

**3D optimálne presné schémy
na simuláciu
šírenia seizmických vln**

Peter Pažák

2007

**3D optimálne presné schémy
na simuláciu
šírenia seizmických vln**

RIGORÓZNA PRÁCA

Peter Pažák

Univerzita Komenského v Bratislave
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
Katedra astronómie, fyziky Zeme a meteorológie

4.1.9 GEOFYZIKA

Bratislava 2007

Abstrakt

Autor: Peter Pažák

Názov práce: 3D optimálne presné schémy na simuláciu šírenia seizmických vln

Pracovisko: Univerzita Komenského v Bratislave

Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

Katedra astronómie, fyziky Zeme a meteorológie

Komisia pre obhajoby: komisia pre rigorózne konanie z odboru geofyzika

Predseda komisie: doc. RNDr. Sebastián Ševčík, CSc.

Miesto a rok: Bratislava 2007

Rozsah práce: 56 strán

Stupeň odbornej kvalifikácie: Mgr.

Rigorózna práca sa zaoberá presnosťou a efektívnosťou konečno-diferenčného modelovania šírenia seizmických vln.

V prvej časti teoretického rozboru sa venujeme 1D prípadu. Odvodíme 1D optimálne presné schémy na základe všeobecného kritéria minimalizácie chyby pri aplikovaní na vlastné módy. Pre štandardné konvenčné, striedavo usporiadané a optimálne presnú schému analyzujeme numerickú disperziu v 1D prípade. Analýza nám umožňuje interpretovať numerické testy týchto schém. Po odvodení prediktor-korektor schémy vyšetrujeme jej presnosť. Ukazuje sa, že prediktor-korektor schéma má rovnaký rád presnosti ako pôvodná optimálne presná schéma. Nasleduje interpretácia numerických testov na základe analýzy sieťovej disperzie schém. Poukazujeme na súvislosť hodnoty fázového a amplitúdového rozdielu (misfitu) s chybou fázovej rýchlosti.

1D analýza tvorí základ pre teoretický rozbor a odvodenie 3D schém, ktorému sa venujeme v druhej časti. Odvodená 3D schéma má odlišné vlastnosti od skôr publikovanej schémy. Naše odvodenie pomocou Taylorovho rozvoja nám umožňuje skonštruovať operátory, ktoré využívajú podstatne menší počet hodnôt posunutí v časopriestorovej sieti. Súčasne majú vyššiu presnosť a nemenia podmienku stability 3D konvenčnej schémy.

klúčové slová: optimálne presné schémy, konečné diferencie, disperzia, efektívnosť

Predhovor

Metóda konečných diferencií je intenzívne využívanou a vyvíjanou metódou na simulovanie šírenia seizmických vln a šírenia trhliny na zlomovej ploche. Vďaka možnostiam metódy riešiť problémy v komplexných heterogénnych modeloch s relatívne nízkymi výpočtovými nárokmi, počítačové programy implementujúce metódu konečných diferencií patria medzi najefektívnejšie. Efektívnosť znamená dosiahnutie požadovanej presnosti výsledkov s relatívne nízkymi nárokmi na pamäť a výkon počítača, teda aj minimalizáciu výpočtového času.

Rôzne aproximácie používané na odvodenie konečno-diferenčných rovníc vedú na schémy rôznej presnosti a výpočtovej náročnosti. Zjemňovanie časového a priestorového kroku pri diskretizácii znamená zvýšenie presnosti metódy a súčasne nárast počtu potrebných operácií na výpočet. Samozrejme snahou je dosiahnuť čo najmenší pomer náročnosť/presnosť.

V tomto smere sa ako veľmi sľubný sa ukazuje prístup pomocou optimálne presných konečno-diferenčných operátorov. 1D schémy založené na tomto prístupe boli testované a vykazujú výborné vlastnosti. Aj keď znamenajú nárast zložitosti, tento je kompenzovaný výrazným zvýšením presnosti výpočtov.

Napriek tomu, že 1D problém bol už relatívne dobre preskúmaný, zrejme kvôli väčšej zložitosti tohoto prístupu stále existuje málo poznatkov o 2D modelovaní. Publikovaná 3D schéma podľa našich informácií zatiaľ nebola numericky testovaná.

V rigoróznej práci sa preto sústreďíme práve na odvodenie a podrobnú analýzu 1D optimálne presných konečno-diferenčných operátorov, vyšetovanie vlastností získaných optimálne presných a prediktor-korektor schém. Tieto poznatky potom aplikujeme pri odvodení 3D optimálne presných operátorov a 3D optimálne presnej schémy.

Obsah

1	Úvod	11
2	Formulácia problému	13
3	Metóda konečných diferencií	15
	3.1 Aproximácie derivácií	17
	3.2 Konvenčné konečno-diferenčné schémy	19
	3.3 Schémy na striedavo usporiadaných sieťach	20
4	1D optimálne presné konečno-diferenčné schémy	25
	4.1 Odvodenie optimálne presnej konečno-diferenčnej schémy	26
	4.2 Sieťová disperzia optimálne presnej schémy	30
	4.3 Prediktor-korektor schéma na riešenie optimálne presných schém	32
	4.4 Presnosť prediktor-korektor schémy	33
	4.5 Porovnanie výsledkov získaných analýzou a numerickými testami	36
	4.6 Heterogénne optimálne presné schémy	38
5	3D optimálne presné schémy	43
	5.1 Konštrukcia optimálne presnej schémy pomocou konvolúcie	43
	5.2 Konštrukcia optimálne presnej schémy pomocou analýzy chyby aproxi- mácie	44
	5.3 Analýza stability 3D optimálne presnej schémy	49
6	Záver	53
	Literatúra	55

Zoznam obrázkov

3.1	Priestorové usporiadanie premenných v sieťových bunkách konvenčnej, čiastočne striedavo usporiadanej a striedavo usporiadanej schémy. U , V a W sú aproximácie zložiek vektora posunutí, T^{ij} aproximácie zložiek tenzora napätia. Prevzaté z práce Moczo et al. (2007a).....	16
3.2	Priestorové usporiadanie veličín v striedavo usporiadanej sieti.....	22
3.3	Schematicky znázornené určovanie efektívnych materiálových parametrov z hodnôt veličín v okolí bodu aproximácie.	23
4.1	Rozdiel medzi presnou a numerickou rýchlosťou šírenia schém ako funkcia N (počtu krokov na minimálnu vlnovú dĺžku) a p (stabilitného pomeru). Pre optimálne presnú schému sme vykreslili aj graf s desaťnásobne zväčšenými hodnotami.	31
4.2	Časopriestorové pozície používané na aproximácie v schémach	33
4.3	Sieťová disperzia pri šírení v homogénnom prostredí do vzdialenosti 20 dominantných vlnových dĺžok pre konvenčnú schému (Dconv2), striedavo usporiadanú schému (DSStag4) a prediktor-korektor algoritmus pre optimálne presnú schému (Doptm2 = Doptm2PC). Zobrazený je amplitúdový a fázový misfit v závislosti od vzorkovania (N) a pomeru stability p . Prevzaté z práce Kristek a Moczo (2006).....	37
4.4	Presnosť modelovania rozhrania s rýchlostným kontrastom 10 pre konvenčnú schému (Dconv2), striedavo usporiadanú schému (DSStag4) a prediktor-korektor algoritmus pre optimálne presnú schému (Doptm2 = Doptm2PC). Zobrazený je amplitúdový a fázový rozdiel v závislosti od vzorkovania (N) a vzdialenosti od rozhrania Δ . Prevzaté z práce Kristek a Moczo (2006). ...	40
5.1	Členy v Taylorovom rozvoji E_x . Kvôli skráteniu zápisu sú zložky posunutia označené $u_x \equiv u$, $u_y \equiv v$, $u_z \equiv w$	47
5.2	Štruktúra nenulových koeficientov operátora $\mathbf{G}_{I,J,K}^m$	48
5.3	Štruktúra nenulových koeficientov operátora $\mathbf{H}_{I,J,K}^m$	48
5.4	Vizualizácia nezmiešaných 3D optimálne presných operátorov.	49
5.5	Vizualizácia zmiešaných 3D optimálne presných operátorov.	50

1 Úvod

Materiál, ktorý tvorí zemskú kôru, možno z reologického hľadiska približne charakterizovať ako viskoelastické prostredie. Podľa toho, aká je časová škála procesov, ktoré v zemskej kôre prebiehajú, sa horninový materiál môže správať ako vysokoviskózna kvapalina pri dlhodobom pôsobení napätí alebo ako temer ideálne elastické teleso pri vysokofrekvenčnom pohybe.

Na základe porovnania časovej škály procesu s relaxačným časom charakteristickým pre daný materiál možno zistiť, v ktorom režime deje prebiehajú. Relaxačný čas materiálu zemskej kôry je rádovo 10^6 -krát dlhší, ako relaxačný čas materiálu plášťa. Preto na zemskú kôru pôsobí najvrchnejšia časť plášťa, ktorá je v konvektívnom pohybe, napätiami, ktoré spôsobujú kumuláciu napätí a deformácie v kôre. Na rozdiel od plášťa v kôre napätia nerelaxujú tečením, ale po nakumulovaní dostatočného napätia sa kôra správa krehko. Vytvárajú sa buď nové trhliny a zlomové plochy, alebo dochádza k posunom na už existujúcich zlomoch. Pri týchto procesoch je do okolia zlomovej plochy uvoľnená tepelná energia a energia vo forme seizmických vĺn.

Šírenie seizmických vĺn v Zemi môžeme modelovať ako šírenie vĺn vo viskoelastickom kontinuu. To umožňuje zahrnúť efekt útlmu, ktorý je približne konštantný v širokom intervale frekvencií. Z metodologického hľadiska je však vždy potrebné rozvinúť výpočtovú metódu najprv v dokonale elastickom prípade. Pretože analýza v tomto základnom prípade ešte nebola ukončená, v práci sa budeme zaoberať dokonale elastickým prípadom.

2 Formulácia problému

Základný prípad, pre ktorý numerické metódy testujeme, je model šírenia seizmických vln v dokonale elastickom izotropnom homogénnom kontinuu. Pretože elementy kontinua sa z pôvodných pozícií posúvajú len málo, deformovanie prostredia je možné uvažovať ako malú zmenu stavu pred deformáciou. V takom prípade možno matematicky úlohu formulovať ako problém riešenia systému parciálnych diferenciálnych rovníc – Lamèovej pohybovej rovnice kontinua

$$\rho \ddot{u}_i - (\lambda + \mu) u_{j,ji} - \mu u_{i,jj} - f_i = 0, \quad i, j \in \{x, y, z\}, \quad (2.1)$$

kde u_i sú zložky poľa posunutia, ρ je hustota, λ a μ Lamèove elastické koeficienty a f_i zložky hustoty objemovej sily. Priestorová derivácia je označovaná $u_{i,j}$, časová derivácia \dot{u}_i . Hľadanou neznámou veličinou sú zložky vektora posunutia u_i , preto tento zápis je nazývaný formulácia v posunutiach. Okrem tejto formulácie budeme používať aj formuláciu v posunutiach a napätiach,

$$\rho \ddot{u}_i - \sigma_{ij,j} - f_i = 0, \quad (2.2)$$

$$\sigma_{ij} = \lambda u_{k,k} \delta_{ij} + \mu(u_{i,j} + u_{j,i}), \quad i, j, k \in \{x, y, z\}, \quad (2.3)$$

kde σ_{ij} sú zložky tenzora napätia. Aby bola úloha korektne definovaná, musíme spolu s rovnicou (2.1) definovať počiatočné a okrajové podmienky. Zvyčajne sa uvažuje počiatočný stav s nulovými posunutiami a rýchlosťami:

$$u_i(x_j, 0) = 0 \quad (2.4)$$

$$\dot{u}_i(x_j, 0) = 0. \quad (2.5)$$

Pri realistickom modelovaní je samozrejme nutné uvažovať heterogénnu formu rovnice (2.1) s priestorovo premennými elastickými koeficientami. Ďalej v mnohých prípadoch je vhodné uvažovať okrajovú podmienku nulovej normálovej zložky vektora napätia na voľnom povrchu, ktorý aproximuje rozhranie medzi horninami a atmosférou.

Druhým druhom hraníc najčastejšie ohraničujúcim model sú tzv. neodrážajúce hranice. Je potrebné ich používať, pokiaľ problém riešime na umelo ohraničenej oblasti a

vnútri oblasti chceme získať výsledok zodpovedajúci šíreniu do neobmedzeného homogénneho prostredia za hranicou – okrajová podmienka neodrážajúcich hraníc je odvodená špeciálne na redukciu odrazov od hraníc modelu.

V tejto práci sa aproximáciami pri voľnom povrchu ani neodrážajúcimi hranicami zaoberať nebudeme. Na okraji modelu predpíšeme najjednoduchšie implementovateľnú okrajovú podmienku nulových posunutí. Budeme predpokladať, že model v počítači je dostatočne veľký na to, aby sme mohli vykonať základné numerické testy bez ich znehodnotenia odrazmi od pevnej hranice. Komplikovanejšou implementáciou špecifických okrajových podmienok sa budeme zaoberať o úspešnom zvládnutí modelovania šírenia v oblasti ďaleko od hraníc modelu.

3 Metóda konečných diferencií

Systém lineárnych parciálnych diferenciálnych rovníc (2.1) je vhodné v realistických prípadoch riešiť numericky, pretože materiálové parametre sú zložitými priestorovými funkciami, súčasne okrajové podmienky sú často predpísané na komplikovaných rozhraniach. V tejto práci sa zaoberáme metódou konečných diferencií (FDM - finite-difference method), pretože:

- je efektívna: na dosiahnutie požadovaného výsledku má v porovnaní s inými metódami relatívne malé pamäťové nároky a nároky na počet aritmetických operácií
- je možné ju pomerne jednoducho implementovať do výpočtových programov
- je dobre prispôsobiteľná na rôzne typy úloh
- je možné ňou simulovať pohyb v relatívne zložitých heterogénnych modeloch

Problematikou metódy konečných diferencií sa zaoberajú viaceré monografické publikácie, dobrý prehľad o súčasnom stave v konečno-diferenčnom modelovaní dáva napr. práca Moczo et al. (2007a). Autori sa sústredili na konečno-diferenčné modelovanie pomocou explicitných schém riešených v časovej oblasti, ktoré je najčastejšie používané.

