UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

OPTIMALIZÁCIA KONEČNO-DIFERENČNÝCH SCHÉM NA MODELOVANIE SEIZMICKÉHO POHYBU

DIZERTAČNÁ PRÁCA

BRATISLAVA 2009

RNDr. Peter Pažák

Optimalizácia konečno-diferenčných schém na modelovanie seizmického pohybu

DIZERTAČNÁ PRÁCA

RNDr. Peter Pažák

Univerzita Komenského v Bratislave

Fakulta matematiky, fyziky a informatiky Katedra astronómie, fyziky Zeme a meteorológie

11-45-9 Geofyzika

Školiteľ: Prof. RNDr. Peter Moczo, DrSc.

Bratislava 2009

Poďakovanie

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

Ďakujem doc. Mgr. Jozefovi Kristekovi, PhD. za užitočné diskusie a pomoc v priebehu celej práce. Ďakujem Mgr. Martinovi Gálisovi, PhD. za dodanie výsledkov pre metódu konečných elementov a pomoc pri riešení technických problémov.

Ďakujem kolegom z Katedry astronómie, fyziky Zeme a meteorológie FMFI UK a z Geofyzikálneho ústavu SAV za užitočné diskusie, vytvorenie tvorivého prostredia, za ich podporu a porozumenie.

Abstrakt

RNDr. Peter Pažák

Optimalizácia konečno-diferenčných schém na modelovanie seizmického pohybu

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

Školiteľ: Prof. RNDr. Peter Moczo, DrSc.

Bratislava 2009 125 strán, 10 strán prílohy, CD-ROM

Predkladaná dizertačná práca sa zaoberá presnosťou a výpočtovou efektívnosťou konečno-diferenčného riešenia pohybovej rovnice elastického kontinua ako metódy numerického modelovania seizmického pohybu.

V prvej časti charakterizujeme základné typy konečno-diferenčných schém – konvenčné, striedavo usporiadané, čiastočne striedavo usporiadané a optimálne presné schémy. Optimálne presné schémy definujeme na základe štruktúry chyby aproximácie a uvádzame spôsob ich odvodenia pomocou rozvoja do Taylorových radov.

Cieľom dizertačnej práce bolo analyzovať štruktúru chýb aproximácií konečnodiferenčných schém, sieťovú disperziu a presnosť numerických riešení.

V 1D prípade sme ukázali, že prediktor-korektor schéma založená na optimálne presnej schéme sa redukuje na Lax-Wendroffovu schému; obe sú teda optimálne presné schémy. Odvodili sme disperzné vzťahy a pomocou nich sme interpretovali výsledky numerických testov 1D konvenčnej, striedavo usporiadanej a prediktorkorektor schémy pri šírení elastických vĺn v homogénnom prostredí. Ukázali sme súvislosť hodnoty fázového rozdielu (misfitu) a rozdielu v obálke s chybou fázovej/grupovej rýchlosti. Hlavná časť práce je venovaná 3D schémam. Najprv sme analyzovali konvenčnú schému. Odvodili sme vzťahy pre sieťovú disperziu. Sieťová disperzia indikovala nepresnosť schémy v prostredí s vysokým Poissonovým pomerom.

Na základe kritéria pre optimálne presné konečno-diferenčné schémy sme odvodili implicitnú 3D optimálne presnú schému. Odvodili sme prediktor-korektor algoritmus založený na tejto optimálne presnej schéme, ktorý umožňuje vyhnúť sa priamemu riešeniu implicitnej schémy.

Vyvinuli sme výpočtový program v jazyku Fortran 90/95, ktorý numericky realizuje prediktor-korektor algoritmus riešenia optimálne presnej schémy. Vykonali sme rozsiahle parametrické výpočty niekoľkými typmi schém a následne analyzovali numerické výsledky. Numerické výsledky sme porovnali aj s riešeniami získanými metódou konečných elementov.

Teoretická analýza a numerické testy viedli k záverom jednak o vlastnostiach konečno-diferenčných schém (konvenčnej, striedavo usporiadanej, optimálne presnej), jednak o vlastnostiach štandardnej formulácie metódy konečných elementov.

Kľúčové slová: optimálne presné schémy, metóda konečných diferencií, sieťová disperzia, výpočtová efektívnosť, numerické riešenie pohybovej rovnice kontinua, modelovanie seizmického pohybu, metóda konečných elementov

Abstract

RNDr. Peter Pažák

Optimization of the finite-difference schemes for modeling seismic motion

Comenius University Bratislava Faculty of Mathematics, Physics and Informatics Department of Astronomy, Physics of the Earth, and Meteorology

Supervisor: Prof. RNDr. Peter Moczo, DrSc.

Bratislava 2009

125 pages, 10-page appendix, CD-ROM

The dissertation deals with accuracy and computational efficiency of the finitedifference solution of the elastodynamic equation as the method of numerical modeling of seismic motion.

In the first part of the dissertation we characterize basic types of the finitedifference schemes – conventional, staggered-grid, partly staggered-grid and optimally-accurate schemes. We define the optimally-accurate schemes on the basis of the structure of the approximation error and show their derivation using the Taylor expansion.

The goal of the dissertation was to analyze structure of the approximations errors of the finite-difference schemes, grid dispersion and accuracy of the numerical solutions.

We showed for the 1D problem that the predictor-corrector scheme based on the optimally-accurate scheme reduces to the Lax-Wendroff scheme; thus they are both optimally accurate. We derived dispersion relations and used them to interpret results of the numerical tests of the 1D conventional, staggered-grid and predictorcorrector schemes for elastic wave propagation in a homogeneous medium. We showed relation between the values of the phase and envelope misfits and error of the phase velocity. The main part of the dissertation is devoted to 3D schemes. First we analyzed the conventional scheme. We derived relations for the grid dispersion. The grid dispersion indicated inaccuracy of the scheme in a medium with high Poisson's ratio.

We derived an implicit 3D optimally-accurate scheme on the basis of the criterion for the optimally-accurate finite-difference schemes. We derived a predictorcorrector algorithm corresponding to the implicit scheme. The algorithm enables us to avoid a direct solution of the implicit scheme.

We developed a Fortran 90/95 computer program for numerical calculations based on the predictor-corrector algorithm. We performed extensive parametric calculations with several types of the finite-difference schemes. We then analyzed the numerical results. We also used the finite-element calculations for comparing the numerical results.

The theoretical analysis and analysis of the numerical results led us to conclusions on the properties of the finite-difference schemes and standard formulation of the finite-element method.

Key words: optimally accurate schemes, the finite-difference method, grid dispersion, computational efficiency, numerical solution of the elastodynamic equation, modeling of seismic motion, the finite-element method

Predhovor

Otrasy zemského povrchu v dôsledku náhleho uvoľnenia naakumulovanej energie na seizmoaktívnom zlome môžu zapríčiniť smrť ľudí a spôsobiť veľké materiálne škody. Aj v dôsledku toho, že osídlenie je postupne stále hustejšie a viazané najmä na seizmicky ohrozené a nebezpečné lokality, aj relatívne malé zemetrasenia majú často ničivé účinky.

Jednou z hlavných úloh, ktorú seizmológovia riešia, je preto predpoveď zemetrasení, ktorá má poskytnúť informáciu, kedy, kde a aké veľké zemetrasenie sa vyskytne, aby bolo možné vykonať opatrenia a zabrániť obetiam a škodám. V súčasnosti sú takéto predpovede nerealizovateľné a dokonca nie je jasné, či v budúcnosti budú možné.

Aj keď nevieme zemetrasenia predpovedať, môžeme a musíme predpovedať účinky budúcich zemetrasení. Vďaka tomu, že je možné simulovať pohyb zemského povrchu (seizmický pohyb) pri hypotetickom zemetrasení, môžeme dizajnovať stavby tak, aby sa pri potenciálnom zemetrasení nezrútili a nespôsobili smrť ľudí.

Na seizmický pohyb na danej lokalite majú vplyv predovšetkým procesy na seizmoaktívnom zlome, šírenie vyžiarených vĺn od zlomu k lokalite a efekty spojené s prítomnosťou lokálnej geologickej štruktúry. Pri určovaní seizmického pohybu je potrebné zahrnúť všetky tri procesy a v dôsledku ich komplikovanosti nie je možné úlohu riešiť inak ako numericky.

Simulovanie šírenia seizmických vĺn je náročné na výpočtovú techniku. Vývoj výpočtovo efektívnych metód, ktoré by počítali dostatočne presne a s rozumnými výpočtovými nárokmi je nevyhnutný a nie je možné redukovať problém na rozvoj hardvéru.

Cieľom dizertačnej práce bolo analyzovať štruktúru chýb aproximácií konečnodiferenčných schém, sieťovú disperziu a presnosť numerických riešení.

Obsah

Úv	od.			1	
1	Súčasný stav problematiky				
	1.1	Šíreni	e seizmických vĺn a seizmický pohyb	3	
	1.2	Nume	rické modelovanie šírenia seizmických vĺn	5	
		1.2.1	Súčasné metódy numerického modelovania	6	
	1.3	ła konečných diferencií	8		
		1.3.1	Aproximácie derivácií a výber bodov na aproximáciu	8	
		1.3.2	Vlastnosti konečno-diferenčných schém	12	
		1.3.3	Analýza stability	13	
		1.3.4	Analýza sieťovej disperzie	14	
		1.3.5	Konvenčné konečno-diferenčné schémy	14	
		1.3.6	Striedavo usporiadané schémy	18	
		1.3.7	Čiastočne striedavo usporiadané schémy	22	
		1.3.8	Lax-Wendroffove schémy	22	
		1.3.9	Optimálne presné schémy	24	
	Všeobecná podmienka optimálnej presnosti operátora . Odvodenie 1D optimálne presnej konečno-diferenčnej sc				
		L	ax-Wendroffova schéma	33	
		P	rediktor-korektor schéma	34	
		Η	eterogénna optimálne presná schéma	35	
		1.3.10) Simulácia neodrážajúcich hraníc	38	
		1.3.11	Simulácia seizmického zdroja	39	
2	Ciel	e dizer	tačnej práce	41	
3	Výsledky dizertačnej práce				
	3.1	1D pr	oblém	43	
		3.1.1	Presnosť aproximácií 1D schém	43	

		3.1.2	Porovnanie siet'ovej disperzie 1D schém
	3.2	3D pro	oblém
		3.2.1	Siet'ová disperzia konvenčnej schémy
		3.2.2	Optimálne presná schéma
		3.2.3	Sieťová disperzia optimálne presnej schémy
		3.2.4	Prediktor-korektor schéma
		3.2.5	Výpočtové programy Dconv2, Dconv4, Doptm2, Doptm4 71
		3.2.6	Numerické testovanie konečno-diferenčných schém 73
		A	nalytické riešenie pre bodový zdroj
		K	onfigurácia numerických testov
		A	nalýza a zhodnotenie numerických testov
4	Závo	ery	
Li	teratú	ra	

Zoznam obrázkov

1	Model lokálnej štruktúry.	5
2	Priestorové usporiadanie premenných v sieťových bunkách.	10
3	Priestorové usporiadanie veličín v striedavo usporiadanej sieti.	20
4	Schematicky znázornené určovanie efektívnych materiálových para- metrov z hodnôt veličín v okolí bodu aproximácie.	21
5	Kumulatívny efekt sieťovej disperzie.	36
6	Časopriestorové pozície používané na aproximácie v schémach	47
7	Relatívna chyba grupovej rýchlosti 1D schém.	50
8	Relatívna chyba fázovej rýchlosti 3D schémy Dconv2 v smere osi	55
9	Relatívna chyba fázovej rýchlosti 3D schémy Dconv2 v smere diagonály.	56
10	Relatívna chyba fázovej rýchlosti 3D schémy Dconv2 v smere tele- sovej diagonály.	57
11	Smerová závislosť β_2^{grid}/β v sieťovej rovine	58
12	Vytváranie štruktúry chyby aproximácie.	60
13	Štruktúra nenulových koeficientov operátora $ ilde{\mathbf{G}}_x$	61
14	Štruktúra nenulových koeficientov operátora $ ilde{\mathbf{H}}_{xy}$.	62
15	Vizualizácia optimálne presných nezmiešaných druhých derivácií v operátoroch $\tilde{\mathbf{G}}_x$, $\tilde{\mathbf{G}}_y$, $\tilde{\mathbf{G}}_z$.	63
16	Vizualizácia optimálne presných zmiešaných druhých derivácií v ope- rátoroch $\tilde{\mathbf{H}}_{xy}$, $\tilde{\mathbf{H}}_{xz}$, $\tilde{\mathbf{H}}_{yz}$.	64
17	Relatívna chyba fázovej rýchlosti 3D schémy DOA2 v smere osi.	67
18	Relatívna chyba fázovej rýchlosti 3D schémy DOA2 v smere diagonály.	68
19	Relatívna chyba fázovej rýchlosti 3D schémy DOA2 v smere telesovej diagonály.	69
20	Konfigurácia bodového zdroja.	73
21	Časová závislosť sklzu a jej amplitúdové spektrum.	75
22	Priebeh posunutia generovaného bodovým DC zdrojom vo vzdiale- nosti $d = 6\lambda_{dom}^S$.	76

23	Amplitúda členov presného riešenia pre bodový DC zdroj v závislostiod vzdialenosti.77
24	Výpočtový model
25	Grafické znázornenie výpočtových časov a pamäťových nárokov 81
26	R2, F_S , $N = 6$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti
27	R5, F_S , $N = 6$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti
28	R2, F_P , $N = 6$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti
29	R5, F_P , $N = 6$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti
30	R2, F_S , $N = 8$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti
31	R5, F_S , $N = 8$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti
32	R2, F_P , $N = 8$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti 90
33	R5, F_P , $N = 8$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti 91
34	R2, F_S , $N = 10$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti 92
35	R5, F_S , $N = 10$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti 93
36	R2, F_P , $N = 10$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti 94
37	R5, F_P , $N = 10$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti 95
38	R2, F_S , $N = 12$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti 96
39	R5, F_S , $N = 12$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti 97
40	R2, F_P , $N = 12$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti 98
41	R5, F_P , $N = 12$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti 99
42	R2, F_S , $N = 14$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti 100
43	R2, F_P , $N = 14$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti 102
44	R2, smer F_P : EM a PM v závislosti od vzorkovania
45	R2, smer F_S : EM a PM v závislosti od vzorkovania 105
46	R5, smer F_P : EM a PM v závislosti od vzorkovania 106
47	R5, smer F_S : EM a PM v závislosti od vzorkovania 107
48	R10, smer F_P : EM a PM v závislosti od vzorkovania
49	R10, smer F_S : EM a PM v závislosti od vzorkovania 109
50	R2 - Obraz vlnového poľa, radiálna zložka
51	R10 - Obraz vlnového poľa, radiálna zložka

52	R2 - Obraz vlnového poľa, transverzálna zložka
53	R10 - Obraz vlnového poľa, transverzálna zložka
54	R10 - seizmogramy vo vzdialenosti $d = 6\lambda_{dom}^S$
55	R10, F_S , $N = 6$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti
56	R10, F_P , $N = 6$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti
57	R10, F_S , $N = 8$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti
58	R10, F_P , $N = 8$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti
59	R10, F_S , $N = 10$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti 130
60	R10, F_P , $N = 10$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti 131
61	R10, F_S , $N = 12$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti 132
62	R10, F_P , $N = 12$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti 133
63	R10, F_S , $N = 14$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti 134
64	R10, F_P , $N = 14$, EM a PM v závislosti od vzdialenosti

Zoznam tabuliek

1	Vektorové amplitúdy analytického riešenia	73
2	Vektorové amplitúdy pre smery F_S a F_P	74
3	Rozmery modelov pre vzorkovanie $N = \lambda_{min}/h = (6, 8, 10, 12, 14).$	79
4	Tabuľka výpočtov a výpočtových časov, tabuľka pamäťových nárokov.	80

Úvod

Metóda konečných diferencií je intenzívne využívanou a vyvíjanou metódou na simulovanie šírenia seizmických vĺn, šírenia trhliny na zlomovej ploche a lokálnych efektov. Vďaka možnostiam metódy riešiť problémy v komplexných heterogénnych modeloch s relatívne nízkymi výpočtovými nárokmi, počítačové programy implementujúce metódu konečných diferencií patria medzi najefektívnejšie. Pod efektívnosťou rozumieme dosiahnutie požadovanej presnosti výsledkov s relatívne nízkymi nárokmi na pamäť a výpočtový čas počítača.

