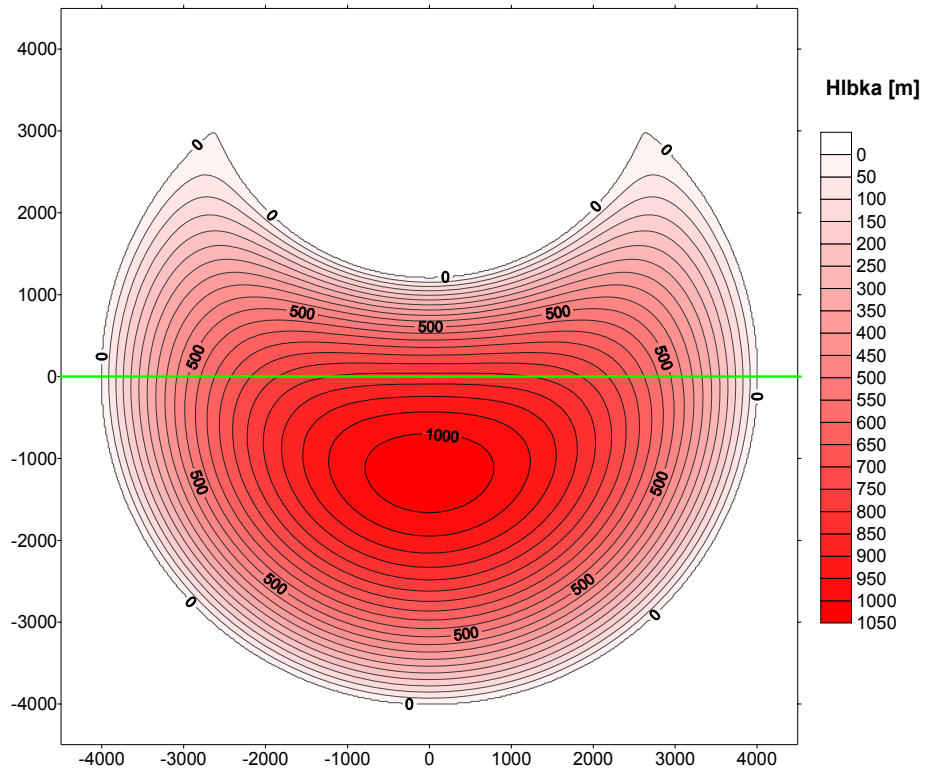
$$\text{rýchlosť šírenia P vln } \alpha = 3464 \text{ m/s},$$

$$\text{rýchlosť šírenia S vln } \beta = 2000 \text{ m/s},$$

$$\text{hustota } \rho = 2000 \text{ kg/m}^3.$$



Obr. 20 Trojrozmerné aluviálne údolie – ohraničenie mäkkých sedimentov



Obr. 21 Trojrozmerné aluviálne údolie – topografia rozhrania sedimentov a polpriestoru. Zelená línia ukazuje profil prijímačov.

Pre aluviálne údolie predpisujeme parametre:
 rýchlosť šírenia P vln $\alpha_V = 2082 \text{ m/s}$,
 rýchlosť šírenia S vln $\beta_V = 1000 \text{ m/s}$,
 hustota $\rho = 1600 \text{ kg/m}^3$,
 faktor kvality pre P vlny $Q_P = 100$,
 faktor kvality pre S vlny $Q_S = 100$.

Zdroj

Rovinná S vlna polarizovaná v smere osi x .

Časová funkcia zdroja zodpovedá rýchlosti posunutia a je daná Rickerovým signálom s charakteristickou periódou $t_p = 3 \text{ s}$, definovaným vzťahom

$$s(t) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}(\gamma - 0.5)e^{-\gamma}; \quad \gamma = \left(\frac{\pi(t - t_s)}{t_p} \right)^2, \quad (92)$$

kde t_p je charakteristická perióda a t_s je pološírka trvania signálu.

Prijímače

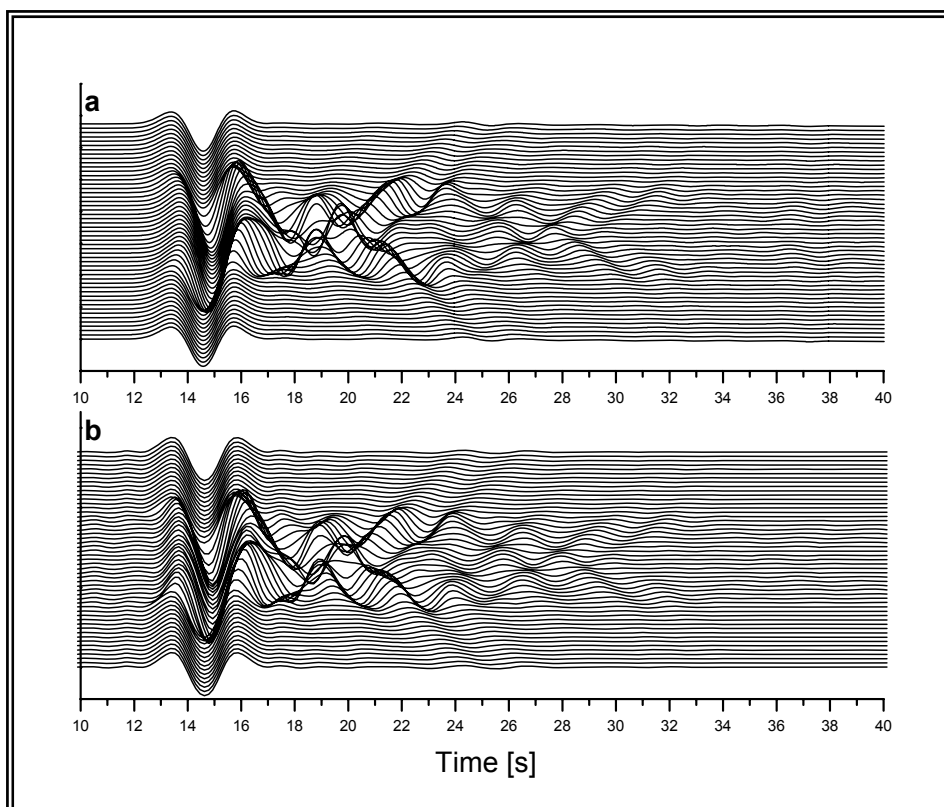
Časové histórie x -ovej zložky rýchlosti posunutia zaznamenané v 51 prijímačoch rovnomerne rozmiestnených pozdĺž profilu vyznačenom na Obr. 21 zelenou líniou.