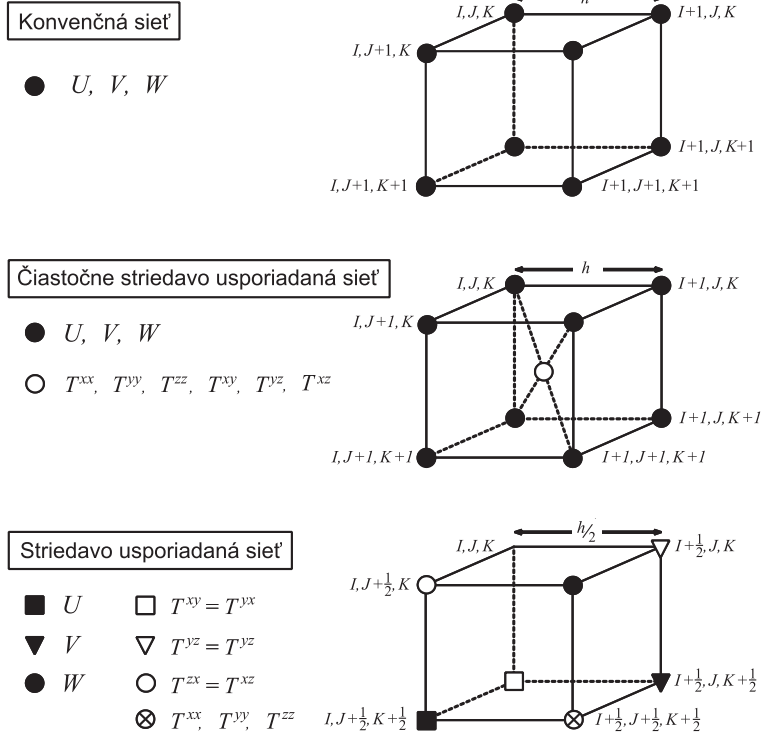
Metóda konečných diferencií umožňuje hľadať hodnoty neznámeho posunutia na základe konštrukcie diskkrétnej aproximácie rovníc (2.1), počiatkovej podmienky (väčšinou nulové posunutia aj rýchlosti) a okrajových podmienok (voľný povrch, neodrážajúce hranice).

Pri aproximácii postupujeme tak, že namiesto platnosti (2.1) v každom priestorovom bode a čase požadujeme splnenie týchto rovníc v bodoch zvolenej časovo-priestorovej siete. Najjednoduchšie aj najprirodzenejšie je v týchto bodoch siete uchovávať aj premenné - diskkrétne aproximácie hodnôt spojitých funkcií. Používajú sa rôzne usporiadania, najčastejšie používané sú zobrazené na obr. 3.1.

Operátory v rovniciach (2.1),

$$\mathcal{L}_i\{u_k\} = \rho \ddot{u}_i - (\lambda + \mu) u_{k,ki} - \mu u_{i,kk}, \quad i, k \in \{x, y, z\}, \quad (3.1)$$

obsahujú priestorové a časové derivácie spojitých funkcií. V diskkrétnej aproximácii derivácie nahrádzame konečno-diferenčnými operátormi, ktoré ich aproximujú. To znamená, že spojité diferenciálne operátory \mathcal{L}_i , ktoré pôsobia na funkcie u_k , nahradíme



Obr. 3.1. Priestorové usporiadanie premenných v sieťových bunkách konvenčnej, čiastočne striedavo usporiadanej a striedavo usporiadanej schémy. U, V a W sú aproximácie zložiek vektora posunutí, T^{ij} aproximácie zložiek tenzora napätia. Prevzaté z práce Moczo et al. (2007a).

konečno-diferenčnými operátormi L_i pôsobiacimi na hodnoty posunutia $[u_k]_{I,J,K}^m$. Diskretizáciu posunutí môžeme symbolicky zapísať:

$$u_k(t_m, x_I, y_J, z_K) \rightarrow [u_k]_{I,J,K}^m. \quad (3.2)$$

Operátory L_i budú matice alebo tenzory koeficientov, operáciu pôsobenia budeme nazývať konvolúcia, pričom pôjde o sumu posunutí vynásobených príslúchajúcimi prvkami matice operátora. Konečno-diferenčnú aproximáciu rovníc (2.1) môžeme zapísať:

$$\mathcal{L}_i\{u_k\} - f_i = 0 \rightarrow L_i\{[u_k]_{I,J,K}^m\} - [f_i]_{I,J,K}^m = 0. \quad (3.3)$$

Aby konečno-diferenčný systém rovníc dobre aproximoval spojité systém a bolo pomocou neho možné získať približné riešenie s požadovanou presnosťou, musí spĺňať nasledujúce podmienky:

- konzistencia - pri znižovaní časového a priestorového kroku v limite dostávame spojité operátory
- stabilita - pre problémy s ohraničeným riešením aj konečno-diferenčné riešenie je ohraničené

- konvergencia - pri zmešovaní časového a priestorového kroku sa chyba konečno-diferenčného riešenia zmešuje

pričom Laxova veta o ekvivalencii hovorí, že konzistencia a stabilita sú ekvivalentné konvergencii.

Operátory L_i je veľmi vhodné konštruovať použitím rozvoja do Taylorovho radu.

3.1 Aproximácie derivácií

Ďalej budeme uvažovať tzv. rovnomerné siete, t.j. siete s priestorovým krokom

$$\Delta x = \Delta y = \Delta z = h.$$

Časový krok budeme označovať Δt .

Ako príklad uvedieme hľadanie aproximácie druhej priestorovej derivácie druhého rádu presnosti (rád aproximácie bude vysvetlený na konci príkladu) v jednorozmernom prípade. Je možné overiť, že konečno-diferenčná schéma musí zahŕňať aspoň tri body. Súčasne o hodnote derivácie v danom bode najlepšiu informáciu možno získať z bodov, ktoré sú k nemu najbližšie. Na rovnomernej sieti teda volíme body x , $x - h$, $x + h$:

$$A = a_1 u_{I-1}^m + a_2 u_I^m + a_3 u_{I+1}^m. \quad (3.4)$$

Každé posunutie uvažujeme ako funkčnú hodnotu posunutia v sieťovom bode vzdialenom od stredu aproximácie o (v tomto prípade celočíselný) násobok sieťového kroku:

$$u_{I+k_p}^m \leftrightarrow u(t_m, x_I + k_p h).$$

Taylorov rozvoj (Taylor expansion = TE) so stredom (t_m, x_I) aproximácie (3.4) s takto uvažovanými posunutiami dáva

$$\text{TE}_h\{A\} = a_1 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-h)^j}{j!} \frac{\partial^j u}{\partial x^j}(t_m, x_I) + a_2 u(t_m, x_I) + a_3 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{h^j}{j!} \frac{\partial^j u}{\partial x^j}(t_m, x_I).$$

j -tu deriváciu násobí h^j , koeficienty pri prvých členoch sú nasledovné:

$$\begin{aligned} \text{TE}_h\{A\} = & (a_1 + a_2 + a_3)u + h(a_3 - a_1)\partial_x u + h^2 \frac{a_1 + a_3}{2} \partial_x^2 u + \\ & + h^3 \frac{a_3 - a_1}{6} \partial_x^3 u + h^4 \frac{a_1 + a_3}{24} \partial_x^4 u + O(h^5). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Aby A bolo konzistentnou aproximáciou druhej derivácie, musí platiť:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \text{TE}_h\{A\} = \partial_x^2 u. \quad (3.6)$$

Preto budeme požadovať

$$\begin{aligned} a_1 + a_2 + a_3 &= 0, \\ h(a_3 - a_1) &= 0, \\ h^2 \frac{a_1 + a_3}{2} &= 1. \end{aligned}$$

Máme tri neznáme koeficienty, preto môžeme stanoviť maximálne tri rovnice pre ne. Hľadanie koeficientov aproximácie možno interpretovať tak, že sa snažíme eliminovať členy s menšími mocninami kroku h , pretože pri aplikovaní metódy použijúc malú ale nenulovú hodnotou h tak dostaneme menšiu chybu aproximácie. Riešením získame:

$$a_1 = a_3 = \frac{1}{h^2} \quad a_2 = -\frac{2}{h^2} \quad A = \frac{u_{I-1}^m - 2u_I^m + u_{I+1}^m}{h^2}.$$

Po dosadení do rovnice (3.5) dostaneme:

$$\text{TE}_h\{A\} = \partial_x^2 u + \frac{h^2}{12} \partial_x^4 u + O(h^4). \quad (3.7)$$

Môžeme konštatovať, že sme odvodili konzistentnú aproximáciu druhej priestorovej derivácie, jej rád je 2 - najnižšia mocnina h v chybe. Uvedený postup odvodenia koeficientov pre schému (3.4) slúži ako ilustrácia analogických odvedení v celej práci, ktoré už detailne nebudeme uvádzať.

Na rovnomernej sieti je zvýšenie rádu aproximácie možné len za cenu zväčšovania rozsahu konečno-diferenčného operátora čo však v úlohách, kde vystupuje aj čas znamená horšie vlastnosti z hľadiska stability (Iserles a Strang, 1983). Preto vo väčšine prípadov volíme čo najmenší rozsah operátora. Ak máme možnosť voľby medzi centrovanou a necentrovanou aproximáciou, zvolíme centrovanú, pretože symetria často znamená možnosť dosiahnuť vyššiu presnosť. Typický príklad, kedy centrované aproximácie nie je možné použiť, je aproximovanie okrajových podmienok, pretože hodnoty za hranicou nie sú k dispozícii. V metóde konečných diferencií aproximovanie okrajových podmienok je všeobecne náročnejšie ako zostavenie vnútornej schémy.

Uvedený prístup rozvoja do Taylorovho radu s požadovaním príslušnej štruktúry je možné s výhodou využiť pri odvodeniach optimálne presných schém. Hlavné kroky metódy možno zhrnúť do bodov:

- voľba rádu aproximácie,
- voľba časovo-priestorových bodov vstupujúcich do aproximácie,
- symbolický Taylorov rozvoj,
- zostavenie systému rovníc pre koeficienty schémy a jeho riešenie.

Pritom prvé dva body sú previazané a ovplyvňujú sa.

3.2 Konvenčné konečno-diferenčné schémy

Konvenčné schémy aproximujú formuláciu v posunutiach (2.1). Štandardne sa časová aj priestorová derivácia aproximuje s presnosťou do druhého rádu presnosti. Aproximácie vyšších rádov v priestore, ktoré využívajú väčší počet hodnôt posunutí, sa využívajú v menšej miere pretože zväčšený rozsah spôsobuje zmenšenie intervalu stability schémy (Iserles a Strang, 1983) a pre schémy v heterogénnom prostredí je pomerne komplikované odvodiť koeficienty aproximácie.

Štandardne sa pri konečno-diferenčnom aproximovaní rovnice (2.1) aproximujú osobitne priestorové a časové derivácie:

$$\ddot{u} = \frac{u_{I,J,K}^{m+1} - 2u_{I,J,K}^m + u_{I,J,K}^{m-1}}{\Delta t^2} + O(\Delta t^2), \quad (3.8)$$

$$u_{,xx} = \frac{u_{I+1,J,K}^m - 2u_{I,J,K}^m + u_{I-1,J,K}^m}{h^2} + O(h^2), \quad (3.9)$$

$$u_{,xy} = \frac{u_{I+1,J+1,K}^m + u_{I-1,J-1,K}^m - u_{I+1,J-1,K}^m - u_{I-1,J+1,K}^m}{4h^2} + O(h^2). \quad (3.10)$$

Uviedli sme iba jednu aproximáciu z každého typu, ktorý v rovnici (2.1) vystupuje. Aproximovanie časovej derivácie podľa rovnice (3.8) vedie na dvojhladinovú schému – na výpočet nasledujúcej časovej hladiny je potrebné mať v pamäti uložené dve predchádzajúce hladiny.

Von Neumannova analýza pre konvenčné schémy dáva podmienku stability

$$\Delta t \leq \frac{h}{\sqrt{v_P^2 + v_S^2}}, \quad (3.11)$$

kde $v_P = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho}$ je rýchlosť šírenia P vln a $v_S = \sqrt{\mu/\rho}$ rýchlosť šírenia S vln.

Analýza disperzie konvenčnej schémy ukazuje, že jej presnosť sa značne znižuje s narastajúcim Poissonovým pomerom. Pri modelovaní lokálnych efektov je často nutné

uvažovať pomer rýchlostí šírenia v sedimentoch $v_P/v_S = 10$; hodnoty Poissonovho pomeru sú teda až $\nu = 0.495$. Relatívna chyba riešenia sa so zvyšovaním hodnoty Poissonovho pomeru dramaticky zväčšuje (Marfurt, 1984). Preto sa v modelovaní prešlo od pôvodne často využívaných konvenčných schém na striedavo usporiadané schémy, ktoré nevykazujú takéto správanie v prípade veľkých Poissonových pomerov (Virieux, 1984, 1986).

Jednou z dôležitých predností metódy konečných diferencií je práve možnosť modelovať seizmický pohyb v komplexných štruktúrne zložitých modeloch. Rovnicu, ktorú je potrebné aproximovať v takomto prípade, dostaneme, ak do rovnice (2.2) dosadíme rovnicu (2.3) a uvažujeme materiálové parametre ako funkcie priestorových súradníc:

$$\rho \ddot{u}_i - (\lambda u_{k,k})_{,i} - (\mu u_{i,j})_{,j} - (\mu u_{j,i})_{,j} - f_i = 0. \quad (3.12)$$

Rovnica (3.12) obsahuje členy typu $(\mu u_{i,j})_{,j}$ a $(\lambda u_{k,k})_{,i}$. Kým aproximovanie nezmiešanej derivácie bolo teoreticky odvodené a v schémach používané od počiatkov modelovania konvenčnými schémami, aproximovanie zmiešanej derivácie je komplikovanejšie. Boli navrhnuté viaceré prístupy s rôznou presnosťou. Zahradník a Priolo (1995) a Moczo et al. (1999) prezentujú dobré vlastnosti schémy, ktorá pri aproximáciách využíva efektívne materiálové parametre definované pomocou čiarových integrálov. Napriek dobrým výsledkom pre určité typy problémov, konvenčné schémy vykazujú nestability v modeloch so značnými rýchlostnými kontrastami, čo prispelo k tomu, že sa postupne prešlo na modelovanie na striedavo usporiadaných sieťach.

3.3 Schémy na striedavo usporiadaných sieťach

Centrované aproximácie umožňujú vyjadriť prvú deriváciu v strede medzi dvoma bodmi (pre štvrtý rád štyrmi bodmi), v ktorých máme diskkrétne aproximácie veličín umiestnené, pričom v samotnom bode aproximácie nepotrebuje mať veličinu k dispozícii. Systém (2.2) a (2.3) obsahuje len prvé priestorové derivácie. Tieto zistenia nás privádzajú na myšlienku mať diskkrétne aproximácie premenných a derivácií “striedavo” usporiadané v priestore (obr. 3.1 a obr. 3.2). Takto dostávame schému v posunutiach a napätiach. Pokiaľ zderivujeme Hookov zákon podľa času a použijeme namiesto po-

sunutí ako premennú rýchlosti posunutí môžeme zaviesť striedavé usporiadanie aj v časovom smere a dostaneme schému v rýchlostiach a napätiach.