Vďaka tomu, že požadujeme konzistenciu konečno-diferenčných rovníc s pôvodným diferenciálnym problémom, je teoreticky možné dosiahnuť ľubovoľnú presnosť pri dostatočne malom časovom a priestorovom kroku. Nárast výpočtových nárokov pri zjemňovaní vzorkovania môže byť však veľmi dramatický. Ukazuje sa, že často je výhodnejšie použiť metódu vyššieho rádu, ako použiť jemnejšie vzorkovanie.

Aproximácie používané na odvodenie konečno-diferenčných rovníc vedú na schémy rôznej presnosti a výpočtovej náročnosti. Samozrejmou snahou je dosiahnuť čo najmenší pomer náročnosť/presnosť. Schémy na striedavo usporiadaných sieťach sa vyznačujú vysokou efektívnosťou a preto sú najčastejšie používané. Usporiadanie veličín v sieti je také, že v jednom priestorovom bode nie sú k dispozícii všetky zložky posunutia ani tenzora napätia. Tento fakt sťažuje napr. implementáciu zákona trenia na zlomovej ploche, prípadne niektorých typov okrajových podmienok. Pre konvenčné schémy, ktoré majú všetky veličiny lokalizované v jednom sieťovom bode, bola zistená vysoká sieťová disperzia, čo limituje ich praktické používanie.

Spôsobom, ako dosiahnuť súčasne vysokú presnosť a lokalizáciu premenných v jednom sieťovom bode, je 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.

Úvod

V dizertačnej práci v prvej kapitole sumarizujeme súčasný stav poznatkov v problematike, v druhej kapitole si stanovujeme ciele práce, tretia kapitola obsahuje výsledky práce. V nej analyzujeme 1D optimálne presné konečno-diferenčné operátory, vyšetrujeme vlastnosti získaných optimálne presných a prediktor-korektor schém. Tieto poznatky potom aplikujeme pri odvodení 3D optimálne presných operátorov a 3D optimálne presnej schémy a 3D prediktor-korektor algoritmu. Odvodené schémy numericky testujeme v kanonickom prípade šírenia vlnenia generovaného bodovým zdrojom v neobmedzenom homogénnom priestore. Výsledky sumarizujeme v poslednej časti práce.

1 Súčasný stav problematiky

1.1 Šírenie seizmických vĺn a seizmický pohyb

Seizmický pohyb je pohyb povrchu Zeme na danej lokalite počas zemetrasenia. Vzniká v dôsledku šírenia seizmických vĺn horninami pri povrchu Zeme. Ak chceme určiť seizmický pohyb počas možných budúcich zemetrasení, musíme do úvah/výpočtov, čo najpresnejšie zahrnúť procesy v ohnisku zemetrasenia (t.j., spontánne šírenie trhliny, počas ktorého dochádza k vyžarovaniu seizmických vĺn), šírenie seizmických vĺn od zdroja k lokalite a lokálne geologické podmienky. V dizertačnej práci sa zameriame predovšetkým na modelovanie šírenia seizmických vĺn.

Mechanika kontinua umožňuje matematicky popísať šírenie seizmických vĺn v Zemi pomocou parciálnych diferenciálnych rovníc. Základnou rovnicou je pohybová rovnica kontinua

$$\rho \ddot{u}_i - \sigma_{ij,j} - f_i = 0; \qquad i, j \in \{x, y, z\},$$
(1)

kde $\rho(\vec{x})$ je hustota, $u_i(\vec{x}, t)$ sú zložky posunutia (\ddot{u}_i označuje jeho druhú časovú deriváciu), $\sigma_{ij}(\vec{x}, t)$ sú zložky tenzora napätia, ktorý charakterizuje napäťový stav v danom bode ($\sigma_{ij,j}$ je jeho priestorová derivácia podľa x_j majúca význam objemovej hustoty plošných síl) a f_i sú zložky hustoty objemovej sily. V našom prípade zanedbáme útlm seizmických vĺn v dôsledku odchýlky od dokonale elastického správania materiálu. Potom stav napätia v danom bode v kontinuu súvisí s deformáciou v okolí tohoto bodu prostredníctvom Hookeovho zákona

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl}e_{kl}; \qquad i, j, k, l \in \{x, y, z\},$$
(2)

kde c_{ijkl} je tenzor elastických koeficientov a e_{kl} tenzor malých deformácií. V najjednoduchšom izotropnom prípade $c_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})$ a dostávame Hookeov zákon pre dokonale elastické izotropné kontinuum

$$\sigma_{ij} = \lambda u_{k,k} \delta_{ij} + \mu(u_{i,j} + u_{j,i}); \qquad i, j, k \in \{x, y, z\},$$
(3)

kde λ a μ Lamèove elastické koeficienty. Pohybovú rovnicu kontinua v danom bode môžeme považovať za pohybovú rovnicu elementárneho objemu kontinua, ktorý sa v dôsledku pôsobenia plošných a objemových síl pohybuje v malom okolí svojej počiatočnej pozície.

Všetky funkcie sú po častiach spojité funkcie priestorových súradníc a času. Zmeny materiálových parametrov sú v priestore spojité, ale môžu byť aj skokové ak sú prítomné rozhrania. Ak dosadíme rovnicu (3) do (1) dostaneme fomuláciu pohybovej rovnice v posunutiach:

$$\rho \ddot{u}_i - (\lambda u_{k,k})_{,i} - (\mu u_{i,j})_{,j} - (\mu u_{j,i})_{,j} - f_i = 0.$$
(4)

Za predpokladu homogénneho prostredia rovnica prejde do tvaru:

$$\rho \ddot{u}_{i} - (\lambda + \mu) u_{j,ji} - \mu u_{i,jj} - f_{i} = 0; \qquad i, j \in \{x, y, z\}.$$
(5)

Aby bola úloha korektne definovaná, musíme spolu s rovnicou (1) definovať počiatočné a okrajové podmienky. Zvyčajne sa uvažuje počiatočná podmienka (počiatočný stav) s nulovými posunutiami a rýchlosťami:

$$u_i(\vec{x}, 0) = 0, (6)$$

$$\dot{u}_i(\vec{x}, 0) = 0. (7)$$

Znamená to, že počítané posunutia (a napätia) sú určované vzhľadom na počiatočný stav, ktorý je volený ako referenčný.

Ak simulujeme šírenie vlnenia v zemskom telese, ktoré ohraničuje rozhranie horniny s atmosférou (ktorú vďaka minimálnemu množstvu energie, ktoré do nej prechádza, môžeme uvažovať ako vákuum), veľmi dôležité je presne modelovať podmienku nulovosti napätia na voľnom povrchu

$$\sigma_{ij}(\vec{x},t)n_j(\vec{x}) = 0; \quad \vec{x} \in S, \tag{8}$$

kde ${\cal S}$ je plocha definujúca voľný povrch.

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. Ich odvodeniu a implementácii sa budeme venovať v kapitole 1.3.10. Na vnútorných rozhraniach je taktiež potrebné splniť podmienku spojitosti napätia a posunutia, na zlomovej ploche tangenciálne napätie určujeme zo zákona trenia (obr. 1).



Obr. 1. Model lokálnej štruktúry s vyznačenými oblasťami platnosti pohybovej rovnice kontinua (1), okrajovej podmienky na voľnom povrchu (2), podmienky neodrážajúcej hranice (3) a zákona trenia na seizmoaktívnom zlome (4).

Pohybová rovnica je hyperbolická parciálna diferenciálna rovnica druhého rádu v priestore a čase pre hľadané posunutie. Obsahuje časové a priestorové parciálne derivácie posunutia a je analyticky riešiteľná len pre veľmi jednoduché konfigurácie prostredia a budenia vlnového poľa.

1.2 Numerické modelovanie šírenia seizmických vĺn

Na matematický popis procesov, ktoré majú dominantný vplyv na výsledný seizmický pohyb na záujmovej lokalite existuje veľké množstvo matematických modelov. Tie sa odlišujú realistickosťou zahrnutia generovania vlnenia na seizmoaktívnom zlome, šírenia vlnenia v zemskom vnútri od zlomu k lokalite a vplyvu lokálnej geologickej štruktúry na seizmický pohyb. Aj tie najjednoduchšie z modelov vyžadujú riešenie parciálnych diferenciálnych rovníc v heterogénnych a geometricky nepravidelných oblastiach aproximujúcich reálne štruktúry v zemskom vnútre. Riešenie analytickými metódami nie je možné a je nutné použiť numerické metódy, ktoré umožňujú nájsť dostatočne presné približné riešenie s využitím výpočtovej techniky.

Ďalej budeme sledovať analýzu súčasného stavu v Moczo et al. (2007b). Numerické riešenie parciálnych diferenciálnych rovníc spočíva ich transformovaní na systém algebraických rovníc, ktorý môže byť efektívne riešený na počítači. Počítače

Súčasný stav problematiky

pracujú s približnými číslami a majú obmedzenú kapacitu pamäte, preto spôsob, akým sa pôvodný problém transformuje na algebraické rovnice, je veľmi dôležitý a má veľký vplyv na výpočtové nároky na pamäť a čas počítača. Dve najzákladnejšie charakteristiky výpočtových metód sú presnosť metódy a výpočtová náročnosť, pričom vo väčšine prípadov vyššia presnosť znamená aj väčšiu výpočtovú náročnosť. Preto je možné hovoriť o optimalizácii, kedy sa snažíme dosiahnuť vysokú presnosť a čo najmenšiu výpočtovú náročnosť.

Na presnosť a výpočtovú náročnosť má vplyv najmä spôsob diskretizácie (pokrytia výpočtovej oblasti sieťou čím, sa zabezpečí reprezentovanie riešenia konečným súborom hodnôt spracovateľných počítačom) a aproximácie derivácií (aproximovanie je nutné, pretože diskrétne hodnoty nie je možné derivovať). Existuje veľké množstvo numerických metód, ktoré sa líšia spôsobmi a presnosťou aproximácie derivácií.

V ďalšej kapitole sa budeme venovať v súčasnosti najčastejšie používaným metódam používaným na numerické modelovanie šírenia seizmických vĺn.

1.2.1 Súčasné metódy numerického modelovania

V súčasnosti sa na modelovanie šírenia seizmických vĺn používa viacero metód. Každá z metód je veľmi dobre aplikovateľná na určitú množinu problémov, pre ktorú poskytuje veľmi presné riešenie s relatívne nízkymi výpočtovými nárokmi. Samozrejme, pre iné typy problémov môže byť úplne nevhodná a neefektívna a používateľ by mal mať dostatočný prehľad, aby vedel rozhodnúť, ktorú metódu využije.

Podľa spôsobu diskretizácie problému môžeme numerické metódy rozdeliť na hraničné, doménové a hybridné. *Hraničné metódy* (napr. metóda diskrétnych vlnových čísel, Bouchon, 1981) sú veľmi presné, ale použiteľné len na veľmi jednoduché modely, ktoré sú len hrubým priblížením k reálnej štruktúre Zeme (napr. homogénne vrstvy na polpriestore). Medzi najvýznamnejšie *doménové metódy* patria napríklad metóda konečných elementov (napr. Serón et al., 1989; Bielak et al., 2003; Yoshimura et al., 2003), metóda konečných diferencií (napr. Moczo et al., 2004b, 2007a,b), metóda spektrálnych elementov (napr. Komatitsch a Tromp, 1999; Chaljub et al., 2007) a ADER-DG metóda (napr. Käser a Dumbser, 2006; Dumbser a Käser, 2006; Käser et al., 2007; de la Puente et al., 2007; Dumbser et al., 2007). Doménové metódy sú aplikovateľné na realistické 3D nehomogénne modely. Pre jednoduché modely sú spravidla menej presné ako hraničné metódy. Kombináciou dvoch alebo viacerých metód tak, aby sa eliminovali nevýhody a využili výhody jednotlivých metód, vznikajú tzv. *hybridné metódy*. Niekedy môže byť vhodné použiť jednu metódu na vyriešenie priestorovej závislosti a inú metódu na vyriešenie časovej závislosti (napr. Alexeev a Mikhailenko, 1980). V iných prípadoch môže byť vhodné použiť rôzne metódy v rôznych častiach výpočtovej oblasti (napr. Ohtsuki a Harumi, 1983; Shtivelman, 1984, 1985; Van den Berg, 1984; Kummer et al., 1987; Stead a Helmberger, 1988; Kawase, 1988; Gaffet a Bouchon, 1989; Emmerich, 1989, 1992; Fäh, 1992; Fäh et al., 1993; Rovelli et al., 1994; Bouchon a Coutant, 1994; Robertsson, 1996; Zahradník a Moczo, 1996; Moczo et al., 1997; Lecomte, 2004; Ma et al., 2004; Gális et al., 2008).

Metóda konečných diferencií (MKD) a metóda konečných elementov (MKE) patria medzi najrobustnejšie metódy. Vo všeobecnosti je MKE v porovnaní napr. s MKD pre rovnaký model výpočtovo náročnejšia. Jej výhodou však je, že konečnoelementná sieť je prispôsobená modelu a vďaka tomu je dobre modelovaná okrajová podmienka na voľnom povrchu a vnútorných rozhraniach.

Veľmi perspektívne sa javia hybridné metódy spájajúce MKE a MKD (Moczo et al., 1997; Ma et al., 2004; Gális et al., 2008). MKE je aplikovaná v časti modelu v blízkosti zlomovej plochy a topografie voľného povrchu, postupne jej neštruktúrovaná sieť prechádza do rovnomernej siete prechodovej zóny, v ktorej sú posunutia spoločné s MKD. MKD pokrýva ostatné časti modelu s jednoduchšími okrajovými podmienkami, pre ktoré je relatívne presná a výpočtovo nenáročná.

Metóda konečných diferencií je často využívaná vďaka jej nízkym výpočtovým nárokom a jednoduchej implementácii do výpočtových programov. Na druhej strane výsledky získané použitím najjednoduchších aproximácií s najnižším rádom sú často značne nepresné. Od vzniku metódy sa autori snažili spresniť metódu najmä použitím vyššieho rádu aproximácie (Bayliss et al., 1986; Levander, 1988). Vyššie rády aproximácie je možné relatívne jednoducho odvodiť a aplikovať pre homogénne prostredie, avšak pre 3D heterogénne prostredie je odvodenie veľmi komplikované

a často výsledkom je strata presnosti na rozhraniach, preto vývoj schém presných pre komplikované heterogénne modely pokračuje.

1.3 Metóda konečných diferencií

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.

Metódu konečných diferencií je možné využiť na numerické riešenie obyčajných a parciálnych diferenciálnych rovníc. Jej princíp spočíva v nahradení diferenciálnej rovnice platnej vo vnútorných bodoch výpočtovej oblasti konečným počtom konečno-diferenčných rovníc, ktoré popisujú vzťah medzi hodnotami riešenia v konečno diferenčnej sieti. Týmto spôsobom je problém prevedený na problém riešenia systému rovníc, ktorý je možné riešiť numericky na počítačoch.

1.3.1 Aproximácie derivácií a výber bodov na aproximáciu

V rovnici 5 je neznámou funkciou posunutie. V počítači je možné uložiť len konečné množstvo údajov, preto musíme vybrať konečný počet bodov, v ktorých hodnoty posunutia budeme hľadať. Vo väčšine seizmologických aplikácií je vhodné, aby hľadané hodnoty rovnomerne pokrývali celú výpočtovú oblasť. Najjednoduchším usporiadaním je rovnomerná konečno-diferenčná sieť

$$x_{I} = x_{0} + Ih,$$

$$y_{J} = y_{0} + Jh,$$

$$z_{K} = z_{0} + Kh,$$
(9)

kde h je priestorový krok. Takéto usporiadanie je výhodné, pretože aproximácie majú jednotný tvar vo veľkej časti výpočtového modelu a v počítačovom programe sa jednoducho implementujú. Na druhej strane sieť nie je možné prispôsobiť hranici modelu prípadne rozhraniam, čo spôsobuje obtiažnosť splnenia okrajových podmienok. Rovnomernú sieť je možné definovať aj v iných súradnicových sústavách geometriou bližších geometrii problému (sférická pre celú Zem, cylindrická pre vrty a podobne). My sa v ďalšom obmedzíme len na kartézsku súradnicovú sústavu a rovnomerné siete definované v nej.