Parametre výpočtu

Sieťový krok je $h = 160 \text{ m}$, časový krok je $\Delta t = 0.02 \text{ s}$ a veľkosť siete je $MX = 223$, $MY = 223$ a $MZ = 139$.

Výsledky

Výsledné seizmogramy sú na Obr. 22. Na obrázku vidieť, že seizmogramy vypočítané obidvomi nezávislými metódami sú v pomerne dobrej zhode. Žiaľ z tohto porovnania nemožno vyvodzovať ďalšie závery. Je to najmä preto, lebo referenčné riešenie Sáncheza-Sesmu a Luzóna nie je dostatočne jemne vzorkované v časovej oblasti a muselo byť (na základe doporučenia F. Luzóna – osobná komunikácia) zhladené aplikáciou splinov. Z nekauzálnych predčasných príchodov v riešení Sáncheza-Sesmu a Luzóna možno tiež usudzovať na to, že toto riešenie je len približné. Iné referenčné riešenie v časovej oblasti pre 3D model sa nám nepodarilo nájsť aj napriek tomu, že sme oslovili viacerých svetových seizmológov.



Obr. 22 a. Seizmogramy vypočítané našou konečno-diferenčnou schémou.
b. Seizmogramy vypočítané zjednodušenou nepriamou metódou
hraničných elementov (Sánchez-Sesma a Luzón 1995),

4 ZÁVERY

Výsledky dizertačnej práce sú príspevkom k vývoju metód na výpočet seizmického pohybu a šírenia seizmických vln v trojrozmerných zložitých modeloch geologických štruktúr. Možno ich zhrnúť nasledovne:

- a. Bola vyvinutá nová konečno-diferenčná schéma 4. rádu presnosti na striedavo usporiadanej sieti pre vnútorné sieťové body. Schéma rieši pohybovú rovnicu viskoelastického kontinua formulovanú v posunutí, rýchlosti a napätí.
- b. Boli porovnané tzv. H a W formulácie metódy antisymetrického zobrazovania napätia používané štandardne na simuláciu rovinného voľného povrchu na striedavo usporiadaných sieťach.
- c. Boli vyvinuté dve nové konečno-diferenčné schémy na simuláciu rovinného voľného povrchu. Jedna schéma využíva antisymetrické zobrazovanie napätia vzhľadom k voľnému povrchu, druhá metóda využíva adjustované konečno-diferenčné aproximácie.
- d. Bola modifikovaná konečno-diferenčná schéma Liu a Archuletu na simuláciu neodrážajúcich hraníc trojrozmernej diferencnej siete.
- e. Bol vypracovaný výpočtový algoritmus založený na vyvinutých konečno-diferenčných schémach. Algoritmus zahŕňa optimalizačné procedúry umožňujúce až rádové zníženie nárokov na pamäť počítača.
- f. Bol vypracovaný príslušný výpočtový program DVS 5.0 v programovacom jazyku Fortran 95. Bol tiež vypracovaný podrobný návod na použitie programu DVS 5.0.

Získané výsledky môžu byť využité pri riešení veľkého radu problémov, ktoré zahŕňajú výpočet seizmického pohybu a šírenia seizmických vln v zložitých modeloch geologických štruktúr.