Pretože na rozdiel od konvenčných schém schémy na striedavo usporiadaných sieťach využívajú formuláciu v napätiach a posunutiach alebo napätiach a rýchlostiach, okrem posunutí v konečno-diferenčných aproximáciách vystupujú ako neznáme aj napätia a rýchlosti posunutí. V jednom kroku teda počítame aproximáciu napätí a z nej aproximáciu posunutí – to je rozdiel oproti formulácii v posunutiach, kde sa v jednom kroku použije len jedna aproximácia.

Pre schému aproximujúcu formuláciu v napätiach a posunutiach budeme v rovniciach (2.2) a (2.3) aproximovať prvé priestorové derivácie posunutí a napätí použitím vzťahov

$$\psi_{,x} = \frac{\phi_{I+1/2,J,K} - \phi_{I-1/2,J,K}}{h} + O(h^2), \quad (3.13)$$

$$\psi_{,x} = \frac{9}{8} \frac{\phi_{I+1/2,J,K} - \phi_{I-1/2,J,K}}{h} - \frac{1}{24} \frac{\phi_{I+3/2,J,K} - \phi_{I-3/2,J,K}}{h} + O(h^4), \quad (3.14)$$

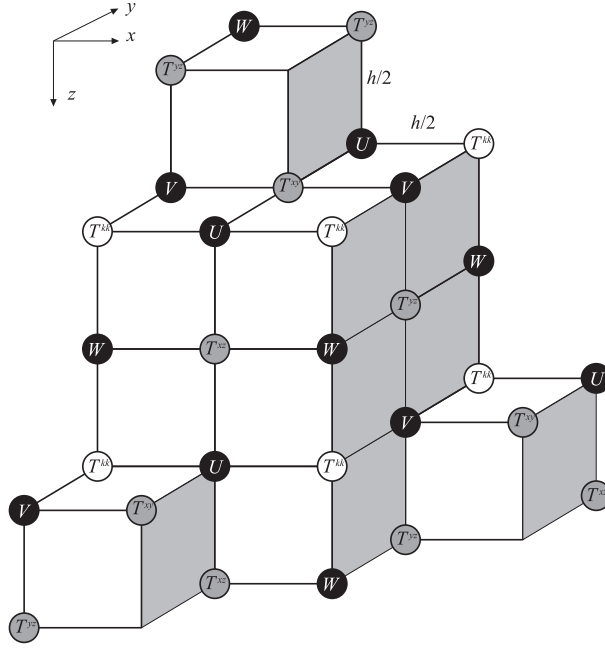
v prípade 2. a 4. rádu, ϕ označuje jednu zložku posunutia, analogické sú vzťahy pre derivácie podľa inej súradnice.

Na obr. 3.1 vidieť, že aproximácie napätia sú umiestnené v bodoch s poločíselnými indexmi a posunutia s celočíselnými. V rovniciach (3.13) a (3.14) teda indexy I , J a K pri aproximovaní napätí zvolíme poločíselné.

Mysleným priestorovým opakovaním základnej bunky striedavo usporiadaných sietí z obr. 3.2 môžeme overiť, že vďaka použitému usporiadaniu všetky potrebné aproximácie možno počítať a súčasne je toto usporiadanie aj veľmi úsporné čo sa týka pamäte počítača.

Druhú časovú deriváciu je vhodné aproximovať štandardne (rovnica 3.8) – podobne ako v prípade konvenčnej schémy dostaneme dvojhladinovú schému.

Pre schému aproximujúcu formuláciu v rýchlostiach a napätiach je aproximovanie derivácií v priestore totožné. Namiesto druhej časovej derivácie však aproximujeme prvé časové derivácie s presnosťou do druhého rádu centrálnymi aproximáciami (rovnica 3.13). V takto usporiadanej schéme z časovej hladiny, kde máme len aproximácie napätí, počítame rýchlosti a naopak. Pokiaľ potrebujeme získať aj hodnoty posunutia, je vhodné aproximovať schému v posunutiach, rýchlostiach a napätiach.



Obr. 3.2. Priestorové usporiadanie veličín v striedavo usporiadanej sieti.

Analýza stability a disperzné vzťahy pre schému štvrtého rádu aproximujúcu formuláciu v posunutíach a napätiach na striedavo usporiadanej sieti sú v práci Moczo et al. (2000). Autori analýzou stability von Neumannovou metódou dostávajú dve podmienky stability – jednu pre P vlny, druhú pre S vlny:

$$\Delta t \leq \frac{6}{7\sqrt{3}} \frac{h}{\alpha}, \quad (3.15)$$

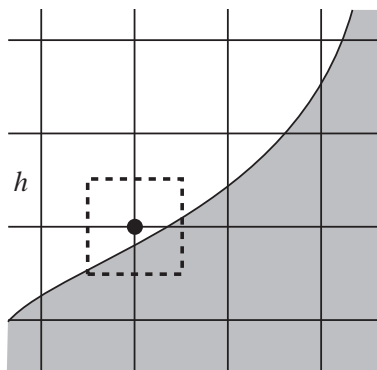
$$\Delta t \leq \frac{6}{7\sqrt{3}} \frac{h}{\beta}. \quad (3.16)$$

Pretože $\alpha > \beta$, splnenie podmienky (3.15) zaručuje aj splnenie (3.16). Preto sa ako podmienka stability berie podmienka (3.15).

Autori skúmajú tiež kumulatívny efekt sieťovej disperzie v závislosti od vzorkovania, Poissonovho pomeru a smeru šírenia v sieti. Keďže pre vzorkovanie $\lambda_{\min}/h = 5$ sa sieťová rýchlosť pri simulácii šírenia seizmických vln v modeli s rozmerom typickým pre lokálne štruktúry môže líšiť od skutočnej až o 5%, autori odporúčajú používať minimálne 6 sieťových krokov na minimálnu vlnovú dĺžku. Zároveň konštatujú, že pre vzorkovanie $\lambda_{\min}/h = 5$ a $\lambda_{\min}/h = 6$ v schéme štvrtého rádu je disperzia menšia, ako pre pomery $\lambda_{\min}/h = 10$ a $\lambda_{\min}/h = 12$ v schéme druhého rádu v priestore.

Na rozdiel od konvenčných schém, pri striedavo usporiadaných schémach nedochádza k problematickému zväčšovaniu disperzie s rastúcim Poissonovým pomerom. Najväčšiu disperziu má schéma v smere sieťových čiar, najmenšiu v diagonálnom smere.

V heterogénnom prostredí je priestorovú závislosť materiálových parametrov potrebné zahrnúť do konečno-diferenčnej schémy. V hladko heterogénnom prostredí je možné ako sieťové hodnoty voliť priamo bodové hodnoty daného parametra. Ak by sme chceli problém riešiť bez takéhoto priblíženia, bolo by nutné konštruovať schému špecifickú pre každý problém. Zavedením tzv. efektívnych materiálových parametrov možno odvodiť schému, ktorá je formálne rovnaká, ako pre homogénne prostredie, modifikované materiálové parametre sú však určované tak, aby čo najlepšie aproximovali okrajové podmienky pokiaľ sa jedná o body v blízkosti a na rozhraniach - tzv. heterogénna formulácia pohybovej rovnice.



Obr. 3.3. Schematicky znázornené určovanie efektívnych materiálových parametrov z hodnôt veličín v okolí bodu aproximácie.

Odvozenie a numerické testy heterogénnej formulácie aplikovanej pre schémy na striedavo usporiadaných sieťach je v práci Moczo et al. (2002). Heterogénna formulácia je najskôr odvodená pre jednoduchý model 1D spojeného kontaktu dvoch elastických polpriestorov s rôznymi materiálovými parametrami. Postup vedie na aritmetické priemerovanie hustoty a harmonické priemerovanie modulu pružnosti. Na základe týchto poznatkov sa potom analyzuje 3D problém. Pre rovinný spojený kontakt dvoch polpriestorov by si prístup pomocou efektívnych materiálových parametrov vyžadoval poznať veličiny v sieti aj v tých sieťových bodoch, pre ktoré ich nemáme definované. Preto autori odvodili prístup, ktorý za ďalších zjednodušujúcich predpokladov umož-

ňuje efektívne materiálové parametre určovať tak, aby heterogénnu formuláciu bolo možné aproximovať na striedavo usporiadanej sieti. Podobne ako v 1D prípade sú efektívne materiálové parametre určené pomocou aritmetických a harmonických priemerov v oblastiach centrovaných v mieste pozície parametra v sieti (obr. 3.3).

Numerické testy ukazujú, že schéma presnejšie modeluje prostredie s rozhraním v ľubovoľnej polohe voči sieťovým rovinám v porovnaní zo všetkými používanými prístupmi.

4 1D optimálne presné konečno-diferenčné schémy

Pri výpočtoch na počítačoch sa výpočtové nároky charakterizujú požiadavkami na operačnú pamäť a množstvom potrebných aritmetických operácií (to určuje výpočtový čas). Pri optimalizácii výpočtov je cieľom, aby sme výsledky s potrebnou presnosťou dostali s čo najmenšími výpočtovými nárokmi. Je dôležité zaručiť, že odchýlka získaného od presného riešenia nepresiahne určitú hranicu (posudzovanie miery zhody medzi presným a približným riešením rozoberieme neskôr). Optimálnymi metódami budeme nazývať metódy, ktoré umožňujú získať výsledok s požadovanou presnosťou s minimálnymi výpočtovými nárokmi.

Z úvah v predchádzajúcich kapitolách je zrejmé, že je možné zostaviť veľké množstvo konečno-diferenčných schém, ktorými získame približné riešenie systému (2.1) alebo (2.2) a (2.3). Prirodzene sa môžeme zaujímať o to, akým spôsobom možno identifikovať a konštruovať optimálne schémy.

Ukazuje sa, že existujú také konečno-diferenčné schémy, ktoré používajú relatívne malý počet časopriestorových bodov v okolí bodu aproximácie a súčasne majú výrazne vyššiu presnosť. Oproti štandardným konečno-diferenčným schémam majú teda vyššie výpočtové nároky, tie sú ale kompenzované vysokou presnosťou, ktorá zaručuje efektívnosť schémy. Kolektív okolo Roberta J. Gellera, ktorí sú autormi tohoto prístupu ich nazýva optimálne presné konečno-diferenčné schémy. Presný význam tohoto termínu budeme komentovať v kapitole 4.5.

Všeobecné kritérium, na základe ktorého budeme optimálne presné operátory konštruovať, je odvodené v práci Geller a Takeuchi (1995). Autori v nej na základe získaného kritéria optimalizujú operátory pre metódu DSM (Direct Solution Method, Geller a Ohminato, 1994), ktorá rieši slabú formu problému vo frekvenčnej oblasti.

Pre použitie v metóde konečných diferencií (ale aj iných metódach) v časovej oblasti je kritérium možné sformulovať takto: chyba numerického operátora pri aplikovaní na vlastné módy (ortogonálny systém riešení pohybovej rovnice bez silového člena) musí byť minimálna. V seizmológii možno v čase konštantnú objemovú silu (gravitácia) uvažovať ako počiatočnú podmienku – zahrnúť ju do statického riešenia a riešiť rovnicu bez silového člena. Z teórie riešenia parciálnych diferenciálnych rovníc je známe, že

riešenie homogénnej rovnice je lineárnou kombináciou vlastných módov. Ak riešenie je lineárnou kombináciou vlastných módov a minimalizujeme chybu pre každý mód, priamo vidíme, že aj všeobecné riešenie bude mať minimálnu chybu. Geller a Takeuchi (1995) ukázali, že kritérium je rovnaké aj v prípade nenulovej objemovej sily. V našom prípade je vlnenie generované plošnými silami a pohybom hranice kontinua, teda aj vlnový pohyb je zrejme superpozíciou pohybov prislúchajúcich jednotlivým vlastným módom.

Práca Geller a Takeuchi (1998) aplikuje odvodené kritérium v metóde konečných diferencií v časovej oblasti a tiež uvádza prediktor-korektor algoritmus na približné riešenie získanej implicitnej schémy. Aby sme dobre ilustrovali základné prístupy pri konštruovaní optimálne presných schém a spôsobu ich riešenia prediktor-korektor algoritmom, budeme sledovať základnú myšlienku z článku Geller a Takeuchi (1998) a zameriame sa najskôr na jednorozmerný prípad.

4.1 Odvodenie optimálne presnej konečno-diferenčnej schémy

Vychádzať budeme z konvenčnej aproximácie 1D pohybovej rovnice:

$$\begin{aligned} FDE = & \rho \frac{1}{\Delta^2 t} [u(t + \Delta t, x) - 2u(t, x) + u(t - \Delta t, x)] \\ & - C \frac{1}{h^2} [u(t, x + h) - 2u(t, x) + u(t, x - h)] \doteq 0. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Štruktúra rozvoja do Taylorovho radu podľa časového aj priestorového kroku je

$$\begin{aligned} TE_{h,\Delta t} \{FDE\} = & \rho \ddot{u} + \frac{1}{12} \Delta t^2 \{\rho \ddot{u}\}_{,tt} + O(\Delta t^4) - \\ & - C u_{,xx} - \frac{1}{12} h^2 \{C u_{,xx}\}_{,xx} + O(h^4). \end{aligned} \quad (4.2)$$

Štruktúra rozvoja operátora nás privádza na myšlienku skonštruovať takú aproximáciu – $OAFDE$, ktorej rozvoj by bol

$$\begin{aligned} TE_{h,\Delta t} \{OAFDE\} = & \rho \ddot{u} + \frac{1}{12} \Delta t^2 \{\rho \ddot{u} - C u_{,xx}\}_{,tt} + O(\Delta t^4) - \\ & - C u_{,xx} + \frac{1}{12} h^2 \{\rho \ddot{u} - C u_{,xx}\}_{,xx} + O(h^4) + \\ & + O(h^2 \Delta t^2). \end{aligned} \quad (4.3)$$

Takáto štruktúra je žiadúca, pretože pre normálne módy členy v zložených zátvorkách (a teda aj ich parciálne derivácie) sú identicky nulové.

Rozdiel medzi štruktúrou rovnice (4.2) a rovnice (4.3) je

$$\mathcal{L}\{u\} = \frac{1}{12} \Delta t^2 \{-C u_{,xx}\}_{,tt} + \frac{1}{12} h^2 \{\rho \ddot{u}\}_{,xx} = \frac{1}{12} \{\rho h^2 - C \Delta t^2\} u_{,xxtt}. \quad (4.4)$$

Konvenčné operátory v aproximácii (4.1) môžeme teda opraviť operátorom, ktorý je aproximáciou $u_{,xxtt}$ do štvrtého rádu v priestore aj čase. Ukazuje sa, že takúto aproximáciu je možné nájsť.