Časová os je najčastejšie diskretizovaná podobne ako priestorová, t.j. s konštantným časovým krokom (Δt):

$$t_m = t_0 + m\Delta t. \tag{10}$$

Konečno-diferenčná sieť je tvorená opakovaním konečno-diferenčných buniek. Najčastejšie sa používajú usporiadania, ktorých konečno-diferenčné bunky sú zobrazené na obr. 2. Pri konvenčných schémach sa aproximácie všetkých funkcií nachádzajú v jednom bode. Pri čiastočne striedavo usporiadaných schémach sa posunutia alebo rýchlosti posunutia nachádzajú v jednom sieťovom bode, zložky napätia v inom. Pri striedavo usporiadaných schémach sa každá zložka posunutia alebo rýchlosti posunutia nachádza v jednom sieťovom bode, normálové zložky tenzora napätí sa nachádzajú v jednom sieťovom bode a každá strižná zložka tenzora napätia sa nachádza v jednom sieťovom bode. Striedavé usporiadanie v priestore je doplnené striedavým usporiadaním v čase. Ku každej zo sietí sa viažu špecifické aproximácie derivácií a teda aj špecifické schémy, najdôležitejšie z nich stručne sumarizujeme v kapitolách 1.3.5 - 1.3.9.

Hodnoty posunutia v sieťových bodoch definovaných rovnicami (9) budeme skrátene označovať pomocou indexov

$$u(t_m + M \Delta t, x_I + ih, y_J + jh, z_K + kh) \leftrightarrow u_{I+i,J+j,K+k}^{m+M}, \qquad (11)$$

pričom M, i, j, k môžu nadobúdať celočíselné hodnoty v prípade konvenčných schém, v prípade striedavo usporiadaných schém nadobúdajú aj poločíselné hodnoty. Súčasne v striedavo usporiadaných schémach sú hľadanými funkciami, ktorých derivácie je potrebné aproximovať, aj hodnoty zložiek tenzora napätia. Nasledujúcu analýzu vykonáme len pre parciálne derivácie podľa premenej x, analogicky by sme postupovali aj prípade derivácií podľa y, z, t a prípadne zmiešaných derivácií.

Pretože vnútri horninových blokov je posunutie (napätie) spojitou funkciou priestorových súradníc a priestorový krok je dostatočne malý, môžeme posunutia v iných pozíciách, ako je pozícia aproximácie, vyjadriť pomocou Taylorových rozvojov



Obr. 2. 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).

(Taylor Expansion = TE) so stredom v bode aproximácie (t_m, x_I, y_J, z_K) :

$$TE_{h}\{u(t_{m}, x_{I} + k_{p}h, y_{J}, z_{K})\} = = \sum_{j=0}^{l-1} \frac{(k_{p}h)^{j}}{j!} \frac{\partial^{j}u}{\partial x^{j}}(t_{m}, x_{I}, y_{J}, z_{K}) + O(h^{l}).$$
(12)

Ak uvažujeme lineárnu kombináciu hodnôt v sieti LK,

$$LK = \sum_{p=1}^{n} a_p u(t_m, x_I + k_p h, y_J, z_K),$$
(13)

je možné ju rozvinúť nasledovne

$$TE_{h}\{LK\} = \sum_{p=1}^{n} a_{p} \sum_{j=0}^{l-1} \frac{(k_{p}h)^{j}}{j!} \frac{\partial^{j}u}{\partial x^{j}} + O(a_{p}h^{l})$$
$$= \sum_{j=0}^{l-1} \frac{h^{j}}{j!} \left\{ \sum_{p=1}^{n} a_{p}k_{p}^{j} \right\} \frac{\partial^{j}u}{\partial x^{j}} + O(a_{p}h^{l})$$
$$= \sum_{j=0}^{l-1} b_{j} \frac{\partial^{j}u}{\partial x^{j}} + O(a_{p}h^{l}).$$
(14)

Koeficienty b_j je možné zvoliť tak, aby výraz LK bol aproximáciou q-tej derivácie. Kritétiom je, aby

$$\lim_{h \to 0} LK = \frac{\partial^q u}{\partial x^q}.$$
(15)

Z (14) a (13) pre koeficienty b_j vyplýva

$$b_j = \frac{h^j}{j!} \left\{ \sum_{p=1}^n a_p k_p^j \right\} = 0; \quad j = 0, \dots l - 1; \, j \neq q \,, \tag{16}$$

$$b_q = \frac{h^q}{q!} \left\{ \sum_{p=1}^n a_p k_p^q \right\} = 1.$$
(17)

Rovnice (16) a (17) predstavujú základný systém, z ktorého možno určiť koeficienty a_p vystupujúce v schéme. Z rovnice (17) vyplýva, že každý z koeficientov a_p je úmerný h^{-q} ($a_p = h^{-q} \tilde{a}_p$) preto z rovnice (14) dostaneme

$$TE_{h}\{LK\} = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{h^{j-q}}{j!} \left\{ \sum_{p=1}^{n} \tilde{a}_{p} k_{p}^{j} \right\} \frac{\partial^{j} u}{\partial x^{j}} + O(h^{n-q})$$
$$= \sum_{j=0}^{n-1} b_{j} \frac{\partial^{j} u}{\partial x^{j}} + O(h^{n-q}).$$
(18)

S rastúcim n rastie rád aproximácie pre danú deriváciu. Naopak, čím vyššiu deriváciu chceme aproximovať, tým je rád jej aproximácie nižší pri konštantnom n.

Pri zápisoch Taylorových rozvojov schém sa často explicitne nezapisuje operácia rozvoja TE, budeme ju však implicitne predpokladať vo všetkých zápisoch, kde na ľavej strane je diskrétna aproximácia a na druhej strane spojité funkcie.

Súčet súčinov koeficientov a posunutí sa často vyskytuje v zápisoch konečnodiferenčných vzťahov. Matematicky možno túto operáciu zapísať pomocou konvolúcie. Rovnicu (13) môžeme zapísať ako konvolúciu,

$$LK = \mathbf{A} * * \mathbf{u}_{I,J,K}^m, \tag{19}$$

kde

$$\mathbf{A} = (a_1, a_2, \dots, a_n) \tag{20}$$

je vektor koeficientov a

$$\mathbf{u}_{I,J,K}^{m} = \left(u_{I+k_{1},J,K}^{m}, u_{I+k_{2},J,K}^{m}, \dots, u_{I+k_{n},J,K}^{m}\right)$$
(21)

je vektor posunutí v okolí bodu aproximácie (t_m, x_I, y_J, z_K) . Tento zápis bude veľmi užitočný, keď **A** aj $\mathbf{u}_{I,J,K}^m$ budú matice alebo tenzory vyššieho rádu, pretože značne zjednodušujú zápis. Konvolúcia bude vždy znamenať súčet súčinov prvkov na rovnakých miestach v oboch tenzoroch.

Konečno-diferenčné vzťahy priamo dostávame aj derivovaním Lagrangeovho interpolačného polynómu. Tento fakt využil na generovanie koeficientov aproximácií aj Fornberg (1988). Interpolačný polynóm so zvyšujúcim sa počtom bodov (rádom) pri rovnomerne rozmiestnených uzloch v blízkosti krajných uzlov môže oscilovať. Preto nie je vhodné aproximovať deriváciu jednostranne vysokým rádom aproximácie - polynómu, najvhodnejšie sú centrované aproximácie, v ktorých sa bod aproximácie nachádza v strede. Symetrické centrované aproximácie môžu mať dokonca vyšší rád aproximácie, ako to vyplýva z rovnice (18) a vďaka ich dobrým vlastnostiam sú pri aproximovaní najčastejšie používané.

1.3.2 Vlastnosti konečno-diferenčných schém

Konštrukciu schém pomocou rozvoja do Taylorových radov z predchádzajúcej kapitoly je možné využiť pri odvodeniach všetkých typov schém. Hlavné kroky metódy možno zhrnúť takto:

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

Prvé dva kroky sú previazané a ovplyvňujú sa. Aj preto je možné zostaviť veľké množstvo schém rôzneho rádu aproximácie na rôznych typoch sietí. Pri časovo závislých problémoch, do ktorých spadajú aplikácie v seizmológii, je potrebné z počiatočnej podmienky postupne počítať hľadané funkcie v ďalších časových hladinách. Ak je možné z konečno-diferenčných rovníc priamo určiť hodnoty funkcie v nasledujúcej časovej hladine (matica sústavy je diagonálna), nazývame schému explicitnou, v opačnom prípade implicitnou. Explicitné schémy sú prirodzene menej náročné, pretože sústava je vo vyriešenom tvare, kým pri implicitných schémach je potrebné sústavu riešiť, čo je pri veľkých rozmeroch matíc úloha náročná na výpočtový čas aj pamäť počítača. Väčšina v súčasnosti používaných konečno-diferenčných schém sú explicitné schémy.

Konvergencia

Dôležitou praktickou informáciou je, za akých podmienok je riešenie počítané konečno-diferenčnou schémou blízke presnému riešeniu. Konvergencia k presnému riešeniu znamená, že pri zmenšovaní priestorového a časového kroku sa hodnoty získavaného riešenia v limite blížia k hodnotám presného riešenia. Dôležitý je samotný fakt, že riešenie konverguje. Ešte hodnotnejšou informáciou je, ak je známa aj rýchlosť konvergencie, prípadne veľkosť chyby riešenia pri zvolenom časovom a priestorovom kroku, ale túto informáciu je vo väčšine prípadov veľmi ťažké získať aj preto, že presné riešenie pre komplikované modely často nie je známe.

Samotnú konvergenciu riešenia môžeme overiť na základe Laxovej vety o ekvivalencii. Tá hovorí, že konvergencia k presnému riešeniu je ekvivalentná tomu, že daná schéma je **konzistentná** s riešenou rovnicou a súčasne je schéma **stabilná**:

- Schéma je konzistentná s pôvodnou diferenciálnou rovnicou, ak sa pri zmenšovní časového a priestorového kroku konečno-diferenčné rovnice limitne blížia diferenciálnym rovniciam.
- Schéma je stabilná, ak je riešenie ňou získané ohraničené, keď presné riešenie je ohraničené.

Ak použijeme metódu rozvoja do Taylorových radov, aproximácie budú konzistentné s pôvodnou rovnicou; vyjadruje to rovnica (15). Stabilitu schémy najčastejšie vyšetrujeme von Neumannovou metódou, ktorou sa zaoberáme v ďalšej kapitole.

1.3.3 Analýza stability

Konečno-diferenčná schéma môže produkovať neohraničené riešenie, aj keď je presné riešenie ohraničené. Tento jav sa označuje ako nestabilita. Pokiaľ sa pri výpočte vyskytne, riešenie môže byť čiastočne alebo úplne znehodnotené.

Von Neumannova analýza stability (Richtmayer a Morton, 1967) skúma lokálnu stabilitu schémy. Analyzuje každú Fourierovu komponentu diskrétneho riešenia reprezentovaného v tvare Fourierovho radu. Riešenie je stabilné ak je každá komponenta stabilná, teda ohraničená, pretože fyzikálne riešenia sú ohraničené. Samotné aplikovanie spočíva v dosadení Fourierovej komponenty do konečno-diferenčných rovníc a vyjadrení tzv. amplifikačného faktora. Schéma je stabilná, ak je pre každú

Fourierovu komponentu amplifikačný faktor menší alebo rovný jednej. Analýza väčšinou vedie na podmienku obmedzujúcu veľkosť časového kroku – tzv. podmienečne stabilné schémy. V heterogénnom prostredí by bola analýza veľmi náročná. Väčšinou postačuje splniť najprísnejšiu z lokálnych podmienok stability.

1.3.4 Analýza sieťovej disperzie

Konečno-diferenčné rovnice sú aproximáciou diferenciálnych rovníc – vlnenie v schéme sa šíri rýchlosťou, ktorá nie je presne fyzikálnou rýchlosťou šírenia. Rýchlosť šírenia vlnenia závisí od vlnovej dĺžky alebo frekvencie šíriaceho sa vlnenia. Preto je možné hovoriť o sieťovej disperzii.

Efekt disperzie sa vo väčšine prípadov prejavuje kumulatívne. Chyba riešenia narastá zo vzdialenosťou, ktorú vlnenie prekonalo od zdroja. Pre analyzovanú schému je možné zostaviť disperzný vzťah vychádzajúci zo stabilitnej analýzy a pomocou neho určiť presnosť fázovej rýchlosti v schéme v závislosti od vzorkovania a smeru šírenia vlnenia. Najčastejšie sa disperzné krivky vykresľujú v závislosti od vzorkovacieho pomeru $s = h/\lambda$ a Courantovho čísla $C = c\Delta t/h$ alebo jeho prevrátenej hodnoty pomeru stability

$$p = \frac{h}{c\Delta t},\tag{22}$$

kde *c* je skutočná hodnota fázovej rýchlosti. Pred výpočtom je vhodné na základe disperzných vzťahov a vzdialenosti šírenia zvoliť zodpovedajúce vzorkovanie, aby riešenie malo požadovanú presnosť. Detailnejšie sa analýzou sieťovej disperzie a presnosťou konečno-diferenčných schém v 2D a 3D prípade zaoberá Marfurt (1984), Crase et al. (1992), Igel et al. (1995), Geller a Takeuchi (1995, 1998), Klimeš (1996), Mizutani (2000), Moczo et al. (2000, 2004b).

1.3.5 Konvenčné konečno-diferenčné schémy

Konvenčné schémy boli používané predovšetkým na začiatku éry aplikácie metódy konečných diferencií v seizmológii – napr. Alterman a Karal (1968), Boore (1972), Alford et al. (1974), Ilan et al. (1975) a Marfurt (1984) postupne aplikovali a analyzovali presnosť modelovania použitím konvenčných schém.

Základom pri vytváraní aproximácií je formulácia pohybovej rovnice v posunutiach (4). V práci budeme v kapitole 3.2.2 analyzovať prípad homogénneho prostredia. Preto rovnice (5) rozpíšeme podrobnejšie, aby sme zdôraznili ich štruktúru. Použijeme označenie $u_x \equiv u$, $u_y \equiv v$, $u_z \equiv w$. Potom rovnice (5) majú tvar

$$X_{2} u + M_{xy} v + M_{xz} w = f_{x},$$

$$M_{yx} u + Y_{2} v + M_{yz} w = f_{y},$$

$$M_{zx} u + M_{zy} v + Z_{2} w = f_{z}.$$
(23)

kde

$$X_{2} = \rho \partial_{t}^{2} - (\lambda + 2\mu) \partial_{x}^{2} - \mu \partial_{y}^{2} - \mu \partial_{z}^{2},$$

$$Y_{2} = \rho \partial_{t}^{2} - \mu \partial_{x}^{2} - (\lambda + 2\mu) \partial_{y}^{2} - \mu \partial_{z}^{2},$$

$$Z_{2} = \rho \partial_{t}^{2} - \mu \partial_{x}^{2} - \mu \partial_{y}^{2} - (\lambda + 2\mu) \partial_{z}^{2},$$

$$M_{xy} = -(\lambda + 2\mu) \partial_{x} \partial_{y},$$

$$M_{xy} = -(\lambda + 2\mu) \partial_{x} \partial_{y},$$

$$M_{xy} = -(\lambda + 2\mu) \partial_{x} \partial_{y}.$$
(24)

Najjednoduchšia a najčastejšie používaná schéma vznikne aproximovaním druhých časových aj priestorových derivácií s presnosťou do druhého rádu centrovanými aproximáciami. Pre nezmiešané druhé derivácie možno konečno-diferenčné aproximácie zapísať nasledovne:

$$\frac{u_{I,J,K}^{m+1} - 2u_{I,J,K}^m + u_{I,J,K}^{m-1}}{\Delta t^2} = u_{,tt} + O(\Delta t^2),$$
(25)

$$\frac{u_{I+1,J,K}^m - 2u_{I,J,K}^m + u_{I-1,J,K}^m}{h^2} = u_{,xx} + O(h^2),$$
(26)

$$\frac{u_{I,J+1,K}^m - 2u_{I,J,K}^m + u_{I,J-1,K}^m}{h^2} = u_{yy} + O(h^2),$$
(27)

$$\frac{u_{I,J,K+1}^m - 2u_{I,J,K}^m + u_{I,J,K-1}^m}{h^2} = u_{,zz} + O(h^2).$$
(28)