LITERATÚRA

- Alterman, Z. S. and F.C. Karal (1968). Propagation of elastic waves in layered media by finite-difference methods, *Bull. Seism. Soc. Am.* **58**, 367-398.
- Aoi, S. and H. Fujiwara (1999). 3-D finite-difference method using discontinuous grids, *Bull. Seism. Soc. Am.* **89**, 918-930.
- Boore, D. (1970). Love waves in nonuniform waveguides: finite difference calculations. *J. Geophys. Res.* **75**, 1512-1527.
- Boore, D. (1972). Finite-difference methods for seismic wave propagation in heterogeneous materials. *Methods in Computational Physics*, Vol. 11, B. A. Bolt, ed., Academic Press, New York.
- Bouchon, M. (1981). A simple method to calculate Green's functions for elastic layered media, *Bull. Seism. Soc. Am.* **71**, 959-971.
- Cerjan, C., D. Kosloff, R. Kosloff and M. Reshef (1985). A nonreflecting boundary condition for discrete acoustic and elastic wave equations. *Geophysics* **50**, 705-708.
- Clayton, R. and B. Engquist (1977). Absorbing boundary conditions for acoustic and elastic wave equations. *Bull. Seism. Soc. Am.* **67**, 1529-1540
- Cotton, F., C. Berge, F. Lemeille, A. Pitarka, B. Lebrun, and M. Vallon (1998). Three-dimensional simulation of earthquakes in the Grenoble's basin. *The Effects of Surface Geology on Seismic Motion*, Vol. 2, K. Irikura, K. Kudo, H. Okada, and T. Sasatani, eds., 873-878, Balkema, Rotterdam.
- Coutant, O. (1989). Program of numerical simulation AXITRA. Res. Rep. LGIT (in French), Université Joseph Fourier, Grenoble.
- Emmerman, S.H. and R.A. Stephen (1983). Comment on "Absorbing boundary conditions for acoustic and elastic wave equations," by R. Clayton and B. Engquist. *Bull. Seism. Soc. Am.* **73**, 661-665.
- Emmerich, H. (1992). PSV-wave propagation in a medium with local heterogeneities: a hybrid formulation and its application. *Geophys. J. Int.*, **109**, 54--64.
- Emmerich, H. and M. Korn (1987). Incorporation of attenuation into time-domain computations of seismic wave fields, *Geophysics* **52**, 1252-1264.
- Fäh, D. (1992). A hybrid technique for the estimation of strong ground motion in sedimentary basins. *Diss. ETH Nr. 9767*, Swiss Federal Institute of Technology, Zurich.

- Frankel, A. (1993). Three-dimensional simulations of ground motions in the San Bernardino Vallaey, California, for hypothetical earthquakes on the San Andreas fault, *Bull. Seism. Soc. Am.* **83**, 1020-1041.
- Frankel, A. and W. Stephenson (2000). Three-dimensional simulations of ground motions in the Seattle region for earthquakes in the Seattle fault zone, *Bull. Seism. Soc. Am.* **90**, 1251-1267.
- Fuyuki, M. and Y. Matsumoto (1980). Finite difference analysis of Rayleigh wave scattering at a trench. *Bull. Seism. Soc. Am.* **70**, 2051-2069.
- Geller, R. J. and N. Takeuchi (1998). Optimally accurate second-order time-domain finite difference scheme for the elastic equation of motion: one-dimensional case, *Geophys. J. Int.* **135**, 48-62.
- Graves, R. W. (1993). Modeling three-dimensional site response effects in the Marina district basin, San Francisco, California, *Bull. Seism. Soc. Am.* **83**, 1042-1063.
- Graves, R. W. (1996). Simulating seismic wave propagation in 3D elastic media using staggered-grid finite differences, *Bull. Seism. Soc. Am.* **86**, 1091-1106.
- Graves, R. W., A. Pitarka, and P.G. Sommerville (1998). Ground-motion amplification in the Santa Monica area: Effects of shallow basin-edge structure. *Bull. Seism. Soc. Am.* **88**, 1224-1242.
- Higdon, R. L. (1991). Absorbing boundary conditions for elastic waves. *Geophysics* **56**, 231-241.
- Ilan, A., A. Ungar, and Z. Alterman (1975). An improved representation of boundary conditions in finite difference schemes for seismological problems. *Geophys. J. R. astr. Soc.*, **43**, 727-745.
- Ilan, A. and D. Loewenthal (1976). Instability of finite difference schemes due to boundary conditions in elastic media. *Geophys. Prosp.*, **24**, 431-453.
- Jastram C. and A. Behle (1992). Acoustic modeling on a grid of vertically varying spacing, *Geophys. Prosp.* **40**, 157-170.
- Kelly, K. R., R. W. Ward, S. Treitel and R. M. Alford (1976). Synthetic seismograms: a finite-difference approach. *Geophysics* **41**, 2-27.
- Korn, M. and H. Stöckl (1982). Reflection and transmission of Love channel waves at coal seam discontinuities computed with a finite difference method. *J. Geophys.* **50**, 171-176.

- Kristek, J., P. Moczo, I. Irikura, T. Iwata, H. Sekiguchi (1999). The 1995 Kobe mainshock simulated by the 3D finite differences. *The Effects of Surface Geology on Seismic Motion*, Vol. 3, K. Irikura, K. Kudo, H. Okada, and T. Sasatani, eds., 1361-1368, Balkema, Rotterdam.
- Kristek, J., P. Moczo and R.J. Archuleta (v příprave). Efficient methods to simulate free surface in the 3D 4th-order staggered-grid finite-difference schemes.
- Kummer, B. and A. Behle (1982). Second-order finite-difference modeling of SH-wave propagation in laterally inhomogeneous media. *Bull. Seism. Soc. Am.* **72**, 793-808.
- Levander, A. (1988). Fourth-order finite-difference P-SV seismograms, *Geophysics* **53**, 1425-1436.
- Liu, P.-C., and R. J. Archuleta (2000). Personal communication.
- Luo, Y. and G. Schuster (1990). Parsimonious staggered grid finite-differencing of the wave equation. *Geophys. Res. Let.* **17**, 155-158.
- Madariaga, R. (1976). Dynamics of an expanding circular fault, *Bull. Seism. Soc. Am.* **67**, 163-182.
- Matsushima, S., H. Kawase, T. Sato, R.W. Graves, and P.G. Somerville (1998). 3D simulation of aftershocks of the Hyogo-ken Nanbu earthquake of 1995. *The Effects of Surface Geology on Seismic Motion*, Vol. 2, K. Irikura, K. Kudo, H. Okada, and T. Sasatani, eds., 1129-1136, Balkema, Rotterdam.
- Mitchell, A. R. (1969). *Computational Methods in Partial Differential Equations*, Wiley, London.
- Mizutani, H., R. J. Geller and N. Takeuchi (2000). Comparison of accuracy and efficiency of time-domain schemes for calculating synthetic seismograms. *Phys. Earth Planet. Int.* **119**, 75-97.
- Moczo, P. (1989). Finite-difference technique for SH-waves in 2-D media using irregular grids - application to the seismic response problem. *Geophys. J. Int.* **99**, 321-329.
- Moczo, P. (1998). Introduction to modeling seismic wave propagation by the finite-difference method. Lecture Notes. Kyoto University.
- Moczo, P., E. Bystrický, J. Kristek, J. M. Carcione, and M. Bouchon (1997). Hybrid modeling of P-SV seismic motion at inhomogeneous viscoelastic topographic structures, *Bull. Seism. Soc. Am.* **87**, 1305-1323.