Na konštrukciu príslušného operátora potrebujeme použiť pozície posunuté v čase a priestore. Možno overiť, že vhodné pozície sú pozície v čase a priestore bezprostredne susediace s bodom aproximácie. Hľadaný operátor bude teda používať nasledujúce posunutia:

$$\mathbf{u}_I^m = \begin{pmatrix} u_{I-1}^{m+1} & u_I^{m+1} & u_{I+1}^{m+1} \\ u_{I-1}^m & u_I^m & u_{I+1}^m \\ u_{I-1}^{m-1} & u_I^{m-1} & u_{I+1}^{m-1} \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

K nim prislúchajú koeficienty aproximácie \mathbf{L}_I^m :

$$\mathbf{L}_I^m = \begin{pmatrix} l_{I-1}^{m+1} & l_I^{m+1} & l_{I+1}^{m+1} \\ l_{I-1}^m & l_I^m & l_{I+1}^m \\ l_{I-1}^{m-1} & l_I^{m-1} & l_{I+1}^{m-1} \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

a aproximáciu je opäť možné zapísať vo forme konvolúcie $\mathbf{L}_I^m ** \mathbf{u}_I^m$, ktorá je prostým súčtom súčinov koeficientu a posunutia na rovnakých miestach v maticiach.

Potrebujeme určiť 9 neznámych koeficientov, teda môžeme predpísať hodnoty 9 koeficientov v Taylorovom rozvoji. Pretože symbolický Taylorov rozvoj je v dvoch premenných, jeho koeficienty možno zapísať vo forme matice

$$\begin{pmatrix} b_{00} & b_{01} & b_{02} & b_{03} & b_{04} \\ b_{10} & b_{11} & b_{12} & b_{13} & b_{14} \\ b_{20} & b_{21} & b_{22} & b_{23} & b_{24} \\ b_{30} & b_{31} & b_{32} & b_{33} & b_{34} \\ b_{40} & b_{41} & b_{42} & b_{43} & b_{44} \end{pmatrix} \rightarrow \frac{1}{12} \{\rho h^2 - C \Delta t^2\} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & ? & ? \\ 0 & 0 & 0 & ? & ? \\ 0 & 0 & 1 & ? & ? \\ ? & ? & ? & ? & ? \\ ? & ? & ? & ? & ? \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

pričom b_{ij} je koeficient pri derivácii $\partial_t^i \partial_x^j u$. V rovnici (4.7) vpravo je naznačené, že použijeme 9 rovníc pre koeficienty tvoriace maticu rozmeru 3×3 v ľavom hornom rohu – $i = 0, 1, 2$; $j = 0, 1, 2$. Ostatné koeficienty sú zatiaľ neznáme, riešením ich hodnoty dostaneme (sú lineárne závislé od koeficientov s predpísanými hodnotami). Dostaneme nasledujúcu štruktúru:

$$\begin{pmatrix} b_{00} & b_{01} & b_{02} & b_{03} & b_{04} \\ b_{10} & b_{11} & b_{12} & b_{13} & b_{14} \\ b_{20} & b_{21} & b_{22} & b_{23} & b_{24} \\ b_{30} & b_{31} & b_{32} & b_{33} & b_{34} \\ b_{40} & b_{41} & b_{42} & b_{43} & b_{44} \end{pmatrix} \rightarrow \frac{1}{12} \{ \rho h^2 - C \Delta t^2 \} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \frac{h^2}{12} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\Delta t^2}{12} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

Samotný operátor má tvar

$$\mathbf{L}_I^m = \frac{1}{12h^2\Delta t^2} \{ \rho h^2 - C \Delta t^2 \} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ -2 & 4 & -2 \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Tento môžeme rozdeliť na dve časti:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_I^m &= \frac{\rho}{12\Delta t^2} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ -2 & 4 & -2 \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} - \frac{C}{12h^2} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ -2 & 4 & -2 \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} = \\ &= \delta \mathbf{A}_I^m - \delta \mathbf{K}_I^m. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Pokiaľ si zobrazíme konvenčné operátory v 1D prípade v maticovom tvare, máme

$$\mathbf{convA}_I^m = \frac{\rho}{\Delta t^2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

a

$$\mathbf{convK}_I^m = \frac{C}{h^2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

Modifikované operátory preto možno definovať ako

$$\mathbf{A}_I^m = \mathbf{convA}_I^m + \delta \mathbf{A}_I^m = \frac{\rho}{12\Delta t^2} \begin{pmatrix} 1 & 10 & 1 \\ -2 & -20 & -2 \\ 1 & 10 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

a

$$\mathbf{K}_I^m = \mathbf{convK}_I^m + \delta \mathbf{K}_I^m = \frac{C}{12h^2} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 10 & -20 & 10 \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.14)$$

Ľahko možno overiť, že aproximácia

$$S = (\mathbf{A}_I^m - \mathbf{K}_I^m) ** \mathbf{u}_I^m \quad (4.15)$$

s operátormi \mathbf{A}_I^m a \mathbf{K}_I^m definovanými rovnicami (4.13) and (4.14) má štruktúru Taylorovho rozvoja definovanú rovnicou (4.3). Preto v prípade vlastných módov sa S stane aproximáciou štvrtého rádu a táto aproximácia spĺňa kritérium pre optimálne presné operátory. V tomto zmysle ju možno nazvať optimálne presnou konečno-diferenčnou aproximáciou.

Funkčné hodnoty posunutia u_I^m (4.5) môžeme v rovnici (4.15) nahradiť zodpovedajúcimi diskretnými hodnotami U_I^m a dostaneme optimálne presnú konečno-diferenčnú schému. Kvôli názornosti ju uvedieme v plnom tvare:

$$\begin{aligned} & \frac{\rho}{12 \Delta t^2} [\quad U_{I-1}^{m+1} - 2 U_{I-1}^m + U_{I-1}^{m-1} \\ & \quad + 10(U_I^{m+1} - 2 U_I^m + U_I^{m-1}) \\ & \quad + U_{I+1}^{m+1} - 2 U_{I+1}^m + U_{I+1}^{m-1} \quad] \\ - \frac{C}{12 h^2} [& \quad U_{I-1}^{m+1} - 2 U_I^{m+1} + U_{I+1}^{m+1} \\ & \quad + 10(U_{I-1}^m - 2 U_I^m + U_{I+1}^m) \\ & \quad + U_{I-1}^{m-1} - 2 U_I^{m-1} + U_{I+1}^{m-1} \quad] = 0. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Takeuchi a Geller (2000) si všimli zaujímavú štruktúru získaných operátorov vo vzťahu ku konvenčným operátorom. Posunutie $u(t, z)$ možno formálne vyjadriť s presnosťou do druhého rádu:

$$\begin{aligned} u(t, x) = & \frac{1}{12} [u(t, x + h) + 10 u(t, x) + u(t, x - h)] \\ & - \frac{h^2}{12} u_{,xx}(t, x) + O(h^4). \end{aligned} \quad (4.17)$$

Prvý riadok rovnice (4.17) možno nazvať operátorom identity. Operátor je skonštruovaný tak, aby koeficient pri najnižšom člene chyby operátora bol $h^2/12$ – rovnaký ako v prípade druhej derivácie. Ak sa pozrieme na štruktúru optimálne presných operátorov, je ju možné pre \mathbf{A}_I^m chápať ako aplikovanie druhej derivácie v časovom smere a operátora identity v priestorovom smere.

Prístup založený na aplikovaní jednorozmerných operátorov v jednotlivých smeroch je dôležitý, pretože Takeuchi a Geller (2000) ho používajú na odvodenie 2D a 3D schém, ktorým sa budeme zaoberať v kapitole 5.1.

4.2 Sieťová disperzia optimálne presnej schémy

V homogénnom prostredí je vhodné analyzovať sieťovú disperziu porovnaním presnej a numerickej fázovej rýchlosti šírenia vlastných módov. Do pohybovej rovnice

$$\rho \ddot{u} = C u_{,xx} \quad (4.18)$$

dosadíme vlasný mód $u = A e^{i(\omega t - kx)}$, vyjadrením frekvencie dostaneme disperzný vzťah:

$$\omega = \sqrt{C/\rho} k = c k.$$

Podobne sa postupuje aj v prípade konečno-diferenčných schém. Analyzovať budeme schémy, ktoré boli testované v práci Kristek a Moczo (2006), použijeme autormi zavedené skrátené názvy (optimálne presnú schému budeme označovať Doptm2OA, Doptm2PC bude označovať prediktor-korektor schému pre Doptm2OA, pozri kapitolu 4.3). Do jednotlivých schém dosadíme hodnoty funkcie $u = A e^{i(\omega t_m - kx_I)}$ v bodoch siete. Takto možno získať nasledujúce disperzné vzťahy (v rámci je podmienka stability):

Konvenčná schéma druhého rádu v čase aj priestore (Dconv2)

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{2}{\Delta t} \arcsin\left\{\frac{c\Delta t}{h} \sin \frac{kh}{2}\right\} \quad \boxed{\frac{c\Delta t}{h} \leq 1} \\ &= c k + \frac{1}{24} c k^3 (c^2 \Delta t^2 - h^2) + O(\Delta t^4) + O(h^4) + O(\Delta t^2 h^2) \end{aligned} \quad (4.19)$$

Striedavo usporiadaná schéma 2. rádu v čase a 4. rádu v priestore (DSstag4)

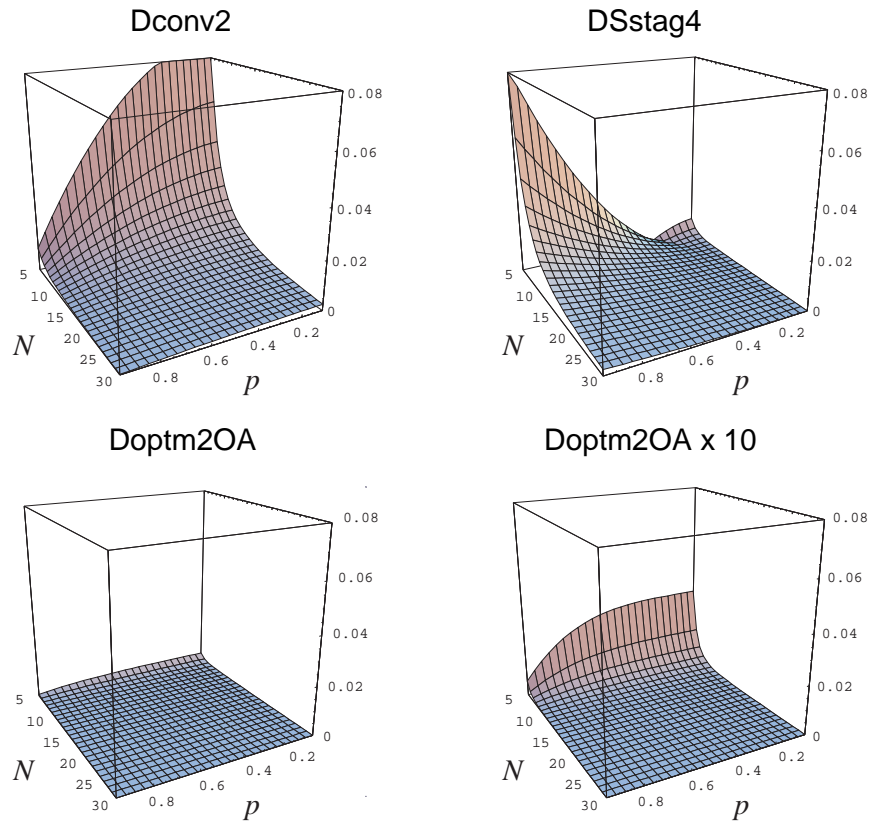
$$\begin{aligned} \omega &= \frac{2}{\Delta t} \arcsin\left\{\frac{c\Delta t}{h} \left(\frac{27}{24} \sin \frac{kh}{2} - \frac{1}{24} \sin \frac{3kh}{2}\right)\right\} \quad \boxed{\frac{c\Delta t}{h} \leq \frac{6}{7}} \\ &= c k + \frac{1}{24} c k^3 (c^2 \Delta t^2 - h^2) + O(\Delta t^4) + O(h^4) + O(\Delta t^2 h^2) \end{aligned} \quad (4.20)$$

Optimálne presná schéma druhého rádu v čase aj priestore (Doptm2OA)

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{2}{\Delta t} \arcsin \sqrt{\frac{3 \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} \sin^2 \frac{kh}{2}}{3 + (\frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} - 1) \sin^2 \frac{kh}{2}}} \quad \boxed{\frac{c\Delta t}{h} \leq 1} \\ &= c k + O(\Delta t^4) + O(h^4) + O(\Delta t^2 h^2) \end{aligned} \quad (4.21)$$

Pre Dconv2 najnižší chybový člen je $\frac{1}{24} c k^3 (c^2 \Delta t^2 - h^2)$, tento je nulový pri voľbe maximálneho možného časového kroku $\Delta t = h/c$. DSstag4 túto vlastnosť nemá, najnižší

chybový člen je však nezávislý od veľkosti priestorového kroku. Kým pri konvenčnej schéme chyba spôsobuje menšiu numerickú rýchlosť, ako je skutočná, pre striedavo usporiadané schémy naopak väčšiu. Doptm2OA má najnižší chybový člen až v 4. ráde.



Obr. 4.1. Rozdiel medzi presnou a numerickou rýchlosťou šírenia schém ako funkcia N (počtu krokov na minimálnu vlnovú dĺžku) a p (stabilitného pomeru). Pre optimálne presnú schému sme vykreslili aj graf s desaťnásobne zväčšenými hodnotami.

Aby sme mohli priamo porovnať naše výsledky s numerickými testami v práci Kristek a Moczo (2006), vykreslíme veľkosť lokálnej chyby rovnako, ako autori zobrazili časovofrekvenčné rozdiely (misfity). Hodnoty, ktoré zvolili pri testoch sú: rýchlosť šírenia $c = 3464$ m/s, minimálna vlnová dĺžka $\lambda_{min} = 4618.66$ m, dominantná vlnová dĺžka $\lambda_{dom} = 6928$ m. Vlnové číslo, ktoré budeme uvažovať, bude $k = 2\pi/\lambda_{dom} = 9.07 \times 10^{-4}$ m⁻¹ (v práci bol samozrejme použitý signál s úzkym spektrom okolo dominantnej frekvencie). Na obr. 4.1 sú grafy chyby numerickej rýchlosti ako funkcie $N = \lambda_{min}/h$ a $p = c\Delta t/h$. Zhodu medzi výsledkami získanými analýzou a numerickými výsledkami budeme komentovať v kapitole 4.5.

4.3 Prediktor-korektor schéma na riešenie optimálne presných schém

Optimálne presná schéma je implicitná. Geller a Takeuchi (1998) používajú prediktor-korektor schému založenú na Bornovej aproximácii do prvého rádu aby sa vyhli simultánnemu riešeniu veľkého systému rovníc v každej časovej hladine.