Zavedieme teraz označenie konečno-diferenčných operátorov nezmiešanej derivácie. Sčítaním rovníc (25)-(28) násobených príslušnými materiálovými parametrami dostaneme aproximáciu

$$\mathbf{G}_{x} * * \mathbf{u}_{I,J,K}^{m} = X_{2}u + O(h^{2}) + O(\Delta t^{2}),$$
(29)

15

kde \mathbf{G}_x aj $\mathbf{u}_{I,J,K}^m$ sú tenzory štvrtého rádu. \mathbf{G}_x obsahuje koeficienty aproximácie a $\mathbf{u}_{I,J,K}^m$ hodnoty posunutia

$$u_{I+i,J+j,K+k}^{m+M}; \qquad M, i, j, k \in \{-1, 0, 1\}.$$
(30)

Analogicky označíme aj aproximácie ostatných nezmiešaných derivácií:

$$\mathbf{G}_{y} * * \mathbf{v}_{I,J,K}^{m} = Y_{2}v + O(h^{2}) + O(\Delta t^{2}),$$
(31)

$$\mathbf{G}_z ** \mathbf{w}_{I,J,K}^m = Z_2 w + O(h^2) + O(\Delta t^2).$$
(32)

Pre zmiešané druhé derivácie majú štandardné aproximácie tvar:

$$\frac{u_{I+1,J+1,K}^m + u_{I-1,J-1,K}^m - u_{I+1,J-1,K}^m - u_{I-1,J+1,K}^m}{4h^2} = u_{,xy} + O(h^2), \quad (33)$$

$$\frac{u_{I+1,J,K+1}^m + u_{I-1,J,K-1}^m - u_{I+1,J,K-1}^m - u_{I-1,J,K+1}^m}{4h^2} = u_{,xz} + O(h^2), \quad (34)$$

$$\frac{u_{I,J+1,K+1}^m + u_{I,J-1,K-1}^m - u_{I,J+1,K-1}^m - u_{I,J-1,K+1}^m}{4h^2} = u_{,yz} + O(h^2).$$
(35)

Každú z rovníc vynásobíme koeficientom $-(\lambda + 2\mu)$ a zavedieme označenie

$$\mathbf{H}_{xy} * * \mathbf{u}_{I,J,K}^{m} = M_{xy} u + O(h^{2}),$$
(36)

$$\mathbf{H}_{xz} ** \mathbf{u}_{I,J,K}^{m} = M_{xz} u + O(h^{2}),$$
(37)

$$\mathbf{H}_{yz} ** \mathbf{u}_{I,J,K}^{m} = M_{yz} u + O(h^{2}).$$
(38)

Schému, ktorú označíme Dconv2, môžeme potom zapísať v tvare

$$\mathbf{G}_{x} \ast \ast \mathbf{u}_{I,J,K}^{m} + \mathbf{H}_{xy} \ast \ast \mathbf{v}_{I,J,K}^{m} + \mathbf{H}_{xz} \ast \ast \mathbf{w}_{I,J,K}^{m} = F_{I,J,K}^{x,m},$$

$$\mathbf{H}_{xy} \ast \ast \mathbf{u}_{I,J,K}^{m} + \mathbf{G}_{y} \ast \ast \mathbf{v}_{I,J,K}^{m} + \mathbf{H}_{yz} \ast \ast \mathbf{w}_{I,J,K}^{m} = F_{I,J,K}^{y,m},$$

$$\mathbf{H}_{xz} \ast \ast \mathbf{u}_{I,J,K}^{m} + \mathbf{H}_{yz} \ast \ast \mathbf{v}_{I,J,K}^{m} + \mathbf{G}_{z} \ast \ast \mathbf{w}_{I,J,K}^{m} = F_{I,J,K}^{z,m}.$$
(39)

Z rovníc (39) je možné priamo vyjadriť posunutia v nasledujúcej časovej hladine. Preto schéma je explicitná. Posunutia v nasledujúcej časovej hladine počítame z posunutí v predchádzajúcich dvoch časových hladinách (len tie je potrebné mať uložené v pamäti počítača). Aproximácie teda vedú na dvojhladinovú schému. Zvýšenie presnosti časovej derivácie by vyžadovalo mať v pamäti viac časových hladín. Aby sa nezvyšovali pamäťové nároky, ale zvýšila sa presnosť, je možné priestorové derivácie aproximovať s presnosťou do štvrtého rádu:

$$u_{,xx} = \frac{-u_{I+2,J,K}^{m} + 16u_{I+1,J,K}^{m} - 30u_{I,J,K}^{m} + 16u_{I-1,J,K}^{m} - u_{I-2,J,K}^{m}}{12h^{2}} + O(h^{4}),$$

$$u_{,xy} = \frac{u_{I+1,J+1,K}^{m} + u_{I-1,J-1,K}^{m} - u_{I+1,J-1,K}^{m} - u_{I-1,J+1,K}^{m}}{3h^{2}} + \frac{u_{I+2,J+2,K}^{m} + u_{I-2,J-2,K}^{m} - u_{I+2,J-2,K}^{m} - u_{I-2,J+2,K}^{m}}{48h^{2}} + O(h^{4}).$$
(40)
(41)

Rovnice (40) a (41) predstavujú aproximácie s najmenším možným počtom bodov na dosiahnutie aproximácií do 4. rádu presnosti. Preto vyžadujú najmenšie množstvo aritmetických operácií pri implementácii v počítači. Schému, ktorá takto vznikne, budeme označovať Dconv4. Podrobne sa aproximáciami v konvenčných schémach a ich presnosťou zaoberá Klimeš (1996). Výhoda zápisu rovníc (39) pomocou konvolúcie (19) je v tom, že ich tvar sa formálne nemení, zmení sa iba rozsah operátorov a používané pozície.

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 výpočet koeficientov aproximácie pomerne komplikovaný.

Von Neumannova analýza stability pre štandardnú konvenčnú schému (39) dáva podmienku stability

$$\Delta t \le \frac{h}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}},\tag{42}$$

kde $\alpha = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho}$ je rýchlosť šírenia P vĺn, $\beta = \sqrt{\mu/\rho}$ rýchlosť šírenia S vĺn a *h* priestorový krok. Pre schému 4. rádu je podmienka prísnejšia.

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 získaného pomocou Dconv2 sa so zvyšovaním hodnoty Poissonovho pomeru dramaticky zväčšuje (Marfurt, 1984). Moczo et al. (1999) numericky testovali nimi odvodenú konvenčnú schému a výsledky porovnávali so semianalytickou metódou diskrétnych vlnových čísel a zistili, že schéma je dostatočne presná, ak Poissonov pomer neprekročí hodnotu $\sigma \approx 2.2$. Podrobnejšiu analýzu chyby fázovej rýchlosti vykonáme v kapitole 3.2.1.

Súčasný stav problematiky

V prípade heterogénneho prostredia sú materiálové parametre funkciami priestorových súradníc. Je potrebné aproximovať rovnicu (4), ktorá obsahuje členy typu $(\mu u_{i,j})_{,j}$ a $(\lambda u_{k,k})_{,i}$. Aproximovanie členov obsahujúcich derivácie len podľa jednej premennej bolo navrhnuté už autormi Tikhonov a Samarski (pozri Boore, 1972), ktorí odvodili integrálny harmonický priemer šmykového modulu s cieľom vyhnúť sa jeho derivácii. Integrálny harmonický priemer je možné chápať ako efektívnu hodnotu šmykového modulu. Tento prístup bol použitý viacerými autormi (predovšetkým v 1D a 2D prípade), a neskôr bol použitý aj na aproximovanie zmiešanej derivácie (Zahradník, 1995; Zahradník a Priolo, 1995; Moczo et al., 1999). Ako efektívnu hodnotu hustoty väčšina autorov brala integrálny aritmetický priemer hustoty, aj keď takéto zavedenie bolo len intuitívne.

Hlavné dôvody, prečo nie sú konvenčné schémy v súčasnosti v seizmológii využívané, sú predovšetkým kvôli značnej sieťovej disperzii a nestabilitám v modeloch so značnými rýchlostnými kontrastmi. Postupne boli nahradené striedavo usporiadanými schémami, ktorými sa zaoberáme v ďalšej kapitole.

1.3.6 Striedavo usporiadané schémy

Schémy na striedavo usporiadanej sieti použil ako prvý v seizmológii Madariaga (1976) na dynamickú simuláciu šírenia trhliny na zlomovej ploche. Virieux (1984, 1986) ich prvý použil na simuláciu šírenia seizmických vĺn. Používal formuláciu pohybovej rovnice v rýchlostiach a napätiach

$$\rho \, \dot{v}_i \,=\, \sigma_{ij,j} + f_i \,, \tag{43}$$

$$\dot{\sigma}_{ij} = \lambda v_{k,k} \delta_{ij} + \mu (v_{i,j} + v_{j,i}), \qquad (44)$$

kde $i, j, k \in \{x, y, z\}$ a $v_i = \dot{u}_i$, pričom rovnica (44) predstavuje Hookeov zákon derivovaný podľa času. Levander (1988) zaviedol v súčasnosti najčastejšie používané striedavo usporiadané schémy 4. rádu.

Systém (43) a (44) obsahuje len prvé derivácie. Na výpočet rýchlostí sú potrebné len napätia a naopak, na výpočet napätí sú potrebné len rýchlosti. Centrované aproximácie umožňujú vyjadriť prvú deriváciu, pričom v samotnom bode aproximácie nepotrebujeme mať derivovanú veličinu k dispozícii. Tieto zistenia vedú k myšlienke mať diskrétne aproximácie premenných a derivácií "striedavo" usporiadané
v priestore (obr. 2 a obr. 3). Zároveň je vhodné zaviesť aj striedavé usporiadanie časovej osi. Táto schéma je v zahraničnej literatúre označovaná ako velocitystress staggered-grid scheme (VS). Rovnaké striedavé usporiadanie v priestore má aj ekvivalentná schéma v posunutiach, rýchlostiach a napätiach (displacementvelocity-stress staggered-grid scheme - DVS) a schéma v posunutiach a napätiach (displacement-stress staggered grid scheme - DS).

V jednom časovom kroku pri striedavo usporiadaných schémach počítame najskôr aproximáciu napätí z posunutí a z nej aproximáciu posunutí – to je rozdiel oproti konvenčným schémam, kde sa v jednom kroku použije len jedna aproximácia. Dosadením konečno-diferenčných rovníc pre napätia do konečno-diferenčných rovníc pre posunutia v schéme DS dostaneme schému v posunutiach, ktorá však nie je ekvivalentná žiadnej konvenčnej schéme, pretože si zachováva striedavé usporiadanie zložiek posunutia.

Pre schému aproximujúcu formuláciu v napätiach a posunutiach budeme v rovniciach (1) a (3) aproximovať prvé priestorové derivácie posunutí a napätí použitím vzťahov

$$\phi_{,t} = \frac{\phi_{I,J,K}^{m+1/2} - \phi_{I,J,K}^{m-1/2}}{\Delta t} + O(\Delta t^2), \tag{45}$$

$$\phi_{,x} = \frac{\phi_{I+1/2,J,K}^m - \phi_{I-1/2,J,K}^m}{h} + O(h^2), \tag{46}$$

$$\phi_{,x} = \frac{9}{8} \frac{\phi_{I+1/2,J,K}^m - \phi_{I-1/2,J,K}^m}{h} - \frac{1}{24} \frac{\phi_{I+3/2,J,K}^m - \phi_{I-3/2,J,K}}{h} + O(h^4),$$
(47)

v prípade 2. a 4. rádu. Funkcia ϕ označuje jednu zložku posunutia alebo tenzora napätia. Analogické sú vzťahy pre derivácie podľa inej súradnice. Aproximácie napätia sú umiestnené v bodoch s poločíselnými indexmi a posunutia s celočíselnými (obr. 2). V rovniciach (46) a (47) teda indexy *I*, *J* a *K* pri aproximovaní napätí zvolíme poločíselné. Kompletná VS schéma je uvedená v Moczo et al. (2007b). Túto schému budeme označovať VSstag4.

Opakovaním základnej bunky striedavo usporiadaných sietí z obr. 2 vzniká konečno-diferenčná sieť. Môžeme overiť, že vďaka použitému usporiadaniu možno všetky potrebné aproximácie počítať a súčasne je toto usporiadanie aj veľmi úsporné z hľadiska nárokov na pamäť počítača.



Obr. 3. Priestorové usporiadanie veličín v striedavo usporiadanej sieti.

Analýza stability a disperzné vzťahy pre schému druhého a štvrtého rádu aproximujúcu formuláciu v posunutiach a napätiach na striedavo usporiadanej sieti sú v práci Moczo et al. (2000). Autori ukazujú, že schémy VS, DVS a DS majú rovnakú sieťovú disperziu a rovnakú podmienku stability. Von Neumannova analýza stability dáva dve podmienky stability – jednu pre P vlny, druhú pre S vlny:

$$\Delta t \leq \frac{6}{7\sqrt{3}} \frac{h}{\alpha},\tag{48}$$

$$\Delta t \leq \frac{6}{7\sqrt{3}} \frac{h}{\beta}.$$
(49)

Pretože $\alpha > \beta$, splnenie podmienky (48) zaručuje aj splnenie (49). Preto sa ako podmienka stability berie podmienka (48).

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 vĺn 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 chyby riešenia s rastúcim Poissonovým pomerom. Najväčšiu disperziu majú v smere sieťových rovín, najmenšiu v smere telesovej uhlopriečky.

Podobne ako pre konvenčné schémy je heterogenitu prostredia možné zahrnúť do konečno-diferenčnej schémy zavedením efektívnych materiálových parametrov. V hladko heterogénnom prostredí by bolo možné použiť priamo bodové hodnoty daného parametra, za prítomnosti rozhraní je však takáto parametrizácia nesprávna.

Ako prvý podrobne vysvetlil určovanie efektívnych materiálových parametrov Graves (1996) v jeho VS striedavo usporiadanej schéme 4. rádu, pričom však toto určovanie teoreticky nepodložil a nezdôvodnil. Moczo et al. (2002) odvodili a numericky testovali striedavo usporiadanú schému 4. rádu založenú na heterogénnej formulácii pohybovej rovnice. Prístup vedie na aritmetické priemerovanie hustoty a harmonické priemerovanie modulu pružnosti pri určovaní efektívnych materiálových parametrov v oblastiach centrovaných v mieste pozície parametra v sieti (obr. 4). Numerické testy ukazujú, že schéma presnejšie modeluje prostredie s rozhraním



Obr. 4. Schematicky znázornené určovanie efektívnych materiálových parametrov z hodnôt veličín v okolí bodu aproximácie.

v ľubovoľnej polohe voči sieťovým rovinám v porovnaní s všetkými používanými prístupmi.

Pomocou striedavo usporiadaných schém je možné simulovať aj realistický útlm. Zahrnutie anelasticity nahradením vzťahu medzi napätiami a posunutiami pre dokonale elastický materiál vzťahom pre zovšeoecnené Maxwellovo teleso uvádzajú Kristek a Moczo (2003), ktorí prezentujú aj výpočet anelastických koeficientov v heterogénnom viskoelastickom prostredí. Schémy na striedavo usporiadaných sieťach sú v súčasnosti najviac rozpracované a používané v seizmológii vďaka ich presnosti a možnosti zahrnúť heterogénne viskoelastické prostredie s rozhraniami a tiež možnosti simulovať dynamiku šírenia trhliny na zlomovej ploche.

1.3.7 Čiastočne striedavo usporiadané schémy

Čiastočne striedavo usporiadaná schéma má v jednom sieťovom bode lokalizované všetky zložky posunutia, v inom všetky zložky napätia. Jej výhodou je jednoduchšie zahrnutie anizotropie – keďže sa všetky zložky tenzora napätia nachádzajú v jednom sieťovom bode (obr. 2), nie je potrebné interpolovať rýchlosti posunutia ani zložky tenzora napätia. Ako prvý ich aplikoval Andrews (1973) pri modelovaní dynamiky seizmického zdroja v jeho metóde napätí v rozdelených uzloch (TSN - traction-at-split-node). Magnier et al. (1994) použil čiastočne striedavo usporiadané schémy na zahrnutie anizotropie. V súčasnosti boli čiastočne striedavo usporiadané schémy opäť prezentované autormi Sänger a Bohlen (2004), Krüger et al. (2005), Sänger et al. (2005) a Bohlen a Sänger (2006), ktorí skúmali presnosť modelovania s použitím čiastočne striedavo usporiadaných schém vo viskoelastickom a anizotropnom prostredí a pri šírení Rayleighových vĺn v modeli s topografiou voľného povrchu. V literatúre je možné tieto schémy nájsť aj pod názvom rotované striedavo usporiadané schémy. V skutočnosti nie je rotovanie sústavy na odvodenie vôbec potrebné a naviac, rotovanie je aplikovateľné len na niektoré schémy.