- Moczo, P., J. Kristek and L. Halada (2000). 3D fourth-order staggered-grid finite-difference schemes: Stability and grid dispersion, *Bull. Seism. Soc. Am.* **90**, 587-603.
- Moczo, P., J. Kristek, R.J. Archuleta and L. Halada (2001). 3D Staggered-grid Finite-difference Modeling with Volume Harmonic and Arithmetic Averaging of Elastic Moduli and Densities. *Bull. Seism. Soc. Am.* (zaslané do tlače)
- Moczo, P., J. Kristek and E. Bystrický (2001). Efficiency and optimization of the 3D finite-difference modeling of seismic ground motion, *J. Comp. Acoustics*.
- Moczo, P., P. Labák, J. Kristek, and F. Hron (1996). Amplification and differential motion due to an antiplane 2D resonance in the sediment valleys embedded in a layer over the halfspace, *Bull. Seism. Soc. Am.* **86**, 1434-1446.
- Moczo, P., M. Lucká, J. Kristek and M. Kristeková (1999). 3D displacement finite differences and combined memory optimization, *Bull. Seism. Soc. Am.* **89**, 69-79.
- Muir, F., J. Dellinger, J. Etgen, and D. Nichols (1992). Modeling elastic fields across irregular boundaries. *Geophysics* **57**, 1189-1193.
- Olsen, K. B., R. J. Archuleta, and J. R. Matarese (1995). Magnitude 7.75 earthquake on the San Andreas fault: three-dimensional ground motion in Los Angeles, *Science* **270**, 1628-1632.
- Olsen, K. B., R. Nigbor, and T. Konno (2000). 3D viscoelastic wave propagation in the Upper Borrego Valley, California, constrained by borehole and surface data. *Bull. Seism. Soc. Am.* **90**, 134-150.
- Olsen, K. and G.T. Schuster (1992). Seismic hazard analysis in Salt Lake Valley by finite-difference simulation of three dimensional elastic wave propagation. *Scientific Excellence in High Performance Computing: The 1990 IBM Price Papers*, Vol. I, Sec. 6, 135-165, Baldwin Press, Athens, Georgia.
- Peng, C. and M. N. Toksöz (1994). An optimal absorbing boundary condition for finite difference modeling of acoustic and elastic wave propagation. *J. Acoust. Soc. Am.* **95**, 733-745.
- Peng, C. and M. N. Toksöz (1995). An optimal absorbing boundary condition for elastic wave modeling. *Geophysics* **60**, 296-301.
- Pitarka, A., K. Irikura, and T. Iwata (1997). Modelling of ground motion in the Higashinada (Kobe) area for an aftershock of the 1995 January 17 Hyogo-ken Nanbu, Japan, earthquake. *Geophys. J. Int.* **131**, 231-239.

- Pitarka, A., K. Irikura, T. Iwata, and H. Sekiguchi (1998). Three-dimensional simulation of the near-fault ground motion for the 1995 Hyogo-ken Nanbu (Kobe), Japan, earthquake, *Bull. Seism. Soc. Am.* **88**, 428-440.
- Reynolds, A.C. (1978). Boundary conditions for the numerical solution of wave propagation problems. *Geophysics* **43**, 1099-1110.
- Rodrigues, D. (1993). Large scale modeling of seismic wave propagation. *Doctoral Degree Thesis*. Ecole Centrale Paris, 112 pp.
- Sánchez-Sesma, F. J. and F. Luzón (1995). Seismic response of three-dimensional alluvial valleys for incident P, S, and Rayleigh waves. *Bull. Seism. Soc. Am.* **85**, 269-284.
- Schoenberg, M. and F. Muir (1989). A calculus for finely layered anisotropic media, *Geophysics* **54**, 581-589.
- Sochacki, J., R. Kubichek, J. George, W.R. Fletcher and S. Smithson (1987). Absorbing boundary conditions and surface waves. *Geophysics* **52**, 60-71.
- Sochacki, J. S., J. H. George, R. E. Ewing and S. B. Smithson (1991). Interface conditions for acoustic and elastic wave propagation, *Geophysics* **56**, 168-181.
- Stacey, R. (1988). Improved transparent boundary formulations for the elastic-wave equation. *Bull. Seism. Soc. Am.* **78**, 2089-2097.
- Takenaka, H., T. Furumura, and H. Fujiwara (1998). Recent developments in numerical methods for ground motion simulation. . *The Effects of Surface Geology on Seismic Motion*, Vol. 2, K. Irikura, K. Kudo, H. Okada, and T. Sasatani, eds., 91-101, Balkema, Rotterdam.
- Takeuchi, N. and R. J. Geller (2000). Optimally accurate second order time-domain finite difference scheme for computing synthetic seismograms in 2-D and 3-D media, *Phys. Earth Planet. Int.* **119**, 99-131.
- Virieux, J. (1984). SH-wave propagation in heterogeneous media: velocity-stress finite-difference method, *Geophysics* **49**, 1933-1957.
- Virieux, J. (1986). P-SV wave propagation in heterogeneous media: velocity-stress finite-difference method, *Geophysics* **51**, 889-901.
- Wald, D. and R. W. Graves (1998). The seismic response of the Los Angeles Basin, California, *Bull. Seism. Soc. Am.* **88**, 337-356.
- Yomogida, K. and J. T. Etgen (1993). 3-D wave propagation in the Los Angeles basin for the Whittier-Narrows earthquake, *Bull. Seism. Soc. Am.* **83**, 1325-1344.