Uvažujme rovnicu

$$(\mathbf{conv}\mathbf{A}_I^m - \mathbf{conv}\mathbf{K}_I^m) ** \mathbf{conv}\mathbf{U}_I^m = 0. \quad (4.22)$$

Vďaka tvaru operátora $\mathbf{conv}\mathbf{A}_I^m$ a $\mathbf{conv}\mathbf{K}_I^m$ možno rovnicu vyriešiť vzhľadom na $\mathbf{conv}\mathbf{U}_I^{m+1}$. To nie je možné pre implicitnú optimálne presnú schému

$$(\mathbf{A}_I^m - \mathbf{K}_I^m) ** \mathbf{U}_I^m = 0. \quad (4.23)$$

Použitím Bornovej aproximácie do prvého rádu,

$$(A^0 - K^0) \delta U \doteq - (\delta A - \delta K) U^0,$$

v našom prípade dostaneme

$$(\mathbf{conv}\mathbf{A}_I^m - \mathbf{conv}\mathbf{K}_I^m) ** \delta\mathbf{U}_I^m = - (\delta\mathbf{A}_I^m - \delta\mathbf{K}_I^m) ** \mathbf{conv}\mathbf{U}_I^m. \quad (4.24)$$

Vyriešením rovnice vzhľadom na $\delta\mathbf{U}_I^m$ môžeme odhadnúť rozdiel medzi optimálne presným a konvenčným riešením. Pretože v predchádzajúcich časových hladinách $m - 1$ a m budeme posunúť korigovať, chyby riešenia (prvky matice $\delta\mathbf{U}_I^m$) pre ne považujeme za nulové:

$$\delta\mathbf{U}_I^m = \begin{pmatrix} \delta U_{I-1}^{m+1} & \delta U_I^{m+1} & \delta U_{I+1}^{m+1} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.25)$$

Vzhľadom na štruktúru matíc konvenčných operátorov (4.11) a (4.12) ľavá strana rovnice (4.24) sa redukuje na $\frac{\rho}{\Delta t^2} \delta U_I^{m+1}$, teda je z nej možné priamo vypočítať δU_I^{m+1} :

$$\delta U_I^{m+1} = -\frac{\Delta t^2}{\rho} (\delta\mathbf{A}_I^m - \delta\mathbf{K}_I^m) ** \mathbf{conv}\mathbf{U}_I^m. \quad (4.26)$$

Algoritmus prediktor-korektor na riešenie optimálne presnej schémy (4.23) je preto nasledovný:

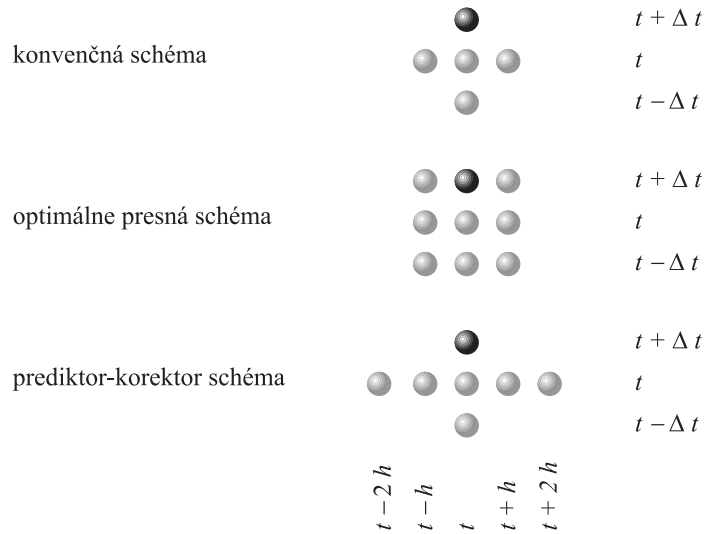
1. vo všetkých priestorových pozíciách nájdeme riešenie konvenčnej schémy $\text{conv}U_I^{m+1}$,
2. v každej priestorovej pozícii vypočítame pravú stranu rovnice (4.24),
3. vypočítame δU_I^{m+1} predelením pravej strany rovnice (4.24) koeficientom $\frac{\rho}{\Delta t^2}$,
4. korigujeme hodnoty posunutia $U_I^{m+1} = \text{conv}U_I^{m+1} + \delta U_I^{m+1}$,
5. do $\text{conv}U_I^{m+1}$ priradíme korigovanú hodnotu posunutia U_I^{m+1} : $\text{conv}U_I^{m+1} := U_I^{m+1}$,
6. pokračujeme ďalším časovým krokom.

V jednej časovej hladine sa teda najskôr počíta konvenčné riešenie následne pomocou neho určíme korekciu a vykonáme ju.

Prediktor-korektor schému (Doptm2PC) je možné zapísať ako konvenčnú schému na výpočet posunutia:

$$U_I^{m+1} = \text{conv}U_I^{m+1} - \frac{\Delta t^2}{\rho} (\delta \mathbf{A}_I^m - \delta \mathbf{K}_I^m) ** \text{conv}U_I^m. \quad (4.27)$$

Na obrázku 4.2 sú pre porovnanie znázornené časopriestorové pozície (šedé guľky), z ktorých počítame posunutie v novej časovej hladine (čierna guľka) pre konvenčnú, optimálne presnú a prediktor-korektor schému.



Obr. 4.2. Časopriestorové pozície používané na aproximácie v schémach

4.4 Presnosť prediktor-korektor schémy

Budeme analyzovať prediktor-korektor schému pomocou Taylorovho rozvoja. Máme ju zapísanú v tvare

$$U_I^{m+1} = \text{conv}U_I^{m+1} + \delta U_I^{m+1} \quad (4.28)$$

a pretože explicitné konečno-diferenčné schémy možno zapísať rovnako (pričom postup prepisu prediktor-korektor schémy na tvar aproximujúci pohybovú rovnicu je komplikovaný), zapíšeme a budeme ich analyzovať v tomto tvare:

Konvenčná schéma:

$$\begin{aligned} \text{conv}U_I^{m+1} &= 2 \text{conv}U_I^m - \text{conv}U_I^{m-1} \\ &+ \frac{\Delta t^2}{\rho h^2} (\text{conv}U_{I-1}^m - 2 \text{conv}U_I^m + \text{conv}U_{I+1}^m) \end{aligned} \quad (4.29)$$

Optimálne presná schéma:

$$\begin{aligned} U_I^{m+1} &= \frac{1}{10h^2 + 2c^2\Delta t^2} [\quad h^2 (- U_{I-1}^{m+1} - U_{I+1}^{m+1} \\ &\quad + 2U_{I-1}^m + 20U_I^m + 2U_{I+1}^m \\ &\quad - U_{I-1}^{m-1} - 10U_I^{m-1} - U_{I+1}^{m-1}) \\ &\quad + c^2\Delta t^2 (U_{I-1}^{m+1} + U_{I+1}^{m+1} \\ &\quad + 10U_{I-1}^m - 20U_I^m + 10U_{I+1}^m \\ &\quad + U_{I-1}^{m-1} - 2U_I^{m-1} + U_{I+1}^{m-1})] \end{aligned} \quad (4.30)$$

pričom však U_{I-1}^{m+1} a U_{I+1}^{m+1} iba formálne uvažujeme ako známe veličiny, pretože ich dostaneme až riešením systému rovníc.

Prediktor-korektor schéma

$$U_I^{m+1} = \text{conv}U_I^{m+1} - \frac{\Delta t^2}{\rho} (\delta \mathbf{A}_I^m - \delta \mathbf{K}_I^m) ** \text{conv} \mathbf{U}_I^m \quad (4.31)$$

(za $\text{conv}U_{I-1}^{m+1}$, $\text{conv}U_I^{m+1}$, $\text{conv}U_{I+1}^{m+1}$ je potrebné dosadiť konvenčné konečno-diferenčné aproximácie)

Schémy analyzujeme rozvojom do Taylorovho radu pričom dostaneme:

Konvenčná schéma

$$\begin{aligned} u &+ E\Delta t^2 + E^{(1,0)}\Delta t^3 \\ &+ \left(\frac{1}{2}c^2u^{(2,2)} - \frac{7}{12}u^{(4,0)} \right) \Delta t^4 + \frac{1}{12}u^{(0,4)}c^2\Delta t^2h^2 + O(\Delta^6) \end{aligned} \quad (4.32)$$

Optimálne presná schéma

$$\begin{aligned}
u & - \frac{6}{c^2} E h^2 - \frac{6}{c^2} E^{(1,0)} \Delta t h^2 - \frac{7}{2c^2} E^{(2,0)} \Delta t^2 h^2 - \frac{3}{2c^2} E^{(3,0)} \Delta t^3 h^2 \\
& + \frac{30}{c^4 \Delta t^2} E h^4 - \frac{30}{c^4 \Delta t} E^{(1,0)} h^4 + \frac{35}{2c^4} E^{(2,0)} h^4 \\
& - \frac{1}{2c^2} E^{(0,2)} h^4 + \frac{1}{2c^2} E^{(1,2)} \Delta t h^4 + O(\Delta^6)
\end{aligned} \tag{4.33}$$

Prediktor-korektor schéma

$$\begin{aligned}
u & + E \Delta t^2 + E^{(1,0)} \Delta t^3 \\
& - \frac{c^2}{12} E^{(0,2)} \Delta t^4 + \frac{c^2}{12} E^{(1,2)} \Delta t^5 \\
& - \frac{7}{12} E^{(2,0)} \Delta t^4 + \frac{1}{4} E^{(3,0)} \Delta t^5 + O(\Delta^6),
\end{aligned} \tag{4.34}$$

kde $E = c^2 u^{(0,2)} - u^{(2,0)}$ a $O(\Delta^6) = O(\Delta t^6) + O(h^2 \Delta t^4) + O(h^4 \Delta t^2) + O(h^6)$.

Pretože pre presné riešenie E a všetky jeho priestorové a časové derivácie sú nulové, možno konštatovať:

- konvenčná schéma lokálne aproximuje posunutie do 4. rádu presnosti
- optimálne presná schéma lokálne aproximuje posunutie do 6. rádu presnosti
- prediktor-korektor schéma lokálne aproximuje posunutie do 6. rádu presnosti

Posledné zistenie je veľmi dôležité, pretože na základe neho sa na prediktor-korektor schému možno pozerať nie ako na aproximáciu optimálne presnej schémy, ale taktiež ako na optimálne presnú schému podľa definície Geller a Takeuchi (1995).

Podľa definícií neskorších prác Gellera et al. optimálne presná schéma by mala dávať najvyššiu presnosť pre daný typ schémy. Ako je možné vidieť z obrázka 4.2, prechodom k prediktor-korektor schéme dostávame schému so zväčšeným rozsahom v priestorovom smere, takže sa jedná o iný typ schémy. Je to konvenčná schéma a pretože posunutie aproximuje 6. rádom presnosti, pohybovú rovnicu by aproximovala do 4. rádu presnosti. Táto schéma má zrejme vlastnosti blízke optimálnym schémam. Pre homogénne prostredie by sme ju mohli získať priamo na základe požiadavky optimálnej presnosti z článku Geller a Takeuchi (1995). Pri konštruovaní konvenčných schém pre heterogénne prostredie však postup optimálne presná schéma \rightarrow prediktor-korektor schéma znamená návod, ako korektne odvodiť heterogénnu schému vyššieho rádu presnosti, preto tento postup použijeme aj v prípade 3D schém.

4.5 Porovnanie výsledkov získaných analýzou a numerickými testami

Zistenia z predchádzajúcej kapitoly sú v súlade s numerickými testami. V práci Kristek a Moczo (2006) bola vykonaná séria numerických výpočtov s použitím schém Dconv2, DSstag2 a Doptm2PC. Presnosť riešení bola vyhodnocovaná na základe výpočtu časovo-frekvenčných misfitov (Kristekova et al., 2006) riešení voči analytickému riešeniu. Pre šírenie vlnenia v homogénnom prostredí sú výsledné misfity ako funkcie dvoch premenných $N = \lambda_{MIN}/h$ a $p = \frac{c}{h}\Delta t$ vykreslené na obr. 4.3.

Vrátíme sa teraz k našej analýze z kapitoly 4.2. Na základe identického tvaru grafov na obr. 4.3 a na obr. 4.1 konštatujeme, že chyba riešenia je spôsobená numerickou disperziou fázovej rýchlosti. Celková chyba (ktorú misfity kvantifikujú) vznikne kumuláciou lokálnych chýb v priebehu šírenia sieťou. Kumulácia je zrejme lineárna zo vzdialenosťou, preto sa zachová pôvodný tvar 2D grafov chyby. Jedine skutočnosť, že pri simuláciách vlnenie nie je monofrekvenčné môže spôsobovať rozdiely, pretože chyby pre jednotlivé vlnové dĺžky interagujú.

Grafy misfitov budeme teda interpretovať na základe rovníc (4.19) – (4.21):

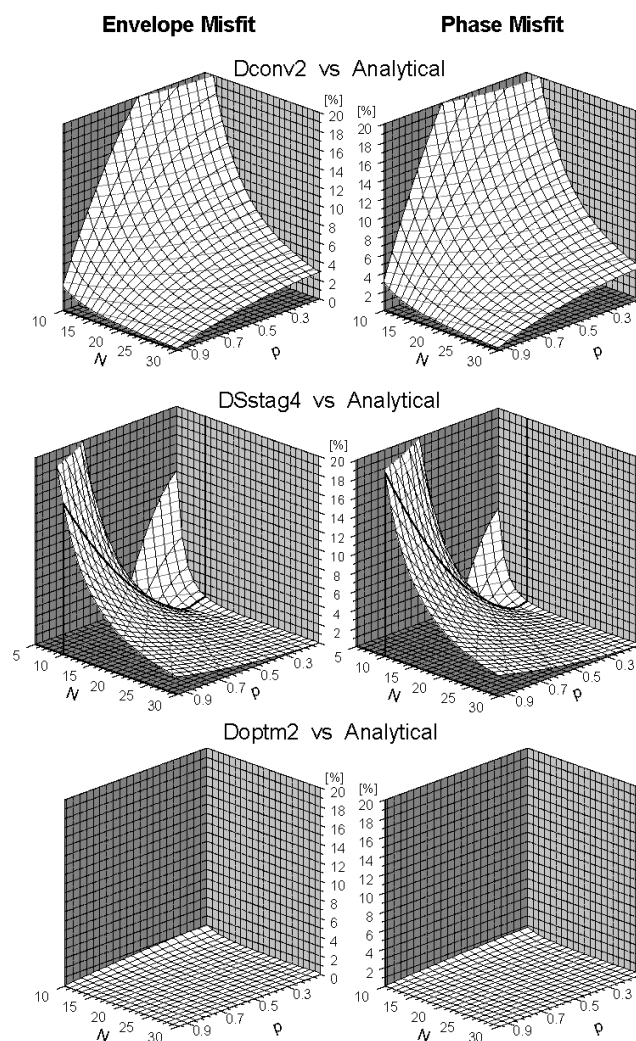
- Dconv2 má pre $p = 1$ misfity nulové (kompenzovanie členov 2. a vyšších rádov)
- DSstag4 má pre $p = 1$ misfity nenulové (dôsledok neprítomnosti členu $-\frac{1}{24}c k^3 h^2$)
- DSstag4 má minimálne misfity pre hodnotu

$$p \approx \frac{1}{kh} \sqrt{\sqrt{1600 + 81h^4 k^4} - 40} = \frac{N}{3k\lambda_{min}} \sqrt{\sqrt{1600 + 81\lambda_{min}^4 k^4 / N^4} - 40}$$

(napr. pre $N = 5$ dostaneme $p \approx 0.28$ – pozri obr. 4.3 a obr. 4.1, pre $N = 10$ je $p \approx 0.14$)

- Doptm2PC má misfity výrazne menších hodnôt vďaka neprítomnosti členov druhého rádu

Pre striedavo usporiadané siete je teda vhodné parametre výpočtu nastaviť tak, aby sme sa pohybovali v okolí minima numerickej disperzie. Toto minimum je spôsobené zmenou znamienka chyby fázovej rýchlosti (v grafoch misfitov aj chyby fázovej rýchlosti je vždy zobrazená absolútna hodnota chyby). Signál však nemusí mať také úzke spektrum, aby výraznejšie minimum vzniklo, v takom prípade je výpočet disperziou viac postihnutý.