Aj keď sa tieto schémy javia ako robustný nástroj, nie sú tak často využívané ako striedavo usporiadané schémy. Jedným z dôvodov môže byť aj to, že trpia existenciou tzv. falošných módov s nulovou energiou.

1.3.8 Lax-Wendroffove schémy

Väčšina konečno-diferenčných schém má presnosť do 2. rádu v čase, pretože uchovávanie 2 predchádzajúcich hladín v pamäti počítača predstavuje akceptovateľné pamäťové nároky. Zvýšenie rádu aproximácie v čase by znamenalo uchovávať v pamäti väčšie množstvo časových hladín, čo už môže predstavovať značné nároky na pamäť počítača. Lax a Wendroff (1964) a Dablain (1986) prezentujú prístup, ktorým je možné rád aproximácie v čase pre konvenčné schémy zvýšiť bez nutnosti uchovávať veľké množstvo časových hladín v pamäti počítača. Je založený na tzv. Lax-Wendroffovej korekcii, ktorá eliminuje prvý z chybových členov konečnodiferenčného operátora časovej derivácie. V jednorozmernom prípade si postup môžeme ilustrovať pri aproximovaní vlnovej rovnice

$$u_{,tt} - c^2 u_{,xx} = 0. (50)$$

Druhú priestorovú deriváciu môžeme aproximovať s presnosťou do štvrtého rádu aplikovaním aproximácie (40), druhú časovú deriváciu aproximujeme s presnosťou do druhého rádu (rovnica 25):

$$\frac{u_I^{m+1} - 2u_I^m + u_I^{m-1}}{\Delta t^2} = u_{,tt} + \frac{\Delta t^2}{12} u_{,ttt} + O(\Delta t^4).$$
(51)

Chybový člen druhého rádu môžeme nahradiť ak využijeme vlnovú rovnicu:

$$u_{,tttt} = (u_{,tt})_{,tt} = (c^2 u_{,xx})_{,tt} =$$
$$= c^2 (u_{,tt})_{,xx} = c^2 (c^2 u_{,xx})_{,xx} .$$
(52)

V prípade homogénneho prostredia stačí s presnosťou do druhého rádu aproximovať štvrtú deriváciu posunutia:

$$c^{2}(c^{2}u_{,xx})_{,xx} = c^{4}u_{,xxxx} =$$

$$= c^{2}\frac{u_{I+2}^{m} - 4u_{I+1}^{m} + 6u_{I}^{m} - 4u_{I-1}^{m} + u_{I-2}^{m}}{h^{4}} + O(h^{2}).$$
(53)

Taylorov rozvoj schémy je potom

$$u_{,tt} - c^{2}u_{,xx} = \frac{u_{I}^{m+1} - 2u_{I}^{m} + u_{I}^{m-1}}{\Delta t^{2}} - c^{2} \frac{-u_{I+2}^{m} + 16u_{I+1}^{m} - 30u_{I}^{m} + 16u_{I-1}^{m} - u_{I-2}^{m}}{12h^{2}} - \frac{c^{4}\Delta t^{2}}{12} \frac{u_{I+2}^{m} - 4u_{I+1}^{m} + 6u_{I}^{m} - 4u_{I-1}^{m} + u_{I-2}^{m}}{h^{4}} + O(\Delta t^{4}) + O(h^{4}) + O(h^{2}\Delta t^{2}).$$
(54)

Preto možno konštatovať, že formálne je chyba štvrtého rádu vzhľadom na priestorový a časový krok. Iný rozvoj uvedieme v kapitole 1.3.9 o optimálne presných schémach. Blanch a Robertsson (1997) prezentujú modifikáciu, ktorá umožňuje efektívne modelovať šírenie vlnenia vo viskoelastickom prostredí. Súčasne konštatujú, že modifikovaná schéma je výrazne presnejšia ako konvenčné schémy 2. rádu v priestore aj čase a výhodnejšia ako konvenčné schémy 2. rádu v čase a 4. rádu v priestore vďaka jej vyššej presnosti, minimálnemu nárastu výpočtových nárokov a menej obmedzujúcej podmienke stability. Otázke vysokého Poissonovho pomeru sa autori nevenujú.

V prípade heterogénneho prostredia je ťažšie zaviesť efektívne materiálové parametre, pretože rozsah operátorov je až 2 konečno-diferenčné bunky. Zväčšený rozsah znamená komplikovanejší prístup aj pre hranice modelu, kde je potrebné aplikovať špeciálne aproximácie. Presnosť schémy pri vysokých hodnotách Poissonovho pomeru podľa našich vedomostí nebola skúmaná. V seizmológii, kde je potrebné modelovať šírenie vlnenia v heterogénnom prostredí s rozhraniami, pravdepodobne aj z týchto dôvodov schémy založené na Lax-Wendroffovej korekcii neboli široko používané.

1.3.9 Optimálne presné schémy

Komplexnejší pohľad na posudzovanie presnosti numerických schém na riešenie pohybovej rovnice kontinua umožnil autorom v práci Geller a Takeuchi (1995) odvodiť všeobecné kritérium, ktoré je základom konštruovania veľmi presných numerických operátorov. Geller a Takeuchi (1995) na základe získaného kritéria optimalizujú operátory pre metódu DSM (Direct Solution Method, Geller a Ohminato, 1994), ktorá rieši slabú formu problému vo frekvenčnej oblasti, avšak jeho aplikovateľnosť je ďaleko širšia a Geller a Takeuchi (1998) aplikujú odvodené kritérium v metóde konečných diferencií v časovej oblasti a tiež uvádzajú 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, zameriame sa na jednorozmerný prípad, ktorý neskôr zovšeobecníme na trojrozmerný prípad.

Všeobecná podmienka optimálnej presnosti operátora

Numerické aj analytické riešenie pohybovej rovnice kontinua popisujúcej šírenie elastických vĺn je možné analyzovať pomocou rozvoja do vlastných módov problému. Takýto prístup umožňuje uvažovať o chybe riešenia cez chyby koeficientov rozvoja do vlastných módov.

Budeme sledovať výklad v práci Moczo et al. (2007a) a Moczo et al. (2007b), ktorý je založený predovšetkým na prácach Geller a Takeuchi (1995) a Geller a Takeuchi (1998). Uvažujme pohybovú rovnicu vo frekvenčnej oblasti v tvare

$$\left(\omega^2 T - H\right)\vec{c} = -\vec{g},\tag{55}$$

kde ω je uhlová frekvencia, T matica hmotnosti, H matica tuhosti, \vec{c} vektor koeficientov rozvoja do bázových funkcií, \vec{g} vektor koeficientov rozvoja pre hustotu objemovej sily,

$$T_{rs} = \int_{V} [\phi_{i}^{(r)}]^{*} \rho \, \phi_{i}^{(s)} \, \mathrm{d}V, \qquad H_{rs} = \int_{V} [\phi_{i,j}^{(r)}]^{*} \, c_{ijkl} \, \phi_{k,l}^{(s)} \, \mathrm{d}V,$$

$$g_{r} = \int_{V} [\phi_{i}^{(r)}]^{*} f_{i} \, \mathrm{d}V,$$
(56)

 $\phi_i^{(r)}$ je *i*-ta zložka *r*-tej bázovej funkcie a '*' označuje komplexne združenú veličinu. Posunutie možno vyjadriť vo forme rozvoja

$$u_i = \sum_r c_r \,\phi_i^{(r)}.\tag{57}$$

Keby sme použili rozvoj do nekonečnej bázy, riešenia rovnice (55) by boli presné. V praktických výpočtoch je rozvoj do bázových funkcií konečný. Preto vždy existuje istá numerická chyba. Presnú pohybovú rovnicu môžeme formálne zapísať v tvare

$$\left(\omega^2 T^e - H^e\right)\vec{c}^e = -\vec{g}.$$
(58)

Definujme vzťahy medzi presnými a približnými veličinami nasledovne:

$$T = T^e + \delta T, \quad H = H^e + \delta H, \quad \vec{c} = \vec{c}^e + \vec{\delta c}.$$
(59)

Tu δT , δH sú chyby numerických operátorov a $\vec{\delta c}$ chyba numerického riešenia.

Uvažujme normálne módy. Tie spĺňajú rovnicu

$$\left(\omega_p^2 T^e - H^e\right)\vec{c}_p = 0, (60)$$

kde ω_p je vlastná frekvencia *p*-tého módu a \vec{c}_p je vlastný vektor. Predpokladajme, že vlastné vektory sú ortonormálne:

$$\vec{c}_{p}^{*} H^{e} \vec{c}_{q} = \omega_{p}^{2} \vec{c}_{p}^{*} T^{e} \vec{c}_{q} = \omega_{p}^{2} \delta_{pq}.$$
 (61)

Dosadenie rovníc (59) do rovnice (55), využitie rovnice (58) a zanedbanie členov so súčinmi chýb (Bornova aproximácia prvého rádu) vedie k rovnici

$$\left(\omega^2 T^e - H^e\right) \vec{\delta c} = -\left(\omega^2 \delta T - \delta H\right) \vec{c}^e.$$
(62)

Rovnica (62) umožňuje vypočítať chybu numerického riešenia, $\delta \vec{c}$, ak je známe presné riešenie \vec{c}^e a chyby numerických operátorov δT a δH .

Riešenie rovnice (58) môžeme taktiež vyjadriť v tvare rozvoja do vlastných módov

$$\vec{c}^{\,e} = \sum_{p} \, d_p^{\,e} \, \vec{c}_p. \tag{63}$$

Dosadenie rozvoja (63) do rovnice (58) s využitím (61) vedie na

$$d_{p}^{e} = \vec{c}_{p}^{*} \, \vec{g} \, / (\, \omega^{2} - \omega_{p}^{2} \,).$$
(64)

Koeficient rozvoja d_p^e bude veľký, ak sa ω blíži k ω_p . Inak bude zanedbateľný.

Riešenie rovnice (62) je možné tiež vyjadriť vo forme rozvoja do vlastných módov

$$\vec{\delta c} = \sum_{p} \, \delta d_p \, \vec{c}_p. \tag{65}$$

Dosadenie rozvojov (63) a (65) do rovnice (62) a využitie normalizácie (61) vedie na

$$\delta d_p = -\sum_q \frac{\left(\omega^2 \, \vec{c}_p^* \, \delta T \, \vec{c}_q - \vec{c}_p^* \, \delta H \, \vec{c}_q\right) d_q^e}{\left(\omega^2 - \omega_p^2\right)}.\tag{66}$$

Koeficient δd_p bude veľký, ak sa ω blíži ω_p . V tom prípade bude zrejme veľké len d_p^e . Preto v okolí bodu $\omega = \omega_p$ členy s $q \neq p$ môžu byť členy v rovnici (66) zanedbané. Relatívna chyba riešenia v okolí ω_p bude približne rovná

$$\frac{\delta d_p}{d_p^e} = -\frac{\omega^2 \, \vec{c}_p^* \, \delta T \, \vec{c}_p - \vec{c}_p^* \, \delta H \, \vec{c}_p}{\omega^2 - \omega_p^2}.$$
(67)

Z poslednej rovnice vyplýva, že chyba bude vo všeobecnosti veľmi narastať pre $\omega \rightarrow \omega_p$. Ak ale čitateľ v rovnici (67) je tiež úmerný $\omega - \omega_p$, relatívna chyba zostane relatívne konštantná pre $\omega \rightarrow \omega_p$. Takáto úmernosť môže byť dosiahnutá len v prípade, že

$$\omega_p^2 \, \vec{c}_p^* \, \delta T \, \vec{c}_p - \vec{c}_p^* \, \delta H \, \vec{c}_p \doteq 0 \tag{68}$$

pre každý mód. Ak je rovnica (68) približne splnená, potom možno rovnicu (67) zjednodušiť:

$$\left|\frac{\delta d_p}{d_p^e}\right| \approx \vec{c}_p^* \,\delta T \, \vec{c}_p. \tag{69}$$

To znamená, že relatívna chyba pre zvolenú sieť môže byť odhadnutá pred samotným výpočtom.

Geller a Takeuchi (1995) definujú optimálne presné operátory \tilde{T} a \tilde{H} ako operátory, ktoré spĺňajú rovnicu (68):

$$\vec{c}_p^* \left(\omega_p^2 \,\delta \tilde{T} - \delta \tilde{H}\right) \vec{c}_p \doteq 0. \tag{70}$$

Dosadenie rovnice (59) pre operátory \tilde{T} a \tilde{H} do rovnice (70) s využitím rovnice (60) vedie na ekvivalentnú rovnicu

$$\vec{c}_p^* \left(\omega_p^2 \tilde{T} - \tilde{H} \right) \vec{c}_p \doteq 0.$$
(71)

Rovnica (70) bude splnená, ak člen najnižšieho rádu v chybe operátora diskretizovanej rovnice bude nulový v prípade, že operand bude vlastnou funkciou a frekvencia vlastnou frekvenciou, teda ak

$$\left(\omega_p^2 \,\delta \tilde{T} - \delta \tilde{H}\,\right) \,\vec{c}_p \doteq 0. \tag{72}$$

Toto však nie je nutná podmienka, pretože ak aj je pravá strana rovnice (72) nenulová, jej skalárny súčin s $\vec{c_p}$ môže byť približne nulový.

Úvaha, ktorá nám získaný výsledok ozrejmí a umožní kritérium použiť prakticky, môže byť formulovaná nasledovne. Uvažujme rovnicu

$$\mathcal{L}\left(\omega,\,u\right) = \vec{f} \tag{73}$$

a jej diskretizáciu, pre ktorú platí

$$\tilde{L}(\omega, u) = \mathcal{L}(\omega, u) + \frac{h^2}{a} \left[\mathcal{L}(\omega, u) \right]'' + \dots,$$
(74)

kde ' označuje priestorovú deriváciu, \mathcal{L} je presný diferenciálny operátor pohybovej rovnice a L numerický operátor. Normálne módy spĺňajú rovnicu

$$\mathcal{L}\left(\omega_p, \, u_p\right) \equiv 0 \,. \tag{75}$$

Preto súčasne platí

$$\left[\mathcal{L}\left(\omega_{p},\,u_{p}\right)\right]^{\prime\prime}=0.\tag{76}$$

Pokiaľ v rovnici (74) uvažujeme normálne módy a dosadíme rovnicu (75) a (76), dostávame

$$\tilde{L}(\omega_p, u_p) \doteq 0. \tag{77}$$

Rovnica (77) zodpovedá podmienke (71) pre optimálne presný operátor. V časovej oblasti môžeme štruktúru rozvoja optimálne presného operátora definovať nasledovne:

$$\tilde{L}(u) = \mathcal{L}(u) + \sum d_i \mathcal{D}_i \{\mathcal{L}(u)\} + \mathcal{E} .$$
(78)

Tu d_i sú koeficienty a \mathcal{D}_i diferenciálne operátory zložené z časových a priestorových derivácií, \mathcal{E} chybový člen. Počet koeficientov a diferenciálnych operátorov bližšie nešpecifikujeme, môže sa líšiť pre rôzne aproximácie. Štruktúru chyby (78) je možné dosiahnuť pri konštruovaní konečno-diferenčných aproximácií. Takeuchi a Geller (2000) nazývajú operátor spĺňajúci (78) optimálne presný operátor rádu najväčších z koeficientov d_i .