- Zahradník, J. (1995). Simple elastic finite-difference scheme, *Bull. Seism. Soc. Am.* **85**, 1879-1887.
- Zahradník, J. and E. Priolo (1995). Heterogeneous formulations of elasto-dynamic equations and finite-difference schemes, *Geophys. J. Int.* **120**, 663-676.
- Zahradník, J. and P. Moczo (1996). Hybrid seismic modeling based on discrete-wavenumber and finite-difference methods. *Pure and Applied Geophysics* **148**, 21-38.

Príloha

Úplná konečno-diferenčná schéma pre vnútorné body siete

$$\begin{aligned}
 u_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} &= u_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} \\
 &+ \frac{\Delta t}{h} \frac{1}{\rho_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^A} \left[a \left(T_{I+\frac{3}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{xx,m} - T_{I-\frac{3}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{xx,m} \right) \right. \\
 &\quad + b \left(T_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{xx,m} - T_{I-\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{xx,m} \right) \\
 &\quad + a \left(T_{I, K+2, L+\frac{1}{2}}^{xy,m} - T_{I, K-1, L+\frac{1}{2}}^{xy,m} \right) \\
 &\quad + b \left(T_{I, K+1, L+\frac{1}{2}}^{xy,m} - T_{I, K, L+\frac{1}{2}}^{xy,m} \right) \\
 &\quad + a \left(T_{I, K+\frac{1}{2}, L+2}^{zx,m} - T_{I, K+\frac{1}{2}, L-1}^{zx,m} \right) \\
 &\quad \left. + b \left(T_{I, K+\frac{1}{2}, L+1}^{zx,m} - T_{I, K+\frac{1}{2}, L}^{zx,m} \right) \right] \\
 &\quad + \frac{\Delta t}{\rho_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^A} F_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{x,m} \quad ,
 \end{aligned}$$

$$\rho_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^A = \frac{1}{h^3} \int_{x_{I-\frac{1}{2}}}^{x_{I+\frac{1}{2}}} \int_{y_K}^{y_{K+1}} \int_{z_L}^{z_{L+1}} \rho \, dx \, dy \, dz \quad ,$$

$$U_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{m+1} = U_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m + \Delta t u_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \quad ,$$

$$\begin{aligned}
v_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} &= v_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} \\
&+ \frac{\Delta t}{h} \frac{1}{\rho_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^A} \left[a \left(T_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{3}{2}, L+\frac{1}{2}}^{yy,m} - T_{I+\frac{1}{2}, K-\frac{3}{2}, L+\frac{1}{2}}^{yy,m} \right) \right. \\
&\quad + b \left(T_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{yy,m} - T_{I+\frac{1}{2}, K-\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{yy,m} \right) \\
&\quad + a \left(T_{I+2, K, L+\frac{1}{2}}^{xy,m} - T_{I-1, K, L+\frac{1}{2}}^{xy,m} \right) \\
&\quad + b \left(T_{I+1, K, L+\frac{1}{2}}^{xy,m} - T_{I, K, L+\frac{1}{2}}^{xy,m} \right) \\
&\quad + a \left(T_{I+\frac{1}{2}, K, L+2}^{yz,m} - T_{I+\frac{1}{2}, K, L-1}^{yz,m} \right) \\
&\quad \left. + b \left(T_{I+\frac{1}{2}, K, L+1}^{yz,m} - T_{I+\frac{1}{2}, K, L}^{yz,m} \right) \right] \\
&\quad + \frac{\Delta t}{\rho_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^A} F_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^{y,m} \quad ,
\end{aligned}$$

$$\rho_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^A = \frac{1}{h^3} \int_{x_I}^{x_{I+1}} \int_{y_{K-\frac{1}{2}}}^{y_{K+\frac{1}{2}}} \int_{z_L}^{z_{L+1}} \rho \, dx \, dy \, dz \quad ,$$

$$V_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^{m+1} = V_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^m + \Delta t v_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \quad ,$$

$$\begin{aligned}
w_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^{m+\frac{1}{2}} &= w_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^{m-\frac{1}{2}} \\
&+ \frac{\Delta t}{h} \frac{1}{\rho_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^A} \left[a \left(T_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{3}{2}}^{zz,m} - T_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L-\frac{3}{2}}^{zz,m} \right) \right. \\
&\quad + b \left(T_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{zz,m} - T_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L-\frac{1}{2}}^{zz,m} \right) \\
&\quad + a \left(T_{I+2, K+\frac{1}{2}, L}^{zx,m} - T_{I-1, K+\frac{1}{2}, L}^{zx,m} \right) \\
&\quad + b \left(T_{I+1, K+\frac{1}{2}, L}^{zx,m} - T_{I, K+\frac{1}{2}, L}^{zx,m} \right) \\
&\quad + a \left(T_{I+\frac{1}{2}, K+2, L}^{yz,m} - T_{I+\frac{1}{2}, K-1, L}^{yz,m} \right) \\
&\quad \left. + b \left(T_{I+\frac{1}{2}, K+1, L}^{yz,m} - T_{I+\frac{1}{2}, K, L}^{yz,m} \right) \right] \\
&\quad + \frac{\Delta t}{\rho_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^A} F_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^{z,m} \quad ,
\end{aligned}$$