Obr. 4.3. Sieťová disperzia pri šírení v homogénnom prostredí do vzdialenosti 20 dominantných vlnových dĺžok pre konvenčnú schému (Dconv2), striedavo usporiadanú schému (DSStag4) a prediktor-korektor algoritmus pre optimálne presnú schému (Doptm2 = Doptm2PC). Zobrazený je amplitúdový a fázový misfit v závislosti od vzorkovania (N) a pomeru stability p . Prevzaté z práce Kristek a Moczo (2006).

Je dôležité zdôrazniť, že výpočty neboli vykonané použitím samotnej Doptm2OA, ale prediktor-korektor schémy Doptm2PC, ktorá má však, ako sme to ukázali v predchádzajúcej kapitole, veľmi podobné vlastnosti ako Doptm2OA.

Na základe zhody grafu chyby fázovej rýchlosti, fázového a amplitúdového misfitu možno konštatovať, že numerická disperzia sa približne rovnako prejavuje na chybe obálky aj fázy. Práce Geller a Takeuchi (1998) a Takeuchi a Geller (2000) analyzujú podmienku stability pre optimálne presné schémy. Táto analýza dáva v 1D rovnakú podmienku,

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{c}, \quad (4.35)$$

aká bola odvodená aj pre konvenčné schémy. Je zrejmé, že pre praktické účely je dôležitejšie analyzovať podmienku stability prediktor-korektor schémy, ktorá sa pri výpočtoch používa. Túto analýzu možno nájsť v článku Takeuchi a Geller (2003). Podmienka stability v tomto prípade zostáva nezmenená. Zrejme je to vďaka tomu, že konvenčné aj optimálne presné operátory majú totožnú podmienku stability, ktorá sa opravou konvenčnej schémy optimálne presným korektorom nezmení.

4.6 Heterogénne optimálne presné schémy

Geller a Takeuchi (1998) konštruujú v 1D prípade schému v heterogénnom prostredí pre diskontinuity koincidujúce so sieťovými bodmi. Prístup nazývaný "overlapping" (prekrývanie) je analógiou asemblovania lokálnych matíc v metóde konečných elementov. Operátory pri voľnom povrchu možno získať na základe podmienky, podľa ktorej po asemblovaní dvoch homogénnych prostredí musíme dostať operátor v neohraničenom prostredí:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_I^m &= \frac{\rho}{12\Delta t^2} \begin{pmatrix} 1 & 10 & 1 \\ -2 & -20 & -2 \\ 1 & 10 & 1 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{\rho}{12\Delta t^2} \begin{pmatrix} 1 & 5 & 0 \\ -2 & -10 & 0 \\ 1 & 5 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\rho}{12\Delta t^2} \begin{pmatrix} 0 & 5 & 1 \\ 0 & -10 & -2 \\ 0 & 5 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

a

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_I^m &= \frac{C}{12h^2} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 10 & -20 & 10 \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{C}{12h^2} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 10 & -10 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{C}{12h^2} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 0 & -10 & 10 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

"Overlapping" v heterogénnom prostredí pre kontakt dvoch homogénnych buniek dáva (Geller a Takeuchi, 1998):

$$\mathbf{A}_I^m = \frac{\rho_I}{12\Delta t^2} \begin{pmatrix} 1 & 10 & 1 \\ -2 & -20 & -2 \\ 1 & 10 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{K}_I^m = \frac{1}{12h^2} \begin{pmatrix} (C_{I-1} + C_I) & -(C_{I-1} + 2C_I - C_{I+1}) & (C_I + C_{I+1}) \\ 10(C_{I-1} + C_I) & -10(C_{I-1} + 2C_I - C_{I+1}) & 10(C_I + C_{I+1}) \\ (C_{I-1} + C_I) & -(C_{I-1} + 2C_I - C_{I+1}) & (C_I + C_{I+1}) \end{pmatrix}.$$

Ako ukazujú numerické testy, tento prístup v prípade rozhraní koincidujúcich so sieťovými bodmi v hladko heterogénnom prostredí dáva uspokojujúco presné výsledky.

Práca Kristek a Moczo (2006) preukazuje možnosť aplikovať prístup vedúci na aritmetické a harmonické priemerovanie pre 1D optimálne presné schémy. Tento prístup rozširuje oblasť použitia schém aj na rozhrania nekoincidujúce so sieťovými bodmi.

Operátory v tomto prístupe sú

$$\mathbf{A}_I^m = \frac{\rho_I^A}{12\Delta t^2} \begin{pmatrix} 1 & 10 & 1 \\ -2 & -20 & -2 \\ 1 & 10 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{K}_I^m = \frac{1}{12h^2} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 10 & -20 & 10 \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C_{I-1/2}^H & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}(C_{I-1/2}^H + C_{I+1/2}^H) & 0 \\ 0 & 0 & C_{I+1/2}^H \end{pmatrix},$$

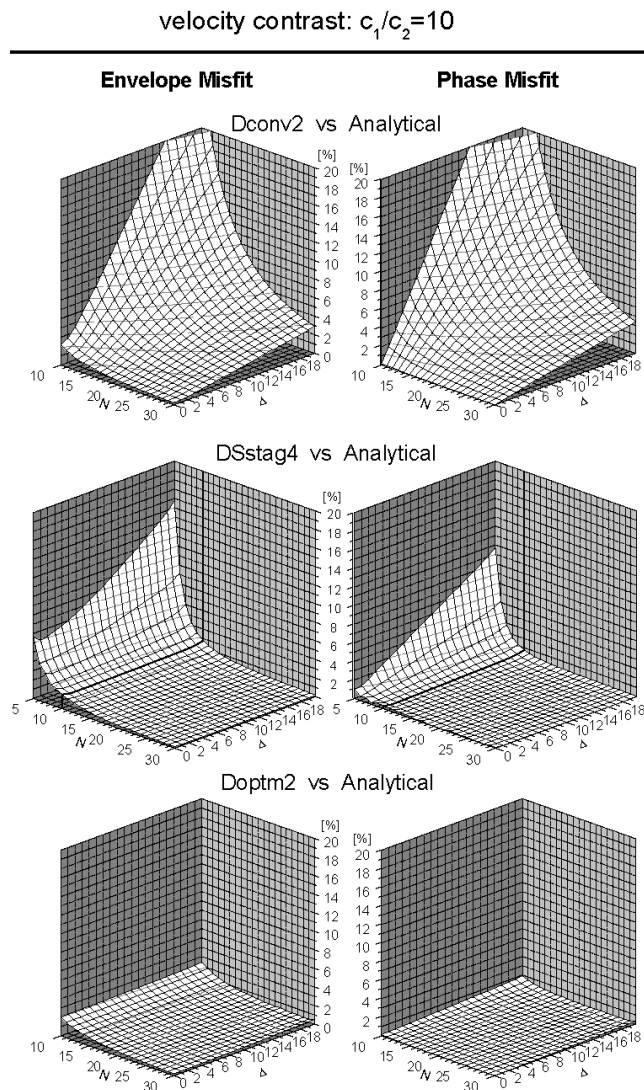
kde

$$\rho_I^A = \frac{1}{h} \int_{z_{I-1/2}}^{z_{I+1/2}} \rho(z) \, dz, \quad (4.36)$$

$$C_{I+1/2}^H = \left[\frac{1}{h} \int_{z_I}^{z_{I+1}} \frac{1}{C(z)} \, dz \right]^{-1}. \quad (4.37)$$

Porovnania s konvenčnými a striedavo usporiadanými schémami ukazujú, že chyba (sieťová disperzia) riešenia je použitím metódy prediktor-korektor pre optimálne presnú schému výrazne redukovaná ako v homogénnom prostredí, tak aj v prípade rozhrania alebo gradientového prostredia. Na obr. 4.4 z práce Kristek a Moczo (2006) je možné si všimnúť, že konvenčná a optimálne presná schéma majú rovnakú chybu na rozhraní,

numerickou disperziou sa však pre Dconv2 chyba zväčšuje, kým pre Doptm2PC zostáva malá.



Obr. 4.4. Presnosť modelovania rozhrania s rýchlostným kontrastom 10 pre konvenčnú schému (Dconv2), striedavo usporiadanú schému (DSStag4) a prediktor-korektor algoritmus pre optimálne presnú schému (Doptm2 = Doptm2PC). Zobrazený je amplitúdový a fázový rozdiel v závislosti od vzorkovania (N) a vzdialenosti od rozhrania Δ . Prevzaté z práce Kristek a Moczo (2006).

Mizutani (2002) prezentuje výsledky vypočítané pomocou 2D konečno-diferenčnej schémy skonštruovanej na základe ním odvodeného kritéria pre optimálne presné operátory v heterogénnom prostredí ak diskontinuita nekoinciduje so sieťovým bodom. Odvodenia sú spravené vo frekvenčnej oblasti, autor používa zápis typický pre metódu konečných elementov. Detailnejšie sa venuje iba odvodeniu v 1D prípade, podľa nášho

názoru však nie je dostatočne vysvetlené, ako sa konštruuje samotná schéma a pretože v práci nie je uvedená, neboli sme schopní jeho postup zreprodukovat' a verifikovat'.

Naprie tomu, táto problematika bude riešená v najbližšom období, pretože schopnosť presne modelovať rozhrania nekoincidujúce so sieťovými rovinami je základným predpokladom, aby bolo možné voliť relatívne veľký časový a priestorový krok, ktorý zaručuje efektívnosť optimálne presnej schémy.

5 3D optimálne presné schémy

Praktické aplikácie pri modelovaní realistických situácií si vyžadujú riešenie problému v troch rozmeroch.

Optimálne presné operátory a schému na nich založenú rozoberá v 2D prípade práca Takeuchi a Geller (2000). Po jej detailnom preštudovaní sme presvedčení, že autori používajú na odvodenie operátorov prístup pomocou konvolúcie matíc. Tento prístup vysvetlíme v nasledujúcej kapitole. Vznikajú ním operátory s relatívne veľkým množstvom nenulových prvkov. Tento počet je možné výrazne redukovať použitím analýzy pomocou Taylorovho rozvoja, tej sa venujeme následne.

5.1 Konštrukcia optimálne presnej schémy pomocou konvolúcie

Po odvodení 1D optimálne presných operátorov sme poukázali na ich zaujímavú štruktúru. Ukazuje sa, že ich matice je možné získať operáciou konvolúcie matíc:

$$\mathbf{A}_I^m \sim \frac{1}{12} \begin{pmatrix} 1 & 10 & 1 \\ -2 & -20 & -2 \\ 1 & 10 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{12} \begin{pmatrix} 1 & 10 & 1 \\ 1 & 10 & 1 \\ 1 & 10 & 1 \end{pmatrix} ** \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -2 & -2 & -2 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

V časovom smere (vertikálny), v ktorom derivujeme, použijeme tvar jednorozmerného operátora pre druhú deriváciu. V priestorovom smere použijeme operátor identity – autori túto procedúru nazývajú “smear out” (rozmazanie) – každé jedno posunutie v časovej derivácii rozdelíme s váhami určenými operátorom identity do troch priestorových pozícií.

Tento prístup môžeme odôvodniť presným odvodením. Aplikovaním štandardnej konvenčnej konečno-diferenčnej druhej časovej derivácie získame rozvoj

$$u_{,tt}(t, x) + \frac{h^2}{12} u_{,ttt}(t, x) + O(\Delta t^4). \quad (5.1)$$

Následne použitím konečno-diferenčného operátora identity (4.17), ktorý má rozvoj

$$u(t, x) + \frac{h^2}{12} u_{,xx}(t, x) + O(h^4) \quad (5.2)$$

v priestorovom smere pre každé jedno posunutie v časovej derivácii dostaneme

$$u_{,tt}(t, x) + \frac{\Delta t^2}{12} u_{,tttt}(t, x) + \frac{h^2}{12} u_{,xxtt}(t, x) + O(h^4) + O(\Delta t^2 h^2) + O(\Delta t^4). \quad (5.3)$$

Spolu s rovnako odvodenou štruktúrou optimálne presnej priestorovej derivácie

$$u_{,xx}(t, x) + \frac{h^2}{12} u_{,xxxx}(t, x) + \frac{\Delta t^2}{12} u_{,xxtt}(t, x) + O(h^4) + O(\Delta t^2 h^2) + O(\Delta t^4). \quad (5.4)$$

po vynásobení časovej derivácie hustotou a priestorovej modulom pružnosti dostávame odčítaním požadovanú štruktúru (rovnica 4.3).

V práci Takeuchi a Geller (2000) autori tento prístup používajú pri konštrukcii 3D optimálne presných operátorov. V podstate ide o trojrozmernú analógiu popísaného 1D prístupu, v práci však nie je jasne popísaný.

Tento prístup podľa nášho názoru umožňuje síce jednoduchým spôsobom schémy s požadovanými vlastnosťami generovať, pretože však samotné vytvorenie operátora nedáva podrobnú informáciu o štruktúre chyby, je vhodné výsledok overiť rozvojom do Taylorovho radu. Taktiež tento prístup nedáva v 2D a 3D prípade operátory s najmenším počtom nenulových prvkov. Tieto sú výhodné, pretože redukovujú počet potrebných aritmetických operácií. Preto v ďalšej kapitole rozoberieme prístup pomocou rozvoja do Taylorovho radu, ktorý je univerzálnejší.

5.2 Konštrukcia optimálne presnej schémy pomocou analýzy chyby aproximácie

Postup rozvoja do Taylorovho radu používaný v tejto práci umožňuje konštruovať operátory s presne definovanou štruktúrou chyby a je ho možné úspešne využiť pri konštrukcii aproximácií v prípade 1D, 2D aj 3D problému.