Odvodenie 1D optimálne presnej konečno-diferenčnej schémy

1D pohybová rovnica má tvar

$$\rho u_{,tt} - C u_{,xx} = f.$$
 (79)

Ľavú stranu rovnice označíme

$$E = \rho \ u_{,tt} - C \ u_{,xx} \,. \tag{80}$$

Vychádzať budeme z aproximácie 1D pohybovej rovnice pomocou konvenčných konečno-diferenčných operátorov

$$(\mathbf{A} - \mathbf{K}) * * \mathbf{u}_{I}^{m} = \frac{\rho}{\Delta t^{2}} \left[u_{I}^{m+1} - 2u_{I}^{m} + u_{I}^{m-1} \right] - \frac{C}{h^{2}} \left[u_{I+1}^{m} - 2u_{I}^{m} + u_{I-1}^{m} \right] \doteq 0.$$
(81)

Štruktúra rozvoja do Taylorovho radu podľa časového aj priestorového kroku je

$$TE_{h,\Delta t} \{ (\mathbf{A} - \mathbf{K}) * * \mathbf{u}_{I}^{m} \} = \rho \ddot{u} + \frac{1}{12} \Delta t^{2} \{ \rho \ddot{u} \}_{,tt} + O(\Delta t^{4}) - C u_{,xx} - \frac{1}{12} h^{2} \{ Cu_{,xx} \}_{,xx} + O(h^{4}).$$
(82)

Geller a Takeuchi (1998) tieto operátory modifikujú, aby dostali novú aproximáciu, ktorej rozvoj by bol

$$TE_{h,\Delta t} \left\{ (\tilde{\mathbf{A}} - \tilde{\mathbf{K}}) * * \mathbf{u}_{I}^{m} \right\} =$$

$$\rho \ddot{u} + \frac{1}{12} \Delta t^{2} \left\{ \rho \ddot{u} - Cu_{,xx} \right\}_{,tt} + O(\Delta t^{4}) -$$

$$- C u_{,xx} + \frac{1}{12} h^{2} \left\{ \rho \ddot{u} - Cu_{,xx} \right\}_{,xx} + O(h^{4}) +$$

$$+ O(h^{2} \Delta t^{2}).$$
(83)

Je to pochopiteľný a intuitívny krok, štruktúra rozvoja zodpovedá tvaru rovnice (78)

$$\operatorname{TE}_{h,\Delta t}\left\{ (\tilde{\mathbf{A}} - \tilde{\mathbf{K}}) * * \mathbf{u}_{I}^{m} \right\} = E + \frac{1}{12} \Delta t^{2} E_{,tt} + \frac{1}{12} h^{2} E_{,xx} + O(\Delta t^{4}) + O(h^{4}) + O(h^{2} \Delta t^{2}),$$
(84)

ale nie je jasné, akým spôsobom ju dosiahneme pomocou konečno-diferenčných aproximácií.

Rozdiel medzi štruktúrou rovnice (82) a rovnice (83) je

$$\delta\{u\} = \frac{1}{12} \Delta t^2 \{-C u_{,xx}\}_{,tt} + \frac{1}{12} h^2 \{\rho \ddot{u}\}_{,xx} = \frac{1}{12} \{\rho h^2 - C \Delta t^2\} u_{,xxtt} + O(h^4) + O(\Delta t^4) + O(h^2 \Delta t^2).$$
(85)

Ak by sme odvodili aproximáciu, pre ktorú

$$TE_{h,\Delta t} \{ \mathbf{D}^{**} \mathbf{u}_{I}^{m} \} = \frac{1}{12} \{ \rho h^{2} - C \Delta t^{2} \} u_{,xxtt} + O(h^{4}) + O(\Delta t^{4}) + O(h^{2} \Delta t^{2}) , \qquad (86)$$

dostali by sme

$$TE_{h,\Delta t} \{ (\mathbf{A} - \mathbf{K} + \mathbf{D}) * * \mathbf{u}_{I}^{m} \} = \rho \ddot{u} + \frac{1}{12} \Delta t^{2} \{ \rho \ddot{u} - Cu_{,xx} \}_{,tt} + O(\Delta t^{4}) - Cu_{,xx} + \frac{1}{12} h^{2} \{ \rho \ddot{u} - Cu_{,xx} \}_{,xx} + O(h^{4}) + O(h^{2} \Delta t^{2}) \}$$
(87)

a potom by sme operátor D mohli chápať ako opravu konvenčných operátorov:

$$\mathbf{A} - \mathbf{K} + \mathbf{D} = \tilde{\mathbf{A}} - \tilde{\mathbf{K}}.$$
(88)

Ukazuje sa, že operátor D je možné nájsť a je to užitočné.

Môžeme uhádnuť, že na vytvorenie aproximácie (86) sú potrebné posunutia

$$\mathbf{u}_{I}^{m} = \begin{pmatrix} u_{I-1}^{m+1} & u_{I}^{m+1} & u_{I+1}^{m+1} \\ u_{I-1}^{m} & u_{I}^{m} & u_{I+1}^{m} \\ u_{I-1}^{m-1} & u_{I}^{m-1} & u_{I+1}^{m-1} \end{pmatrix}$$
(89)

a samotný operátor **D** je matica 3×3 neznámych koeficientov.

Vzhľadom na štruktúru rozvoja (86) a 9 neznámych koeficientov operátora predpíšeme nasledujúce koeficienty v Taylorovom rozvoji:

pričom b_{ij} je koeficient pri derivácii $\partial_t^i \partial_x^j u$. Predpísané koeficienty tvoria maticu rozmeru 3×3 v ľavom hornom rohu (i = 0, 1, 2; j = 0, 1, 2). Ostatné koeficienty b_{ij} sú zatiaľ neznáme, po získaní prvkov operátora \mathbf{D} ich hodnoty dostaneme, pretože sú lineárne závislé od koeficientov s predpísanými hodnotami. Štruktúra Taylorovho rozvoja je

,

a samotný operátor má tvar

$$\mathbf{D} = \frac{1}{12h^2 \Delta t^2} \left\{ \rho \, h^2 - C \, \Delta t^2 \right\} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ -2 & 4 & -2 \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix}.$$
 (92)

Tento môžeme rozdeliť na dve časti:

,

$$\mathbf{D} = \frac{\rho}{12\,\Delta t^2} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ -2 & 4 & -2 \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} - \frac{C}{12\,h^2} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ -2 & 4 & -2 \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} =$$
(93)
= $\delta \mathbf{A} - \delta \mathbf{K}.$

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

$$\mathbf{A} = \frac{\rho}{\Delta t^2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0\\ 0 & -2 & 0\\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$
(94)

а

$$\mathbf{K} = \frac{C}{h^2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0\\ 1 & -2 & 1\\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$
 (95)

Modifikované operátory preto možno definovať ako

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \delta \mathbf{A} = \frac{\rho}{12\Delta t^2} \begin{pmatrix} 1 & 10 & 1 \\ -2 & -20 & -2 \\ 1 & 10 & 1 \end{pmatrix}$$
(96)

а

$$\tilde{\mathbf{K}} = \mathbf{K} + \delta \mathbf{K} = \frac{C}{12h^2} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1\\ 10 & -20 & 10\\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix}.$$
(97)

Ľahko možno overiť, že aproximácia $(\tilde{\mathbf{A}} - \tilde{\mathbf{K}}) * * \mathbf{u}_I^m$ s operátormi $\tilde{\mathbf{A}}$ a $\tilde{\mathbf{K}}$ definovanými rovnicami (96) and (97) vyhovuje rovnici (83). V zmysle rovnice (78) ju možno nazvať optimálne presnou konečno-diferenčnou aproximáciou.

1D optimálne presná schéma má potom tvar

$$\frac{\rho}{12\,\Delta t^{2}} \begin{bmatrix} u_{I-1}^{m+1} - 2\,u_{I-1}^{m} + u_{I-1}^{m-1} \\ + 10(\,u_{I}^{m+1} - 2\,u_{I}^{m} + u_{I}^{m-1}) \\ + u_{I+1}^{m+1} - 2\,u_{I+1}^{m} + u_{I+1}^{m-1} \end{bmatrix} \\
- \frac{C}{12\,h^{2}} \begin{bmatrix} u_{I-1}^{m+1} - 2\,u_{I}^{m+1} + u_{I+1}^{m+1} \\ + 10(\,u_{I-1}^{m} - 2\,u_{I}^{m} + u_{I+1}^{m}) \\ + u_{I-1}^{m-1} - 2\,u_{I}^{m-1} + u_{I+1}^{m-1} \end{bmatrix} = f_{I}^{m}.$$
(98)

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

$$u(t_m, x_I) = \frac{1}{12} \left[u_{I+1}^m + 10 \ u_I^m + u_{I-1}^m \right] - \frac{h^2}{12} \ u_{xx}(t_m, x_I) + O(h^4).$$
(99)

Prvý riadok rovnice (99) 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 **A** chápať ako aplikovanie druhej derivácie v časovom smere a operátora identity v priestorovom smere, čo je možné vyjadriť pomocou konvolúcie:

$$\tilde{\mathbf{A}} = \frac{\rho}{12\Delta t^2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -2 & -2 & -2 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \ast \ast \begin{pmatrix} 1 & 10 & 1 \\ 1 & 10 & 1 \\ 1 & 10 & 1 \end{pmatrix} = \\
= \frac{\rho}{12\Delta t^2} \begin{pmatrix} 1 & 10 & 1 \\ -2 & -20 & -2 \\ 1 & 10 & 1 \end{pmatrix}.$$
(100)

Tento prístup založený na aplikovaní jednorozmerných operátorov v jednotlivých smeroch je dôležitý, pretože Takeuchi a Geller (2000) ho používajú na odvodenie 2D a 3D schém. Nevyužívajú Taylorove rozvoje na hľadanie vhodnej štruktúry aproximácie zrejme preto, že je náročné riešiť veľké množstvo rovníc pre koeficienty,

ktoré pomocou konvolúcie dostanú priamo. Metóda Taylorových rozvojov však dáva možnosť minimalizovať rozsah operátorov a kontrolovať štruktúru rozvoja operátorov. Preto ju uprednostňujeme a v našich odvodeniach ju budeme používať.

Ak by sme definovali všeobecnú štruktúru rozvoja optimálne presnej aproximácie 1D pohybovej rovnice,

$$TE_{h,\Delta t} \left\{ (\tilde{\mathbf{A}} - \tilde{\mathbf{K}}) * * \mathbf{u}_{I}^{m} \right\} =$$

= $E + d_{1}E_{,t} + d_{2}E_{,x} + d_{3}E_{,xt} + d_{4}E_{,tt} + d_{5}E_{,xx} +$
+ $O(\Delta t^{4}) + O(h^{4}) + O(h^{2}\Delta t^{2}),$ (101)

v jednorozmernom prípade nie je komplikované aj súčasné hľadanie koeficientov operátora $\tilde{\mathbf{L}} = \tilde{\mathbf{A}} - \tilde{\mathbf{K}}$ a koeficientov d_i . V Taylorovom rozvoji budeme požadovať zhodu nasledovných koeficientov:

Dostaneme sústavu 15 rovníc s 9+5 = 14 neznámymi, ktorá však má jednoznačné riešenie a je to $\tilde{\mathbf{L}} = \tilde{\mathbf{A}} - \tilde{\mathbf{K}}$ s operátormi (96) a (97) a rozvoj má štruktúru (84).

Lax-Wendroffova schéma

Takeuchi a Geller (2000) ukazujú, že Lax-Wendroffova schéma má Taylorov rozvoj tvaru (78). Môžeme ju teda nazvať optimálne presná schéma. Z rovnice (54) máme

$$\mathbf{L}^{**} \mathbf{u}_{I}^{m} = \frac{u_{I}^{m+1} - 2u_{I}^{m} + u_{I}^{m-1}}{\Delta t^{2}} - c^{2} \frac{-u_{I+2}^{m} + 16u_{I+1}^{m} - 30u_{I}^{m} + 16u_{I-1}^{m} - u_{I-2}^{m}}{12h^{2}} - \frac{c^{4} \Delta t^{2}}{12} \frac{u_{I+2}^{m} - 4u_{I+1}^{m} + 6u_{I}^{m} - 4u_{I-1}^{m} + u_{I-2}^{m}}{h^{4}}.$$
 (103)

Potom

$$\mathrm{TE}_{h,\Delta t}\left\{\mathbf{L} \ast \ast \mathbf{u}_{I}^{m}\right\} = \rho \ddot{u} - C \, u_{,xx} +$$

$$+ \frac{1}{12} \Delta t^{2} \rho \{ \rho \ddot{u} - C u_{,xx} \}_{,tt} + \\ + \frac{1}{12} \Delta t^{2} C \{ \rho \ddot{u} - C u_{,xx} \}_{,xx} + \\ + O(\Delta t^{4}) + O(h^{4}) + O(h^{2} \Delta t^{2}).$$
(104)

Rozvoj (104) znamená, že Lax-Wendroffova schéma je explicitná optimálne presná schéma na rozdiel od implicitnej optimálne presnej schémy (98). Keďže sú chybové členy rovnakého rádu, Lax-Wendroffova musí mať väčší priestorový rozsah.

Prediktor-korektor schéma na riešenie optimálne presných schém

Optimálne presná schéma (98) je implicitná. Geller a Takeuchi (1998) používajú prediktor-korektor schému založenú na Bornovej aproximácii prvého rádu aby sa vyhli simultánnemu riešeniu veľkého systému rovníc v každej časovej hladine.

Z konvenčnej aproximácie pohybovej rovnice

$$(\mathbf{A} - \mathbf{K}) * * \mathbf{u}_I^m = f \tag{105}$$

možno vďaka tvaru operátora A a K po vyjadrení priamo vypočítať u_I^{m+1} . To nie je možné pre implicitnú optimálne presnú schému

$$(\tilde{\mathbf{A}} - \tilde{\mathbf{K}}) * * \tilde{\mathbf{u}}_I^m = f$$
, (106)

pretože u_{I-1}^{m+1} a u_{I+1}^{m+1} sú neznáme, bolo by potrebné riešiť celú sústavu zviazaných rovníc. Obe rovnice môžeme odčítať:

$$(\tilde{\mathbf{A}} - \tilde{\mathbf{K}}) * \tilde{\mathbf{u}}_{I}^{m} - (\mathbf{A} - \mathbf{K}) * \tilde{\mathbf{u}}_{I}^{m} = 0.$$
(107)

Po dosadení $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \delta \mathbf{A}$, $\tilde{\mathbf{K}} = \mathbf{K} + \delta \mathbf{K}$ a $\tilde{\mathbf{u}}_I^m = \mathbf{u}_I^m + \delta \mathbf{u}_I^m$ dostaneme

$$(\mathbf{A} + \delta \mathbf{A} - \mathbf{K} - \delta \mathbf{K}) * * (\mathbf{u}_I^m + \delta \mathbf{u}_I^m) - (\mathbf{A} - \mathbf{K}) * * \mathbf{u}_I^m = 0.$$
(108)

Použitím Bornovej aproximácie prvého rádu, t.j. zanedbaním $(\delta \mathbf{A} - \delta \mathbf{K}) * * \delta \mathbf{u}_I^m$, dostaneme

$$(\mathbf{A} - \mathbf{K}) * \delta \mathbf{u}_{I}^{m} = -(\delta \mathbf{A} - \delta \mathbf{K}) * \mathbf{u}_{I}^{m}.$$
(109)

Predpokladajme, že v predchádzajúcich časových hladinách sme konvenčné riešenie korigovali, teda δu^{m-1} a δu^{m-2} sú nulové

$$\delta \mathbf{u}_{I}^{m} = \begin{pmatrix} \delta u_{I-1}^{m+1} & \delta u_{I}^{m+1} & \delta u_{I+1}^{m+1} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$
 (110)

Vzhľadom na štruktúru matíc konvenčných operátorov (71) a (72) sa ľavá strana rovnice (109) redukuje na $\frac{\rho}{\Delta t^2} \delta u_I^{m+1}$, teda je z nej možné priamo vypočítať δu_I^{m+1} :

$$\delta u_I^{m+1} = -\frac{\Delta t^2}{\rho} \left(\delta \mathbf{A} - \delta \mathbf{K} \right) ** \mathbf{u}_I^m.$$
(111)

Na základe týchto zistení môžeme použiť nasledovný prediktor-korektor algoritmus na približné riešenie optimálne presnej schémy (106):

- 1. vo všetkých priestorových pozíciách vypočítame konvenčné riešenie u_I^{m+1} ,
- 2. vo všetkých priestorových pozíciách vypočítame δu_I^{m+1} z rovnice (111),
- 3. vypočítame korigované hodnoty hodnoty posunutia, ktoré priradíme priamo do poľa u_I^{m+1} : $u_I^{m+1} := u_I^{m+1} + \delta u_I^{m+1}$,
- 4. m := m + 1, pokračujeme ďalším časovým krokom (1. krok).