$$\rho_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^A = \frac{1}{h^3} \int_{x_I}^{x_{I+1}} \int_{y_K}^{y_{K+1}} \int_{z_{L-\frac{1}{2}}}^{z_{L+\frac{1}{2}}} \rho \, dx \, dy \, dz \quad ,$$

$$W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^{m+1} = W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^m + \Delta t w_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^{m+\frac{1}{2}} \quad .$$

$$\begin{aligned}
T_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{xx,m} &= \frac{1}{h} \left\{ \left(\kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H + \frac{4}{3} \mu_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \right) \right. \\
&\quad \left[a \left(U_{I+2, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I-1, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right. \\
&\quad \left. + b \left(U_{I+1, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right] \\
&\quad + \left(\kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H - \frac{2}{3} \mu_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \right) \\
&\quad \left[a \left(V_{I+\frac{1}{2}, K+2, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I+\frac{1}{2}, K-1, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right. \\
&\quad \left. + b \left(V_{I+\frac{1}{2}, K+1, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right] \\
&\quad + a \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+2}^m - W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L-1}^m \right) \\
&\quad \left. + b \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+1}^m - W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^m \right) \right] \Big\} \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \left(X_{j; I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{xx, m-\frac{1}{2}} + X_{j; I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{xx, m+\frac{1}{2}} \right) ,
\end{aligned}$$

$$\kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H = \left[\frac{1}{h^3} \int_{x_I}^{x_{I+1}} \int_{y_K}^{y_{K+1}} \int_{z_L}^{z_{L+1}} \frac{1}{\kappa} dx dy dz \right]^{-1} ,$$

$$\mu_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H = \left[\frac{1}{h^3} \int_{x_I}^{x_{I+1}} \int_{y_K}^{y_{K+1}} \int_{z_L}^{z_{L+1}} \frac{1}{\mu} dx dy dz \right]^{-1} ,$$

$$\begin{aligned}
X_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{xx, j, m+\frac{1}{2}} &= \frac{2 - \omega_j \Delta t}{2 + \omega_j \Delta t} X_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{xx, j, m-\frac{1}{2}} + \frac{2\omega_j \Delta t}{2 + \omega_j \Delta t} \times \\
&\frac{1}{h} \left\{ \left(K_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j + \frac{4}{3} M_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j \right) \right. \\
&\left[a \left(U_{I+2, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I-1, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right. \\
&+ b \left(U_{I+1, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m \right) \left. \right] \\
&+ \left(K_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j - \frac{2}{3} M_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j \right) \\
&\left[a \left(V_{I+\frac{1}{2}, K+2, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I+\frac{1}{2}, K-1, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right. \\
&+ b \left(V_{I+\frac{1}{2}, K+1, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^m \right) \\
&+ a \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+2}^m - W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L-1}^m \right) \\
&+ b \left. \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+1}^m - W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^m \right) \right] \left. \right\} ,
\end{aligned}$$

$$K_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j = \kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \bar{Y}_{j; I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^\kappa ,$$

$$M_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j = \mu_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \bar{Y}_{j; I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^\mu ,$$

$$\begin{aligned}
T_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{yy,m} &= \frac{1}{h} \left\{ \left(\kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H + \frac{4}{3} \mu_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \right) \right. \\
&\quad \left[a \left(V_{I+\frac{1}{2}, K+2, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I+\frac{1}{2}, K-1, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right. \\
&\quad \left. + b \left(V_{I+\frac{1}{2}, K+1, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right] \\
&\quad + \left(\kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H - \frac{2}{3} \mu_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \right) \\
&\quad \left[a \left(U_{I+2, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I-1, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right. \\
&\quad \left. + b \left(U_{I+1, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right] \\
&\quad + a \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+2}^m - W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L-1}^m \right) \\
&\quad \left. + b \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+1}^m - W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^m \right) \right] \Big\} \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \left(X_{j; I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{yy, m-\frac{1}{2}} + X_{j; I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{yy, m+\frac{1}{2}} \right) ,
\end{aligned}$$

$$\kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H = \left[\frac{1}{h^3} \int_{x_I}^{x_{I+1}} \int_{y_K}^{y_{K+1}} \int_{z_L}^{z_{L+1}} \frac{1}{\kappa} dx dy dz \right]^{-1} ,$$

$$\mu_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H = \left[\frac{1}{h^3} \int_{x_I}^{x_{I+1}} \int_{y_K}^{y_{K+1}} \int_{z_L}^{z_{L+1}} \frac{1}{\mu} dx dy dz \right]^{-1} ,$$