Budeme aproximovať pohybovú rovnicu (2.1). Rovnice pre normálne módy – riešenia pohybovej rovnice v prípade nulovej hustoty objemovej sily – sú

$$\rho \ddot{u}_i - (\lambda + \mu) u_{j,ji} - \mu u_{i,jj} = 0, \quad i, j \in \{x, y, z\}. \quad (5.5)$$

Vektor ľavých strán týchto rovníc označíme E_i :

$$\begin{aligned}
E_x &= \\
& [\rho \partial_t^2 - (\lambda + 2\mu) \partial_x^2 - \mu \partial_y^2 - \mu \partial_z^2] u_x - (\lambda + \mu) \partial_y \partial_x u_y - (\lambda + \mu) \partial_z \partial_x u_z, \\
E_y &= \\
& -(\lambda + \mu) \partial_y \partial_x u_x + [\rho \partial_t^2 - \mu \partial_x^2 - (\lambda + 2\mu) \partial_y^2 - \mu \partial_z^2] u_y - (\lambda + \mu) \partial_z \partial_y u_z, \\
E_z &= \\
& -(\lambda + \mu) \partial_z \partial_x u_x - (\lambda + \mu) \partial_y \partial_z u_y + [\rho \partial_t^2 - \mu \partial_x^2 - \mu \partial_y^2 - (\lambda + 2\mu) \partial_z^2] u_z.
\end{aligned}$$

Vychádzať budeme zo štruktúry rozvoja do Taylorovho radu pri konvenčnej aproximácii pretože, rovnako ako v 1D, chybové členy vyskytujúce sa pri konvenčnej aproximácii nie je možné eliminovať bez zväčšenia rozsahu operátora. Naopak, doplníme ich tak, aby sme dostali štruktúru, v ktorej sa budú vyskytovať rôzne derivácie E_i , $i \in x, y, z$. Zoskupíme členy v E_x , E_y a E_z podľa zložiek posunutia, ktoré sa v nich vyskytujú:

$$E_x = X_2 u_x + X_{xy} u_y + X_{xz} u_z, \quad (5.6)$$

$$E_y = Y_{yx} u_x + Y_2 u_y + Y_{yz} u_z, \quad (5.7)$$

$$E_z = Z_{zx} u_x + Z_{zy} u_y + Z_2 u_z, \quad (5.8)$$

pričom dolný index '2' znamená a lineárnu kombináciu nezmiešaných druhých derivácií, dva dolné indexy priamo indikujú aplikované zmiešané derivácie. Pretože E_x , E_y a E_z majú jednotnú štruktúru, budeme hľadať najskôr optimálne presnú aproximáciu E_x , aproximácie pre E_y a E_z je potom možné odvodiť analogicky (jedná sa len o zámenu indexov).

Členy, ktoré dostávame pri štandardnej aproximácii sú vyznačené na obr. 5.1 rámkami. Štruktúru, ktorá je v rámku ohraničenom čiarkovanou čiarou, je možné získať analogicky s 1D prípadom. Ukazuje sa, že koeficient $1/12$ a $1/6$ pri členoch vznikajúcich aproximáciou nezmiešanej a zmiešanej derivácie sú navzájom nekompatibilné a bez zväčšenia rozsahu operátora nie je možné dosiahnuť štruktúru, ktorá by vďaka prítomnosti rovníc pre normálne módy dávala 4. rád presnosti pri aplikovaní na normálne módy. Pretože po odvodení optimálne presných operátorov plánujeme použiť prediktor-korektor schému, ktorá – ako sme overili v 1D – zrejme zachováva rád, budeme sa usilovať 4. rád aproximácie dosiahnuť. Zrejme jediná možnosť ako to navrhujú

aj Takeuchi a Geller (2000) je zväčšiť rozsah operátorov, pretože zmiešané derivácie sa vyskytujú len v dvoch členoch, budeme modifikovať ich aproximácie. Po modifikovaní zmiešaných derivácií vytvoria stĺpce vyznačené na obr. 5.1 šípkami celkovú chybu FDE_x (aproximácie E_x):

$$\begin{aligned} \text{TrunError}\{FDE_x\} &= \text{TaylorExpansion}\{FDE_x\} - E_x \\ &= \frac{1}{12} [\Delta t^2 \partial_t^2 + h^2 (\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2)] E_x + \\ &+ O(\Delta t^p \cdot h^q); \quad p + q \geq 4. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Na získanie štruktúry v rámci ohraničenom čiarkovanou čiarou stačí pozície použité na získanie aproximácie FDE_x doplniť analogicky, ako v 1D prípade:

$$\begin{aligned} [u_x]_{I,J,K}^m(p, q, r, s) &= \\ u_x[t_m + (p - 2)\Delta t, x_I + (q - 2)h, y_J + (r - 2)h, z_K + (s - 2)h]; \\ p, q, r, s &\in \{1, 2, 3\}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Symetria časopriestorových pozícií aproximácie (t_m, x_I, y_J, z_K) umožní dosiahnuť požadovaný rád aproximácie s minimálnym počtom pozícií. Konečno-diferenčnú aproximáciu potom možno zapísať v tvare

$$FDX_{2u_x} = G_{I,J,K}^m(p, q, r, s) [u_x]_{I,J,K}^m(p, q, r, s). \quad (5.11)$$

Tenzor $\mathbf{G}_{I,J,K}^m$ má 81 koeficientov, ktoré je potrebné určiť metódou Taylorovho rozvoja. Nenulové koeficienty, ktoré takto získame sú na obr. 5.2. Iba $7 + 19 + 7 = 33$ z celkového počtu 81 koeficientov je nenulových.

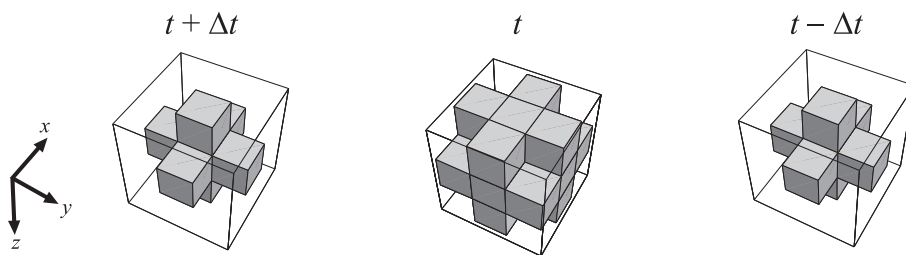
Pri hľadaní koeficientov FDX_{xy} je potrebné k pozíciám (5.10) pridať ďalšie pozície, aby sme dosiahli prítomnosť členov, ktoré sú na obr. 5.1 pod čiarkovaným obdĺžnikom. Zrejme najvhodnejšie je pridať 4 pozície usporiadané rovnako, ako je to pre konvenčnú aproximáciu zmiešanej derivácie avšak v dvojnásobnej vzdialenosti. Nenulových $4 + 16 + 4 = 24$ koeficientov získaného diskrétného operátora $\mathbf{H}_{I,J,K}^m$ sú znázornené na obr. 5.3.

Koeficienty FDX_{xz} , sú rovnaké ako pre FDX_{xy} , ich hodnoty dostaneme tak, že v nájdenom $\mathbf{H}_{I,J,K}^m$ zameníme J a K . Kompletne optimálne presná schéma je uvedená

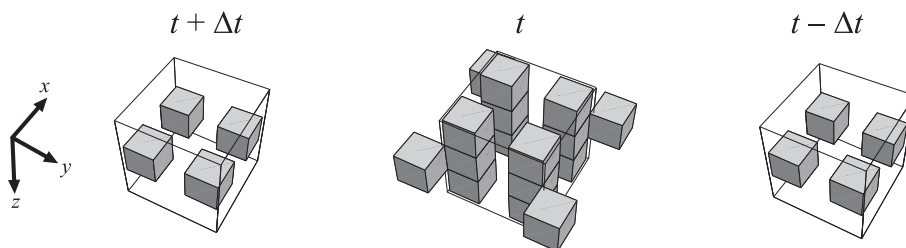
$$\begin{array}{c}
\rho u_{,tt} - (\lambda + 2\mu)u_{,xxx} - \mu u_{,xyy} - \mu u_{,zzz} \\
-(\lambda + \mu)u_{,xyy} \\
-(\lambda + \mu)u_{,zzz}
\end{array}
\quad
\begin{array}{c}
-(\lambda + \mu)v_{,xyx} \\
\rho v_{,tt} - \mu v_{,xyx} - (\lambda + 2\mu)v_{,xyy} - \mu v_{,zzz} \\
-(\lambda + \mu)v_{,zyx}
\end{array}
\quad
\begin{array}{c}
-(\lambda + \mu)w_{,zzz} \\
-(\lambda + \mu)w_{,zzy} \\
\rho w_{,tt} - \mu w_{,xyx} - \mu w_{,xyy} - (\lambda + 2\mu)w_{,zzz}
\end{array}$$

$\rho u_{,tt}$	$-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}$	$-\mu u_{,xyy}$	$-\mu u_{,zzz}$	$-(\lambda + \mu)v_{,xyy}$	$-\mu u_{,xyy}$	$-\mu u_{,zzz}$	$-(\lambda + \mu)w_{,xyy}$	$-\mu u_{,xyy}$	$-\mu u_{,zzz}$	$-(\lambda + \mu)w_{,zzz}$	$-\mu u_{,zzz}$	$-(\lambda + \mu)w_{,zzy}$	$-\mu u_{,zzy}$	$-\mu u_{,zzz}$	$-(\lambda + \mu)w_{,zzz}$
$\frac{\Delta^2}{12} [\rho u_{,tt}]_{,tt}$	$\frac{h^2}{12} [\rho u_{,tt}]_{,xxx}$	$\frac{h^2}{12} [\rho u_{,tt}]_{,xyy}$	$\frac{h^2}{12} [\rho u_{,tt}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{12} [\rho u_{,tt}]_{,xyx}$	$\frac{h^2}{12} [\rho u_{,tt}]_{,xyy}$	$\frac{h^2}{12} [\rho u_{,tt}]_{,zyy}$	$\frac{h^2}{12} [\rho u_{,tt}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{6} [\partial_x^2 + \partial_y^2] [-(\lambda + \mu)v_{,xyy}]$	$\frac{h^2}{6} [\partial_x^2 + \partial_z^2] [-(\lambda + \mu)w_{,xyy}]$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,tt}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,xyy}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,xyx}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zyy}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{6} [\partial_x^2 + \partial_z^2] [-(\lambda + \mu)w_{,xyy}]$
$\frac{\Delta^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,tt}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,xxx}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,xyy}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,xyx}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,xyy}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zyy}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{6} [\partial_x^2 + \partial_z^2] [-(\lambda + \mu)w_{,xyy}]$	$\frac{h^2}{6} [\partial_x^2 + \partial_z^2] [-(\lambda + \mu)w_{,xyy}]$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{6} [\partial_x^2 + \partial_z^2] [-(\lambda + \mu)w_{,xyy}]$
$\frac{\Delta^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,xyy}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,xxx}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,xyy}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,xyx}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,xyy}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zyy}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{6} [\partial_x^2 + \partial_z^2] [-(\lambda + \mu)w_{,xyy}]$	$\frac{h^2}{6} [\partial_x^2 + \partial_z^2] [-(\lambda + \mu)w_{,xyy}]$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{6} [\partial_x^2 + \partial_z^2] [-(\lambda + \mu)w_{,xyy}]$
$\frac{\Delta^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,xxx}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,xyy}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,xyx}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,xyy}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zyy}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{6} [\partial_x^2 + \partial_z^2] [-(\lambda + \mu)w_{,xyy}]$	$\frac{h^2}{6} [\partial_x^2 + \partial_z^2] [-(\lambda + \mu)w_{,xyy}]$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{12} [-(\lambda + 2\mu)u_{,xxx}]_{,zzz}$	$\frac{h^2}{6} [\partial_x^2 + \partial_z^2] [-(\lambda + \mu)w_{,xyy}]$

Obr. 5.1. Členy v Taylorovom rozvoji E_x . Kvôli skráteniu zápisu sú zložky posunutia označené $u_x \equiv u$, $u_y \equiv v$, $u_z \equiv w$.



Obr. 5.2. Štruktúra nenulových koeficientov operátora $\mathbf{G}_{I,J,K}^m$.



Obr. 5.3. Štruktúra nenulových koeficientov operátora $\mathbf{H}_{I,J,K}^m$.

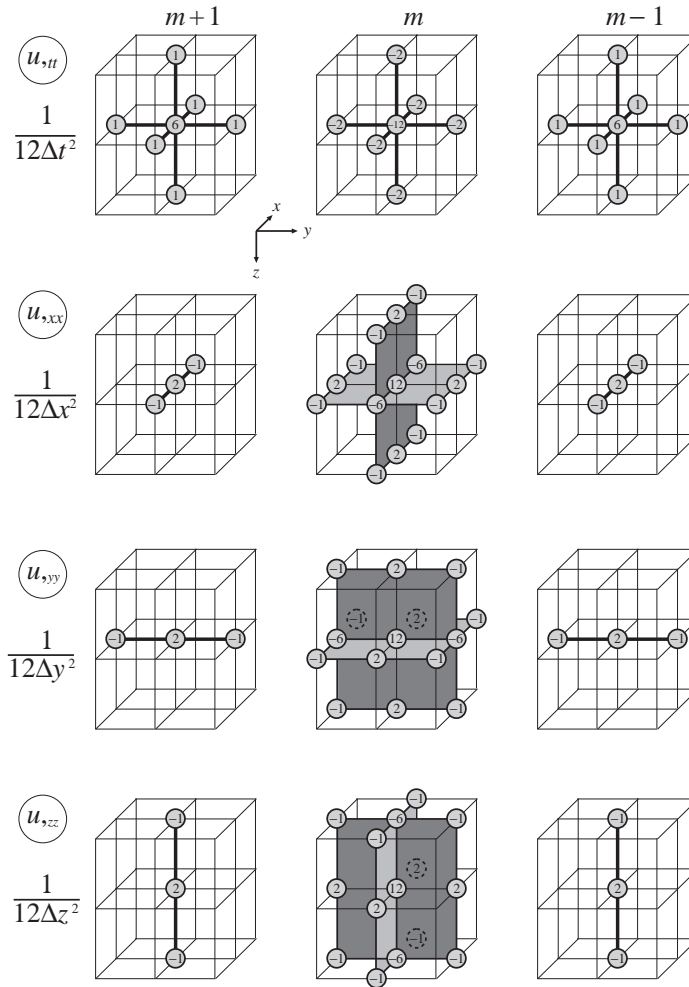
v symbolickom zápise v práci Moczo et al. (2007b). Schéma je ilustrovaná na obr. 5.4 a 5.5.