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

Kristek a Moczo (2006) analyzovali sieťovú disperziu konvenčnej, striedavo usporiadanej a prediktor-korektor schémy v 1D prípade. Dospeli k zisteniu, že prediktor-korektor schéma má oveľa menšiu sieťovú disperziu ako konvenčná a striedavo usporiadaná schéma. Rozdiely medzi presným riešením a numerickým riešením kvantifikovali s využitím časovo-frekvenčných misfitov (Kristeková et al., 2006), pozri obr. (5). Mieru rozdielu signálov v obálke charakterizuje misfit obálky (EM - envelope misfit), mieru rozdielu signálov vo fáze kvantifikuje fázový misfit (PM - phase misfit). Čím je ich hodnota menšia, tým sa signály menej líšia.

Heterogénna optimálne presná schéma

Takeuchi a Geller (2000) riešia prípad materiálového rozhrania koincidujúceho so sieťovými bodmi. Prístup nazývaný "overlapping" (prekrývanie) je analógiou asemblovania lokálnych matíc v metóde konečných elementov. Operátory pri voľnom povrchu možno získať úvahou o skladaní matíc dvoch homogénnych prostredí – musíme dostať operátory v neohraničenom prostredí:



Obr. 5. Kumulatívny efekt sieťovej disperzie pri šírení v homogénnom prostredí do vzdialenosti 20 dominantných vlnových dĺžok pre konvenčnú schému (Dconv2), striedavo usporiadanú schému (DSStag4) a prediktorkorektor algoritmus pre prediktor-korektor schému (Doptm2). Zobrazený je misfit obálky a fázový misfit v závislosti od vzorkovania (N) a pomeru stability p. Prevzaté z práce Kristek a Moczo (2006).

$$\tilde{\mathbf{A}} = \frac{\rho}{12\Delta t^2} \begin{pmatrix} 1 & 10 & 1 \\ -2 & -20 & -2 \\ 1 & 10 & 1 \end{pmatrix} = \\
= \frac{\rho}{12\Delta t^2} \begin{pmatrix} 1 & 5 & 0 \\ -2 & -10 & 0 \\ 1 & 5 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\rho}{12\Delta t^2} \begin{pmatrix} 0 & 5 & 1 \\ 0 & -10 & -2 \\ 0 & 5 & 1 \end{pmatrix} \quad (112)$$

а

$$\tilde{\mathbf{K}} = \frac{C}{12h^2} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1\\ 10 & -20 & 10\\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} = \\
= \frac{C}{12h^2} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0\\ 10 & -10 & 0\\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{C}{12h^2} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1\\ 0 & -10 & 10\\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (113)$$

"Overlapping" v hladko heterogénnom prostredí dáva (Geller a Takeuchi, 1998)

$$\tilde{\mathbf{A}}_{I} = \frac{\rho_{I}}{12\Delta t^{2}} \begin{pmatrix} 1 & 10 & 1 \\ -2 & -20 & -2 \\ 1 & 10 & 1 \end{pmatrix},$$
(114)

$$\tilde{\mathbf{K}}_{I} = \frac{C_{I-1} + C_{I}}{24h^{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 10 & -10 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{C_{I} + C_{I+1}}{24h^{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 0 & -10 & 10 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (115)$$

pričom ρ_I a C_I sú bodové hodnoty materiálových parametrov. Tento prístup v prípade rozhraní koincidujúcich so sieťovými bodmi a hladko heterogénneho prostredia dáva dostatočne 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

$$\tilde{\mathbf{A}}_{I} = \frac{\rho_{I}^{A}}{12\Delta t^{2}} \begin{pmatrix} 1 & 10 & 1 \\ -2 & -20 & -2 \\ 1 & 10 & 1 \end{pmatrix},$$
(116)

$$\tilde{\mathbf{K}}_{I} = \frac{C}{12h^{2}} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 10 & -20 & 10 \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C_{I-1/2}^{H} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}(C_{I-1/2}^{H} + C_{I+1/2}^{H}) & 0 \\ 0 & 0 & C_{I+1/2}^{H} \end{pmatrix},$$
(117)

kde

$$\rho_I^A = \frac{1}{h} \int_{z_{I-1/2}}^{z_{I+1/2}} \rho(z) \, \mathrm{d}z, \tag{118}$$

$$C_{I+1/2}^{H} = \left[\frac{1}{h} \int_{z_{I}}^{z_{I+1}} \frac{1}{C(z)} \, \mathrm{d}z\right]^{-1}.$$
(119)

Porovnania s konvenčnými a striedavo usporiadanými schémami ukazujú, že chyba riešenia spôsobená sieťovou disperziou je použitím metódy prediktor-korektor výrazne redukovaná ako v homogénnom prostredí tak aj v prípade rozhrania alebo gradientového prostredia.

1.3.10 Simulácia neodrážajúcich hraníc

Náročnosť numerických metód na operačnú pamäť aj výpočtový čas rastie s počtom sieťových bodov v modeli. Preto je približne priamo úmerná objemu výpočtového modelu pri nezmenených ostatných parametroch. Napriek tomu, že možnosti výpočtovej techniky neustále rastú, výpočtové nároky sú stále veľmi obmedzujúcim a určujúcim faktorom pri výpočtoch a je potrebné ich adekvátne zvažovať v príprave výpočtov. V mnohých aplikáciách je možné podstatne zredukovať výpočtový objem, ak blízke okolie zdroja a prijímačov ohraničíme tzv. neodrážajúcimi hranicami. Tie nám dovoľujú ohraničiť relatívne malý výpočtový objem bez toho, aby odrazy od umelej hranice znehodnotili riešenie.

Na realizáciu neodrážajúcich hraníc boli vyvinuté viaceré prístupy s rôznou náročnosťou a účinnosťou. Jeden typ prístupov predpisuje absorbujúce okrajové podmienky na hranici a nepridáva k výpočtovej oblasti žiadny ďalší objem. Tieto prístupy sú založené na extrapolovaní vlnového poľa mimo výpočtovú oblasť a na základne extrapolovanej hodnoty je počítané posunutie resp. napätie priamo na hranici. Najznámejšie a najpoužívanejšie sú metódy navrhnuté autormi Clayton a Engquist (1977), Higdon (1991) a Peng a Toksöz (1994, 1995). Tieto prístupy sú na implementáciu do konečno-diferenčných schém jednoduchšie. Sú realizované ako špeciálny typ aproximácií pri okraji výpočtovej oblasti.

Druhý typ pridáva k modelu tzv. útlmovú zónu, kde sa postupne utlmujú amplitúdy vlnenia. Známy je prístup autorov Kosloff a Kosloff (1986) a predovšetkým prístup pomocou PML (perfectly matched layers, Bérenger, 1994), ktorý je v súčasnosti považovaný za najúčinnejší stabilný prístup s akceptovateľnými výpočtovými nárokmi. Napriek tomu, že tento prístup je veľmi výpočtovo efektívny, nie je dokonalý a bude ďalej vylepšovaný.

1.3.11 Simulácia seizmického zdroja

Tektonické zemetrasenie vzniká pri náhlom uvoľnení nakumulovanej energie deformácie na seizmoaktívnom zlome. Náhly vzájomný posun hornín oddelených zlomom spôsobí vyžiarenie seizmických vĺn, ktoré sa šíria vnútrom zemského telesa a spôsobujú seizmický pohyb povrchu Zeme. Pri mnohých seizmologických aplikáciách môžeme seizmoaktívny zlom reprezentovať ako zlomovú plochu v elastickom alebo viskoelastickom materiáli. Samotné generovanie seizmických vĺn je potom dôsledkom dynamického šírenia trhliny (matematicky diskontinuity v posunutí) na zlomovej ploche. Časový vývoj diskontinuity v posunutí (sklzu) závisí od veľkosti trenia, ktoré je určované normálovou zložkou napätia na zlomovej ploche a koeficientom trenia, ktorý môže byť závislý sklzu, rýchlosti sklzu a tiež stavových veličín. Zlomová plocha, na ktorej musíme zákon trenia aplikovať, je často geometricky komplikovaná. Preto môže byť zahrnutie dynamického šírenia trhliny na zlomovej ploche veľmi náročné. Najčastejšie používaná a pravdepodobne aj najpresnejšia metóda na simulovanie dynamiky seizmického zdroja v metóde konečných diferencií (i metóde konečných elementov) je metóda napätia v rozdelených uzloch (TSN - traction-at-split-node). Stručný prehľad jej implementácie v sieťových metódach je v Moczo et al. (2007a).

Pokiaľ je priebeh sklzu známy (získaný napr. pomocou inverzie seizmických záznamov), môžeme použiť kinematickú implementáciu seizmického zdroja. Tá spočíva v predpísaní šírenia trhliny na zlomovej ploche bez nutnosti riešiť samotný zákon trenia. Kinematické modelovanie je v prípade sieťových metód značne jed-noduchšie ako dynamické. Preto je pri testovaní numerických metód je vhodné najskôr implementovať kinematický seizmický zdroj. Realizovať ho je možné distribúciou bodových zdrojov na zlomovej ploche. Namiesto diskontinuity v posunutí je pre každý bodový zdroj predpísaný silový ekvivalent (napr. Aki a Richards, 1980, 2002).

Implementácia silových ekvivalentov do sieťovej metódy spočíva v predpísaní časového priebehu objemovej sily. V prípade konvenčných schém je implementácia priamočiara, v striedavo usporiadaných schémach sa vyberajú symetricky najbližšie body, v ktorých počítame tú zložku posunutia/rýchlosti posunutia, v smere ktorej má byť aplikovaná sila (napr. Moczo et al., 2007b).

V niektorých prípadoch je výhodné vlnové pole budiť využitím analytického riešenia alebo riešenia menej výpočtovo náročného v určitom objeme. Príkladom môže byť výpočet lokálnych efektov hybridnou metódou pomocou dekompozície vlnového poľa. Výpočet môžeme rozdeliť do dvoch krokov. Najskôr počítame šírenie vlnenia v podloží bez prítomnosti lokálnej štruktúry v jednoduchom 1D modeli napr. metódou diskrétnych vlnových čísel. Následne predpisujeme hodnoty riešenia vypočítané v prvom kroku na hranici kvádra ohraničujúcom lokálnu štruktúru a zabezpečíme, aby rozptýlené vlnové pole bolo kvádrom prepúšťané do okolia. Tento prístup je označovaný aj budenie vlnového poľa pomocou excitačného boxu (Alterman a Karal (1968) ho použili, aby sa vyhli singularite bodového zdroja, neskôr bol využitý viacerými autormi.

2 Ciele dizertačnej práce

- 1. Analyzovať konvenčné a striedavo usporiadané konečno-diferenčné schémy používané v súčasnosti pri modelovaní šírenia seizmických vĺn.
- 2. Analyzovať dosiaľ vyvinuté/publikované optimálne presné operátory a optimálne presné schémy a prediktor-korektor algoritmy.
- Navrhnúť optimálne presné operátory pre 3D prípad a odvodiť optimálne presnú schému.
- Vyvinúť výpočtový program implementujúci prediktor-korektor algoritmus založený na optimálne presnej schéme.
- Numericky testovať prediktor-korektor algoritmus a porovnať ho s inými výpočtovými metódami.

Ciele dizertačnej práce

3 Výsledky dizertačnej práce

Vlastnosti konečno-diferenčných schém, ktoré môžu ovplyvniť naše rozhodnutie aplikovať pri riešení určitého problému konkrétnu schému sú predovšetkým:

- aplikovateľnosť schémy na daný problém,
- presnosť, s akou potrebujeme riešenie získať,
- zložitosť algoritmu a komplikovanosť implementácie algoritmu do výpočtových programov,
- náročnosť na pamäť počítača,
- náročnosť na výpočtový čas.

3.1 1D problém

Pre realistické modelovanie šírenia seizmických vĺn a modelovanie seizmického pohybu 1D modely jednoznačne nie sú dostatočné, pretože zďaleka nemôžu aproximovať zložitú štruktúru Zeme. Napr. pri lokálnych efektoch významné amplitúdy seizmického pohybu vznikajú v dôsledku rezonancie spôsobenej geometriou lokálnej štruktúry a pri jednorozmernej aproximácii by sme boli limitovaní na výnimočné prípady horizontálnej vrstvy na polpriestore a špeciálneho vlnového poľa.

Aj napriek tomu sa budeme zaoberať najskôr 1D prípadom a to najmä z metodických dôvodov. Ukážeme prístupy používané na odvodenie a analýzu schém, ktoré v 3D prípade môžu byť veľmi náročné a zložité. Poznatky, ktoré v jednoduchšom 1D prípade získame, budeme potom aplikovať aj pri odvodeniach 3D schém.

3.1.1 Presnosť aproximácií 1D schém

Budeme sa zaoberať 1D pohybovou rovnicou. Presnosť aproximácie jednorozmerných schém vyšetríme pomocou Taylorových rozvojov. Pre zjednodušenie zápisu zavedieme označenie

$$E = \ddot{u} - c^2 u_{,xx} , \qquad (120)$$

kde $c = \sqrt{C/\rho}$ je fázová rýchlosť. *E* je ľavá strana 1D pohybovej rovnice, ktorú spĺňajú vlastné módy.

Dconv2:

$$u_{I}^{m+1} = 2u_{I}^{m} - u_{I}^{m-1} + \frac{c^{2}\Delta t^{2}}{h^{2}} (u_{I+1}^{m} - 2u_{I}^{m} + u_{I-1}^{m}).$$
(121)

Rozvoj pravej strany so stredom v bode $(t + \Delta t, x)$ rovnice (121) dáva:

$$u - E\Delta t^{2} + E_{,t}\Delta t^{3} + O(\Delta t^{4}) + O(h^{4}) + O(h^{2}\Delta t^{2}).$$
(122)

Rovnicu (122) chápeme tak, že pravá strana aproximuje posunutie v nasledujúcej časovej hladine, pričom chybové členy majú štvrtý rád. Členy obsahujúce E a jeho priestorové a časové derivácie sú pre vlastné módy nulové, preto nie sú súčasťou chyby.

Dconv4:

$$u_{I}^{m+1} = 2u_{I}^{m} - u_{I}^{m-1} + \frac{c^{2}\Delta t^{2}}{12h^{2}} \left(-u_{I+2}^{m} + 16u_{I+1}^{m} - 30u_{I}^{m} + 16u_{I-1}^{m} - u_{I-2}^{m}\right).$$
(123)

Rozvoj pravej strany so stredom v bode $(t + \Delta t, x)$ rovnice (123) dáva:

$$u - E\Delta t^{2} + E_{,t}\Delta t^{3} + O(\Delta t^{4}) + O(h^{6}) + O(h^{4}\Delta t^{2}).$$
(124)

Oproti aproximácii (122) sa zvýšil rád chybových členov súvisiacich s priestorovou časťou operátora. Je to v súlade so zvýšením rádu aproximácie priestorovej derivácie.

DSstag4:

Striedavo usporiadaná schéma v napätiach a posunutiach používa ako nezávisle premenné okrem posunutí aj napätia. V každom časovom kroku sa najskôr počítajú napätia z posunutí a následne posunutia z napätí. Ak dosadíme vzťahy pre výpočet napätí do vzťahov pre výpočet posunutí, dostaneme schému v posunutiach

$$u_{I}^{m+1} = 2u_{I}^{m} - u_{I}^{m-1} + \frac{c^{2}\Delta t^{2}}{576h^{2}} (u_{I+3}^{m} - 54u_{I+2}^{m} + 783u_{I+1}^{m} - 1460u_{I}^{m} + 783u_{I-1}^{m} - 54u_{I-2}^{m} + u_{I-2}^{m}).$$
(125)

Rozvoj pravej strany so stredom v bode $(t + \Delta t, x)$ rovnice (123) dáva:

$$u - E\Delta t^{2} + E_{,t}\Delta t^{3} + O(\Delta t^{4}) + O(h^{6}) + O(h^{4}\Delta t^{2}).$$
(126)

Štruktúra chyby vzhľadom na rád aproximácie je teda rovnaká ako pre Dconv4 aj napriek tomu, že operátor priestorovej derivácie má väčší rozsah a dal by sa dosiahnuť ešte vyšší rád aproximácie v priestore.