$$\begin{aligned}
X_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{yy, j, m+\frac{1}{2}} &= \frac{2 - \omega_j \Delta t}{2 + \omega_j \Delta t} X_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{yy, j, m-\frac{1}{2}} + \frac{2\omega_j \Delta t}{2 + \omega_j \Delta t} \times \\
&\frac{1}{\hbar} \left\{ \left(K_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j + \frac{4}{3} M_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j \right) \right. \\
&\left[a \left(V_{I+\frac{1}{2}, K+2, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I+\frac{1}{2}, K-1, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right. \\
&+ b \left. \left(V_{I+\frac{1}{2}, K+1, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right] \\
&+ \left(K_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j - \frac{2}{3} M_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j \right) \\
&\left[a \left(U_{I+2, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I-1, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right. \\
&+ b \left. \left(U_{I+1, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right] \\
&+ a \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+2}^m - W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L-1}^m \right) \\
&\left. \left. + b \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+1}^m - W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^m \right) \right] \right\} ,
\end{aligned}$$

$$K_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j = \kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \bar{Y}_{j; I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^\kappa ,$$

$$M_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j = \mu_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \bar{Y}_{j; I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^\mu ,$$

$$\begin{aligned}
T_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{zz,m} &= \frac{1}{h} \left\{ \left(\kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H + \frac{4}{3} \mu_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \right) \right. \\
&\quad \left[a \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+2}^m - W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L-1}^m \right) \right. \\
&\quad \left. + b \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+1}^m - W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^m \right) \right] \\
&\quad + \left(\kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H - \frac{2}{3} \mu_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \right) \\
&\quad \left[a \left(V_{I+\frac{1}{2}, K+2, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I+\frac{1}{2}, K-1, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right. \\
&\quad \left. + b \left(V_{I+\frac{1}{2}, K+1, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right] \\
&\quad + a \left(U_{I+2, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I-1, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m \right) \\
&\quad \left. + b \left(U_{I+1, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right] \Big\} \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \left(X_{j; I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{zz, m-\frac{1}{2}} + X_{j; I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{zz, m+\frac{1}{2}} \right) ,
\end{aligned}$$

$$\kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H = \left[\frac{1}{h^3} \int_{x_I}^{x_{I+1}} \int_{y_K}^{y_{K+1}} \int_{z_L}^{z_{L+1}} \frac{1}{\kappa} dx dy dz \right]^{-1} ,$$

$$\mu_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H = \left[\frac{1}{h^3} \int_{x_I}^{x_{I+1}} \int_{y_K}^{y_{K+1}} \int_{z_L}^{z_{L+1}} \frac{1}{\mu} dx dy dz \right]^{-1} ,$$

$$\begin{aligned}
X_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{zz, j, m+\frac{1}{2}} &= \frac{2 - \omega_j \Delta t}{2 + \omega_j \Delta t} X_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^{zz, j, m-\frac{1}{2}} + \frac{2\omega_j \Delta t}{2 + \omega_j \Delta t} \times \\
&\frac{1}{h} \left\{ \left[K_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j + \frac{4}{3} M_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j \right] \right. \\
&\left[a \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+2}^m - W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L-1}^m \right) \right. \\
&+ b \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+1}^m - W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^m \right) \left. \right] \\
&+ \left(K_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j - \frac{2}{3} M_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j \right) \\
&\left[a \left(V_{I+\frac{1}{2}, K+2, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I+\frac{1}{2}, K-1, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right. \\
&+ b \left(V_{I+\frac{1}{2}, K+1, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^m \right) \\
&+ a \left(U_{I+2, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I-1, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m \right) \\
&+ b \left. \left(U_{I+1, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right] \left. \right\} ,
\end{aligned}$$

$$K_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j = \kappa_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \bar{Y}_{j; I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^\kappa ,$$

$$M_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^j = \mu_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^H \bar{Y}_{j; I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^\mu ,$$

$$\begin{aligned}
T_{I, K, L+\frac{1}{2}}^{xy,m} &= \frac{2}{\hbar} \mu_{I, K, L+\frac{1}{2}}^H \\
&\left[a \left(V_{I+\frac{3}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I-\frac{3}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right. \\
&+ b \left(V_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I-\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^m \right) \\
&+ a \left(U_{I, K+\frac{3}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I, K-\frac{3}{2}, L+\frac{1}{2}}^m \right) \\
&+ b \left. \left(U_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I, K-\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right] \\
&- \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \left(X_{j;I,K,L+\frac{1}{2}}^{xy,m-\frac{1}{2}} + X_{j;I,K,L+\frac{1}{2}}^{xy,m+\frac{1}{2}} \right) ,
\end{aligned}$$

$$\mu_{I, K, L+\frac{1}{2}}^H = \left[\frac{1}{\hbar^3} \int_{x_{I-\frac{1}{2}}}^{x_{I+\frac{1}{2}}} \int_{y_{K-\frac{1}{2}}}^{y_{K+\frac{1}{2}}} \int_{z_L}^{z_{L+1}} \frac{1}{\mu} dx dy dz \right]^{-1} ,$$

$$\begin{aligned}
X_{I, K, L+\frac{1}{2}}^{xy,j,m+\frac{1}{2}} &= \frac{2 - \omega_j \Delta t}{2 + \omega_j \Delta t} X_{I, K, L+\frac{1}{2}}^{xy,j,m-\frac{1}{2}} + \frac{2\omega_j \Delta t}{2 + \omega_j \Delta t} \frac{2}{\hbar} M_{I, K, L+\frac{1}{2}}^j \\
&\left[a \left(V_{I+\frac{3}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I-\frac{3}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right. \\
&+ b \left(V_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I-\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^m \right) \\
&+ a \left(U_{I, K+\frac{3}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I, K-\frac{3}{2}, L+\frac{1}{2}}^m \right) \\
&+ b \left. \left(U_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I, K-\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m \right) \right] ,
\end{aligned}$$