3D optimálne presná schéma je uvedená aj v práci Takeuchi a Geller (2000), pričom autori nekomentujú, akým spôsobom ju získali, preto predpokladáme, že bol použitý rovnaký postup ako pre 2D schémy – odvodenie pomocou konvolúcie. Túto schému porovnáme so schémou odvodenou v tejto práci. Môžeme konštatovať, že nami odvodená 3D optimálne presná schéma:

- je odlišná v dôsledku aplikovania iného postupu pri odvodení,
- používa namiesto jednostranných centrované aproximácie,
- má značne menší počet koeficientov v konečno-diferenčných aproximáciách,
- má vyššiu presnosť,
- má rovnakú podmienku stability ako konvenčné schémy – rovnica (3.11), pozri nasledujúcu kapitolu.

Takeuchi a Geller (2000) používajú pri konštruovaní pomocou konvolúcie jednostranné aproximácie derivácií čo má za následok veľký počet nenulových prvkov operátorov a tiež nižšiu presnosť. Pre 3D schému autori neuvádzajú podmienku stability, je pravdepodobné, že podobne ako v prípade 2D operátorov je prísnejšia ako pre konvenčnú

schému. Rovnaká stabilitná podmienka našej schémy a konvenčnej schémy znamená, že zväčšený rozsah operátora nemá za následok zmenšenie oblasti stability.

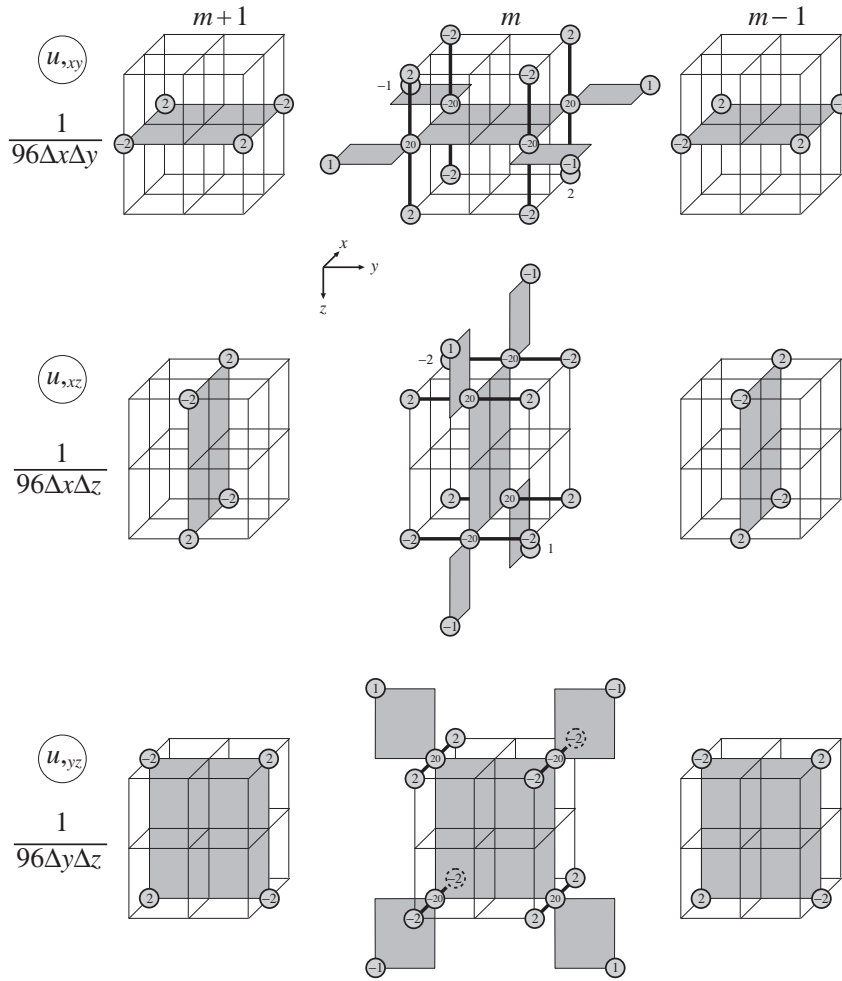


Obr. 5.4. Vizualizácia nezmiešaných 3D optimálne presných operátorov.

Schéma je implicitná, analogicky ako pre 1D prípad je možné použiť prediktor-korektor schému na jej riešenie. Analýzu prediktor-korektor schémy v 3D sme nevykonali ale očakávame podobné vlastnosti ako má prediktor-korektor schéma pre 1D optimálne presnú schému.

5.3 Analýza stability 3D optimálne presnej schémy

Pre praktické použitie je vhodné určiť podmienku stability konečno-diferenčnej schémy, ktorá špecifikuje, aký malý časový krok vo vzťahu na zvolený priestorový krok je nutné zvoliť, aby riešenie bolo ohraňované (inak je výsledok výpočtu pomocou danej schémy



Obr. 5.5. Vizualizácia zmiešaných 3D optimálne presných operátorov.

nepružiteľný). Jednou z najčastejšie používaných metód je von Neumannova stabilitná analýza, ktorá využíva rozklad chyby do harmonických zložiek. Pre jednotlivé posunutia predpokladáme tvar

$$[u_i]_{I,J,K}^m = A_i e^{-i\omega m\Delta t + ik_x I h + ik_y J h + ik_z K h}. \quad (5.12)$$

Posunutia v takomto tvare dosadíme do diskkrétnej aproximácie rovníc (5.6) - (5.8):

$$FDX_2 u_x + FDX_{xy} u_y + FDX_{xz} u_z = 0, \quad (5.13)$$

$$FDY_{yx} u_x + FDY_2 u_y + FDY_{yz} u_z = 0, \quad (5.14)$$

$$FDZ_{zx} u_x + FDZ_{zy} u_y + FDZ_2 u_z = 0. \quad (5.15)$$

Dostaneme homogénny systém pre amplitúdy A_x , A_y a A_z . Aby existovalo netriviálne riešenie, musí determinant matice sústavy byť nulový. Pre značnú komplikovanosť ne-

uvádzame explicitný tvar determinantu, podmienka jeho nulovosti dáva kubickú rovnicu pre hodnotu $W = \cos \omega \Delta t$ v závislosti od hodnôt $X = \cos k_x h$, $Y = \cos k_y h$, $Z = \cos k_z h$. Aby bola schéma stabilná, musí platiť

$$-1 \leq W \leq 1. \quad (5.16)$$

Predpokladáme, že podobne ako pre 1D a 2D prípad najprísnejšie podmienky by sme dostali pri extrémnych hodnotách X , Y , Z (tieto nadobúdajú hodnoty z intervalu $\langle -1, 1 \rangle$). Vyšetrením prípadov pre hodnoty $X = \pm 1$, $Y = \pm 1$, $Z = \pm 1$, dostaneme podmienku

$$\frac{\Delta t^2}{h^2 \rho} (\mu + \lambda + 2\mu) \leq 1, \quad (5.17)$$

ktorá vedie na rovnakú stabilitnú podmienku, aká bola odvodená pre konvenčné schémy:

$$\Delta t \leq \frac{h}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}}. \quad (5.18)$$

6 Závěry

Výpočtovú efektívnosť explicitných schém je možné dobre odhadnúť na základe počtu aritmetických operácií potrebných na výpočet hodnôt všetkých veličín nasledujúcej časovej hladiny z hodnôt v predchádzajúcich časových hladinách. Pre konvenčné schémy druhého rádu v čase toto zahŕňa výpočet posunutia z posledných dvoch časových hladín. Pri schémach striedavo usporiadaných v priestore je to výpočet napätí z posunutí a následný výpočet posunutí z vypočítaných napätí a známych posunutí (v danej a predchádzajúcej časovej hladine). Pri optimálne presných schémach výpočet pozostáva z prediktorového kroku (je identický s výpočtom v prípade konvenčných schém) a korigovania prediktora. V 1D prípade znamená použitie prediktor-korektor algoritmu približne 2.5-násobný počet aritmetických operácií samotného prediktora.

Geller et al. (2007) porovnávajú 1D konvenčné, striedavo usporiadané a optimálne presné schémy na simulovanie šírenia seizmických vln a konštatujú, že striedavo usporiadané schémy sú z hľadiska presnosti a výpočtovej náročnosti v podstate ekvivalentné s konvenčnými, optimálne presné schémy za cenu zdvojnásobenia výpočtovej náročnosti dávajú asi 10-násobne presnejšie výsledky. Z analýzy v 1D prípade teda nie je zrejmé, prečo sú striedavo usporiadané schémy uprednostňované pri riešení 2D a 3D problémov. Dôvod postupného prechodu od konvenčných k striedavo usporiadaným schémam boli problémy s nestabilitami na rozhraniach a pri vysokých hodnotách Poissonovho pomeru v prípade konvenčných schém, ktoré v 1D prípade nemožno pozorovať. Striedavo usporiadané schémy takéto správanie nevykazujú.

Pre optimálne presné schémy v dvojrozmernom prípade je výpočtová náročnosť tiež približne dvojnásobná, presnosť je podľa prvých testov (Takeuchi a Geller, 2000) asi 50-krát vyššia. Takeuchi a Geller (2000) tiež odhadujú, že pre 3D schému bude presnosť asi 100-násobne vyššia.

Tieto odhady je potrebné verifikovať podrobnejšími numerickými testami po naprogramovaní algoritmov realizujúcich jednotlivé schémy. Pokiaľ by sa potvrdili odhady o presnosti schém založených na optimálne presných operátoroch a preukázalo sa, že nevykazujú problémy so stabilitou na rozhraniach a pri vysokých hodnotách Poissonovho pomeru, mohli by schémy založené na optimálne presných operátoroch byť

zrejme jedným z najefektívnejších nástrojov v numerickom modelovaní seizmického pohybu.

Aby sa optimálne presné schémy mohli zaradiť medzi štandardne používané schémy na simulovanie šírenia seizmických vln, je potrebné

- skompletizovať analýzu Talorových rozvojev dosiaľ vyvinutých/publikovaných optimálne presných operátorov v 3D prípade
- analyzovať stabilitu a sieťovú disperziu schém
- vytvoriť program implementujúci prediktor-korektor algoritmus na riešenie optimálne presnej schémy
- numericky testovať prediktor-korektor algoritmus

Analýza optimálne presných operátorov v 3D bola už relatívne podrobne vykonaná, stále však existuje šanca, že by odlišný prístup umožňoval ešte zredukovať výpočtové nároky.

Stabilitná analýza bola vykonaná v 1D aj 3D prípade, analýza sieťovej disperzie bola zatiaľ vykonaná len v 1D prípade. Dôležitým prínosom by mohla byť teoretická analýza modelovania rozhraní.

Na implementáciu algoritmov použijeme programovací jazyk Fortran 95. Výpočtový software na našom pracovisku je v prevažnej miere vytváraný v tomto jazyku. Jeho výhody sú, že je multiplatformový, obsahuje pokročilú optimalizáciu kódu a možnosť paralelnej implementácie programu.

V súčasnosti programujeme 3D konvenčnú schému, ktorá je prediktorovým krokom algoritmu. Po jeho otestovaní do programu pridáme korektorovú časť, ktorá bude v každej časovej hladine opravovať posunutia vypočítané prediktorom s využitím optimálne presných operátorov.

Dobrá zhoda medzi numerickými a teoretickými výsledkami v 1D prípade je povzbudzujúca. Len samotné testovanie 3D schém môže však potvrdiť vlastnosti odhadované v teoretickej analýze a umožňuje overiť mieru výpočtovej efektívnosti. Preto nasledujúce úsilie bude sústredené na implementovanie odvodenej schémy do výpočtového programu.

Literatúra

- Geller, R.J., N. Hirabayashi a H. Mizutani.** A comparison of staggered-grid, conventional one-step, and optimally accurate finite-difference schemes for computing synthetic seismograms, *Geophysics*, submitted.
- Geller, R. J. a T. Ohminato, 1994.** Computation of synthetic seismograms and their partial derivatives for heterogeneous media with arbitrary natural boundary conditions using the Direct Solution Method. *Geophys. J. Int.* 116, 421-446.
- Geller, R. J. a N. Takeuchi, 1995.** A new method for computing highly accurate DSM synthetic seismograms. *Geophys. J. Int.* 123, 449-470.
- Geller, R. J. a 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.
- Iserles, A. a G. Strang, 1983.** Optimal accuracy of difference schemes. *Trans. Amer. Math. Soc.* 277, 779-803.
- Kristek, J. a P. Moczo, 2006.** On the accuracy of the finite-difference schemes: the 1D elastic problem. *Bull. Seism. Soc. Am.* 96, 2398–2414.
- Kristekova, M., J. Kristek, P. Moczo, and S. M. Day, 2006.** Misfit criteria for quantitative comparison of seismograms. *Bull. Seism. Soc. Am.* 96, 1836-1850.
- Marfurt, K. J., 1984.** Accuracy of finite-difference and finite-element modeling of the scalar and elastic wave equations. *Geophysics* 49, 533-549.
- Mizutani, H., 2002.** Accurate and efficient methods for calculating synthetic seismograms when elastic discontinuities do not coincide with the numerical grid. *University of Tokyo*, doktorská dizertačná práca.
- Moczo, P., M. Lucká, J. Kristek a M. Kristeková, 1999.** 3D displacement finite differences and a combined memory optimization. *Bull. Seism. Soc. Am.* 89, 69-79.
- Moczo, P., J. Kristek a L. Halada, 2000.** 3D 4th-order staggered-grid finite-difference schemes: stability and grid dispersion. *Bull. Seism. Soc. Am.* 90, 587-603.
- Moczo, P., J. Kristek, V. Vavryčuk, R. J. Archuleta a L. Halada, 2002.** 3D heterogeneous staggered-grid finite-difference modeling of seismic motion with

- volume harmonic and arithmetic averaging of elastic moduli and densities. *Bull. Seism. Soc. Am.* 92, 3042-3066.
- Moczo, P., J. O. A. Robertsson a L. Eisner, 2007a.** The finite-difference time-domain method for modeling of seismic wave propagation. In *Advances in Wave Propagation in Heterogeneous Earth*, 421-516, R.-S. Wu and V. Maupin, eds., *Advances in Geophysics* Vol. 48, R. Dmowska, ed. *Elsevier - Academic Press*.
- Moczo, P., J. Kristek, M. Galis, P. Pazak a M. Balazovjeh, 2007b.** The finite-difference and finite-element modeling of seismic wave propagation and earthquake motion. *Acta Physica Slovaca* Vol. 57, No. 2, 177 406.
- Takeuchi, N. a 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.
- Takeuchi, N. a R. J. Geller, 2003.** Accurate numerical methods for solving the elastic equation of motion for arbitrary source locations. *Geophys. J. Int.* 154, 852-866.
- 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.
- Zahradník, J. a E. Priolo, 1995.** Heterogeneous formulations of elastodynamic equations and finite-difference schemes. *Geophys. J. Int.* 120, 663-676.