$$M_{I, K, L+\frac{1}{2}}^j = \mu_{I, K, L+\frac{1}{2}}^H \bar{Y}_{j;I, K, L+\frac{1}{2}}^\mu ,$$

$$\begin{aligned}
T_{I+\frac{1}{2}, K, L}^{yz, m} &= \frac{2}{\hbar} \mu_{I+\frac{1}{2}, K, L}^H \\
&\left[a \left(V_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{3}{2}}^m - V_{I+\frac{1}{2}, K, L-\frac{3}{2}}^m \right) \right. \\
&+ b \left(V_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I+\frac{1}{2}, K, L-\frac{1}{2}}^m \right) \\
&+ a \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{3}{2}, L}^m - W_{I+\frac{1}{2}, K-\frac{3}{2}, L}^m \right) \\
&+ b \left. \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^m - W_{I+\frac{1}{2}, K-\frac{1}{2}, L}^m \right) \right] \\
&- \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \left(X_{j; I+\frac{1}{2}, K, L}^{yz, m-\frac{1}{2}} + X_{j; I+\frac{1}{2}, K, L}^{yz, m+\frac{1}{2}} \right),
\end{aligned}$$

$$\mu_{I+\frac{1}{2}, K, L}^H = \left[\frac{1}{\hbar^3} \int_{x_I}^{x_{I+1}} \int_{y_{K-\frac{1}{2}}}^{y_{K+\frac{1}{2}}} \int_{z_{L-\frac{1}{2}}}^{z_{L+\frac{1}{2}}} \frac{1}{\mu} dx dy dz \right]^{-1},$$

$$\begin{aligned}
X_{I+\frac{1}{2}, K, L}^{yz, j, m+\frac{1}{2}} &= \frac{2 - \omega_j \Delta t}{2 + \omega_j \Delta t} X_{I+\frac{1}{2}, K, L}^{yz, j, m-\frac{1}{2}} + \frac{2\omega_j \Delta t}{2 + \omega_j \Delta t} \frac{2}{\hbar} M_{I+\frac{1}{2}, K, L}^j \\
&\left[a \left(V_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{3}{2}}^m - V_{I+\frac{1}{2}, K, L-\frac{3}{2}}^m \right) \right. \\
&+ b \left(V_{I+\frac{1}{2}, K, L+\frac{1}{2}}^m - V_{I+\frac{1}{2}, K, L-\frac{1}{2}}^m \right) \\
&+ a \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{3}{2}, L}^m - W_{I+\frac{1}{2}, K-\frac{3}{2}, L}^m \right) \\
&+ b \left. \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^m - W_{I+\frac{1}{2}, K-\frac{1}{2}, L}^m \right) \right],
\end{aligned}$$

$$M_{I+\frac{1}{2}, K, L}^j = \mu_{I+\frac{1}{2}, K, L}^H \bar{Y}_{j; I+\frac{1}{2}, K, L}^\mu,$$

$$\begin{aligned}
T_{I, K+\frac{1}{2}, L}^{zx, m} &= \frac{2}{\hbar} \mu_{I, K+\frac{1}{2}, L}^H \\
&\left[a \left(U_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{3}{2}}^m - U_{I, K+\frac{1}{2}, L-\frac{3}{2}}^m \right) \right. \\
&+ b \left(U_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I, K+\frac{1}{2}, L-\frac{1}{2}}^m \right) \\
&+ a \left(W_{I+\frac{3}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^m - W_{I-\frac{3}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^m \right) \\
&+ b \left. \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^m - W_{I-\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^m \right) \right] \\
&- \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \left(X_{j; I, K+\frac{1}{2}, L}^{zx, m-\frac{1}{2}} + X_{j; I, K+\frac{1}{2}, L}^{zx, m+\frac{1}{2}} \right) ,
\end{aligned}$$

$$\mu_{I, K+\frac{1}{2}, L}^H = \left[\frac{1}{\hbar^3} \int_{x_{I-\frac{1}{2}}}^{x_{I+\frac{1}{2}}} \int_{y_K}^{y_{K+1}} \int_{z_{L-\frac{1}{2}}}^{z_{L+\frac{1}{2}}} \frac{1}{\mu} dx dy dz \right]^{-1} ,$$

$$\begin{aligned}
X_{I, K+\frac{1}{2}, L}^{zx, j, m+\frac{1}{2}} &= \frac{2 - \omega_j \Delta t}{2 + \omega_j \Delta t} X_{I, K+\frac{1}{2}, L}^{zx, j, m-\frac{1}{2}} + \frac{2\omega_j \Delta t}{2 + \omega_j \Delta t} \frac{2}{\hbar} M_{I, K+\frac{1}{2}, L}^j \\
&\left[a \left(U_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{3}{2}}^m - U_{I, K+\frac{1}{2}, L-\frac{3}{2}}^m \right) \right. \\
&+ b \left(U_{I, K+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}}^m - U_{I, K+\frac{1}{2}, L-\frac{1}{2}}^m \right) \\
&+ a \left(W_{I+\frac{3}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^m - W_{I-\frac{3}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^m \right) \\
&+ b \left. \left(W_{I+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^m - W_{I-\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}, L}^m \right) \right] ,
\end{aligned}$$

$$M_{I, K+\frac{1}{2}, L}^j = \mu_{I, K+\frac{1}{2}, L}^H \bar{Y}_{j; I, K+\frac{1}{2}, L}^\mu .$$