DLW:

Posunutie v nasledujúcej časovej hladine vyjadríme z Lax-Wendroffovej schémy (rovnica 103):

$$u_{I}^{m+1} = 2u_{I}^{m} - u_{I}^{m-1} + \frac{c^{2}\Delta t^{2}}{12h^{2}} (-u_{I+2}^{m} + 16u_{I+1}^{m} - 30u_{I}^{m} + 16u_{I-1}^{m} - u_{I-2}^{m}) + \frac{c^{4}\Delta t^{4}}{12h^{4}} (u_{I+2}^{m} - 4u_{I+1}^{m} + 6u_{I}^{m} - 4u_{I-1}^{m} + u_{I-2}^{m}).$$
(127)

Rozvoj pravej strany so stredom v bode $(t + \Delta t, x)$ rovnice (127) dáva:

$$u - E\Delta t^{2} + E_{,t}\Delta t^{3} - \frac{c^{2}\Delta t^{4}}{12}E_{,xx} - \frac{7\Delta t^{4}}{12}E_{,tt} + \frac{c^{2}\Delta t^{5}}{12}E_{,txx} + \frac{\Delta t^{5}}{4}E_{,ttt} + O(h^{6}) + O(h^{4}\Delta t^{2}).$$
(128)

Chybové členy sú šiesteho rádu. Konštatujeme, že schéma je presnejšia ako všetky doteraz uvedené schémy.

DOA2:

Posunutie v nasledujúcej časovej hladine vyjadríme z rovnice (98):

$$u_{I}^{m+1} = \frac{h^{2}}{2(5h^{2} + c^{2}\Delta t^{2})} \left[-u_{I-1}^{m+1} + 2 u_{I-1}^{m} - u_{I-1}^{m-1} + 20u_{I}^{m} - -10u_{I}^{m-1} - u_{I+1}^{m+1} + 2u_{I+1}^{m} - u_{I+1}^{m-1} \right] + \frac{c^{2}\Delta t^{2}}{2(5h^{2} + c^{2}\Delta t^{2})} \left[u_{I-1}^{m+1} + u_{I+1}^{m+1} + 10u_{I-1}^{m} - 20 u_{I}^{m} + + 10u_{I+1}^{m} + u_{I-1}^{m-1} - 2 u_{I}^{m-1} + u_{I+1}^{m-1} \right].$$
(129)

Rozvoj pravej strany so stredom v bode $(t + \Delta t, x)$ rovnice (129) dáva:

$$u + \frac{h^{2}}{c^{2}} (-6 E + 6\Delta t E_{,t} - \frac{7}{2}\Delta t^{2} E_{,tt} + \frac{3}{2}\Delta t^{3} E_{,ttt}) + \frac{h^{4}}{c^{4}\Delta t^{2}} (30 E - 30\Delta t E_{,t} - \frac{1}{2}c^{2}\Delta t^{2} E_{,xx} + \frac{35}{2}\Delta t^{2} E_{,tt} + \frac{1}{2}c^{2}\Delta t^{3} E_{,txx} - \frac{15}{2}\Delta t^{3} E_{,ttt}) + O(h^{6}) + O(h^{4}\Delta t^{2}) + O(h^{2}\Delta t^{4}) + O(\Delta t^{6}).$$
(130)

Rovnako ako pre Lax-Wendroffovu DLW schému chybové členy sú šiesteho rádu. Preto Lax-Wendroffova schéma DLW a optimálne presná schéma DOA2 majú porovnateľnú presnosť aproximácií. Zásadný rozdiel je v tom, že optimálne presná schéma je implicitná.

Doptm2:

Prediktor-korektor schému, ktorá je založená na aplikovaní korekcie (111), je možné zapísať ako konvenčnú schému na výpočet posunutia:

$$\tilde{u}_{I}^{m+1} = u_{I}^{m+1} - \frac{\Delta t^{2}}{\rho} \left(\delta \mathbf{A} - \delta \mathbf{K} \right) ** \mathbf{u}_{I}^{m}.$$
(131)

Po zjednodušení a úprave pre homogénne prostredie dostaneme schému

$$u_{I}^{m+1} = 2u_{I}^{m} - u_{I}^{m-1} + \frac{c^{2}\Delta t^{2}}{12h^{2}}(-u_{I+2}^{m} + 16u_{I+1}^{m} - 30u_{I}^{m} + 16u_{I-1}^{m} - u_{I-2}^{m}) + \frac{c^{4}\Delta t^{4}}{12h^{4}}(u_{I+2}^{m} - 4u_{I+1}^{m} + 6u_{I}^{m} - 4u_{I-1}^{m} + u_{I-2}^{m}), \qquad (132)$$

ktorá je identická so schémou (128). Preto sa prediktor-korektor algoritmus v homogénnom prostredí redukuje na Lax-Wendroffovu schému (Mizutani, 2000). To súčasne znamená, že prediktor-korektor schéma má rovnaký rád aproximácie ako optimálne presná schéma, z ktorej sme ju odvodili.

Schému (132) je možné odvodiť metódou rozvoja do Taylorových radov. Postup je veľmi podobný odvodeniu operátora D (92). Dostávame jednoznačné riešenie. Keďže že Lax-Wendroffova schéma DLW a prediktor-korektor schéma Doptm2 používajú na aproximácie rovnaké časopriestorové pozície, sú totožné.

Analýzu sme vykonali pre homogénne prostredie. Zaujíma nás však najmä presnosť modelovania v heterogénnom prostredí. Pri Lax-Wendroffovej schéme spôsobuje heterogenita zníženie rádu konvergencie k presnému riešeniu (napr. Fricke, 1991). Prediktor-korektor schéma rieši heterogénne prostredie aplikovaním prediktora a korektora s malým priestorovým rozsahom. Preto možno očakávať, že presnosť simulovania materiálových rozhraní bude lepšia.

Na obrázku 6 sú pre porovnanie znázornené časopriestorové pozície (šedé guľky), z ktorých počítame posunutie v novej časovej hladine (čierna guľka) pre konvenčnú, optimálne presnú a Lax-Wendroffovu schému, resp. prediktor-korektor schému v homogénnom prostredí (rovnica 132), resp. aj Dconv4.

konvenčná schéma Dconv2	•	$t + \Delta t$
		t
	٢	$t - \Delta t$
optimálne presná schéma DOA2	• • •	$t + \Delta t$
		t
		$t - \Delta t$
	٠	$t + \Delta t$
prediktor-korektor schéma Doptm2 (aj DLW)	$\bigcirc \bigcirc \bigcirc \bigcirc \bigcirc \bigcirc \bigcirc$	t
		$t - \Delta t$
	$ \begin{array}{c} x - 2 h \\ x - h \\ x \\ x + h \\ x + 2 h \end{array} $	

Obr. 6. Časopriestorové pozície používané na aproximácie v schémach.

3.1.2 Porovnanie sieťovej disperzie 1D schém

V predchádzajúcich kapitolách sme skúmali presnosť aproximácie vlnovej rovnice. Viac ako presnosť operátorov je však dôležité zaujímať sa o presnosť získaného riešenia. Holberg (1987) zistil, že je vhodné skúmať a minimalizovať predovšetkým chybu grupovej rýchlosti. Malá chyba grupovej rýchlosti podľa jeho zistení implikuje aj malú chybu vo fázovej rýchlosti a malú sieťovú disperziu.

Obmedzíme sa na homogénne prostredie. Budeme porovnávať presnú a numerickú fázovú a grupovú rýchlosť šírenia vlastných módov 1D pohybovej rovnice. Do pohybovej rovnice $u_{,tt} = c^2 u_{,xx}$ dosadíme vlastný mód $u = Ae^{i(\omega t - kx)}$ a vyjadrením frekvencie dostaneme disperzný vzťah

$$\omega = c k. \tag{133}$$

47

Fázová a grupová rýchlosť šírenia sú

$$c_f = \frac{\omega}{k} = c, \qquad c_g = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} = c.$$
 (134)

Analogicky vlastný mód dosadíme aj do konečno-diferenčných schém – do jednotlivých schém dosadíme hodnoty v bodoch siete: $u = Ae^{i(\omega t_m - kx_I)}$ (Richtmayer a Morton, 1967). Takto možno získať nasledujúce disperzné vzťahy (v rámčeku je podmienka stability):

Dconv2:

Dconv4:

$$\omega = \frac{2}{\Delta t} \arcsin\left\{\frac{c\Delta t}{\sqrt{6}h}\sqrt{(7-\cos k\,h)\sin^2\frac{k\,h}{2}}\right\} \quad \left[\frac{c\Delta t}{h} \le \frac{\sqrt{3}}{2}\right]$$
$$= c\,k + \frac{1}{24}c\,k^3(c^2\Delta t^2 \qquad) + O(\Delta t^4) + O(h^4) + O(\Delta t^2h^2) \quad (136)$$

DSstag4:

$$\omega = \frac{2}{\Delta t} \arcsin\{\frac{c\Delta t}{h}(\frac{27}{24}\sin\frac{kh}{2} - \frac{1}{24}\sin\frac{3kh}{2})\} \quad \left[\frac{c\Delta t}{h} \le \frac{6}{7}\right]$$
$$= ck + \frac{1}{24}ck^3(c^2\Delta t^2) + O(\Delta t^4) + O(h^4) + O(\Delta t^2h^2) \quad (137)$$

DOA2:

$Doptm2 \equiv DLW:$

$$\omega = \frac{2}{\Delta t} \arcsin\left\{\frac{c\Delta t}{\sqrt{6}h}\sqrt{\left(7 - \frac{c^2\Delta t^2}{h^2} - \left(1 - \frac{c^2\Delta t^2}{h^2}\right)\cos k\,h\right)\sin^2\frac{k\,h}{2}}\right\}\left[\frac{c\Delta t}{h} \le 1\right]$$
$$= c\,k \qquad \qquad + O(\Delta t^4) + O(h^4) + O(\Delta t^2h^2) \tag{139}$$

Vzťahy pre fázovú rýchlosť z dostaneme týchto vzťahov predelením k, grupovú rýchlosť derivovaním podľa k. Ukázalo sa, že vzťahy pre fázovú a grupovú rýchlosť mali v nami skúmanom intervale hodnôt veľmi podobný charakter, preto ďalej

budeme analyzovať chybu grupovej rýchlosti s tým, že analogické tvrdenia platia aj pre chybu fázovej rýchlosti.

Pre Dconv2 je najnižší chybový člen $\frac{1}{24}c k^3(c^2\Delta t^2 - h^2)$. Tento člen 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 Dconv2 spôsobuje chyba menšiu sieťovú fázovú rýchlosť, ako je skutočná, pre striedavo usporiadané schémy naopak väčšiu. DOA2 má najnižší chybový člen až v 4. ráde rovnako ako Doptm2. Podmienka stability pre Doptm2 je rovnaká ako pre Dconv2 aj DOA. Opravou konvenčnej schémy optimálne presným korektorom sa preto podmienka stability nemení.

Aby bolo možné dať do súvislosti veľkosť chyby grupovej rýchlosti s časovofrekvenčnými misfitmi z práce Kristek a Moczo (2006), vykreslíme závislosť chyby grupovej rýchlosti

$$\frac{\Delta c_g^{grid}}{c} = \frac{|c_g^{grid} - c|}{c} \tag{140}$$

v závislosti od pomeru stability $p = c\Delta t/h$ a vzorkovania $N = \lambda_{min}/h$. V testoch bola rýchlosť šírenia c = 3464 m/s, minimálna vlnová dĺžka $\lambda_{min} = 4618.66$ m, dominantná vlnová dĺžka $\lambda_{dom} = 6928$ m. Vlnové číslo, ktoré uvažujeme, bude $k = 2\pi/\lambda_{dom} = 9.07 \times 10^{-4} \text{ m}^{-1}$ (v práci bol použitý signál s úzkym spektrom okolo dominantnej frekvencie). Grafy chyby grupovej rýchlosti sú na obr. 7. Graf zobrazujúci časovo-frekvenčné misfity pri šírení do vzdialenosti $20\lambda_{dom}$ sme uviedli v časti 1.3.9, obr. 5.

Porovnaním obrázkov 5 a 7 zistíme veľmi dobrú zhodu pre Dconv2, DSstag4 a Doptm2. Identický tvar grafov podporuje hypotézu, že chyba riešenia je spôsobená numerickou disperziou fázovej resp. grupovej rýchlosti. Celková chyba (ktorú misfity kvantifikujú) vznikne kumuláciou lokálnych chýb v priebehu šírenia sieťou. Kumulácia je zrejme rovnomerná zo vzdialenosťou, preto tvar grafov chyby sa so vzdialenosťou nemení. V simuláciách vlnenie nie je monofrekvenčné. To môže spôsobovať rozdiely, keďže chyby pre jednotlivé vlnové dĺžky interagujú.

Grafy misfitov môžeme interpretovať na základe rovníc (135), (137) a (139):

• Dconv2 má pre p = 1 misfity nulové (kompenzovanie členov 2. a vyšších rádov).



Obr. 7. Relatívna chyba grupovej rýchlosti ako funkcia N (počtu sieťových krokov na minimálnu vlnovú dĺžku) a p (pomeru stability). Pre optimálne presné schémy sme vykreslili aj graf s dvadsaťnásobne zväčšenými hodnotami.

• DSstag4 má pre p = 1 misfity nenulové (chýba člen $-\frac{1}{24}c k^3 h^2$).

DSstag4 má minimálne misfity pre hodnotu

$$p \approx \frac{1}{kh} \sqrt{\sqrt{1600 + 81h^4k^4} - 40} = \frac{N}{3k\lambda_{min}} \sqrt{\sqrt{1600 + 81\lambda_{min}^4/N^4} - 40}$$
(141)

(napr. pre N = 5 dostaneme $p \approx 0.28$, pre N = 10 je $p \approx 0.14$ – pozri aj obr. 5 a obr. 7).

• Doptm2 má misfity výrazne menšie 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 a 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.

Na základe zhody grafov chyby fázovej a grupovej rýchlosti, fázového misfitu a misfitu obálky možno konštatovať, že numerická disperzia sa približne rovnako prejavuje na chybe obálky a fázy výsledného signálu.

Naše zistenia pri analýze 1D schém môžeme zosumarizovať nasledovne

- metódou rozvoja do Taylorových radov dokážeme efektívne odvodiť a analyzovať konečno-diferenčné schémy
- je vhodné aplikovať kritérium posudzovania schém podľa ich presnosti pre vlastné módy problému,
- implicitná optimálne presná schéma a Lax-Wendroffova schéma sú výrazne presnejšie ako striedavo usporiadaná schéma a konvenčná schéma,
- implicitnú optimálne presnú schému je možné približne riešiť prediktor-korektor algoritmom, pričom jeho presnosť je porovnateľná s presnosťou implicitnej optimálne presnej schémy,
- prediktor-korektor schéma sa pre homogénne prostredie redukuje na Lax-Wendroffovu schému,
- kvôli potenciálne lepším vlastnostiam v heterogénnom prostredí sa ako výhodnejšia javí prediktor-korektor schéma.

V ďalších kapitolách sa budeme venovať analýze a odvodeniu 3D optimálne presnej schémy a prediktor-korektor schémy.

3.2 3D problém

V 1D prípade sme aplikovaním prediktor-korektor algoritmu pre implicitnú optimálne presnú schému pre homogénne prostredie dostali Lax-Wendroffovu schému. Jej presnosť bola porovnateľná ale nižšia ako presnosť optimálne presnej schémy. Predpokladáme, že v 3D prípade aplikovaním prediktor-korektor algoritmu dostaneme analogicky schému menej presnú, ako je implicitná optimálne presná schéma a riešenie bude ovplyvnené presnosťou prediktora. Preto budeme najskôr analyzovať presnosť konvenčnej schémy.

3.2.1 Sieťová disperzia konvenčnej schémy

Budeme vyšetrovať sieťovú disperziu schémy Dconv2 (rovnice 39), ktorá je 3D zovšeobecnením 1D schémy Dconv2. Rovnako ako v 1D prípade spočíva analýza v substituovaní vlastných módov do diferenciálnych a konečno-diferenčných rovníc, vyjadrení disperzných vzťahov a výpočtu fázovej a grupovej rýchlosti. Presné riešenie v homogénnom prostredí dáva dve fázové rýchlosti šírenia:

$$\alpha = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}},\tag{142}$$

$$\beta = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}.$$
 (143)

Vlastný mód, ktorý budeme substituovať do konečno-diferenčných rovníc, má tvar

$$u_{i} = A_{i} e^{i(\omega t_{m} - k_{x} x_{I} - k_{y} y_{I} - k_{z} z_{I})}, \qquad (144)$$

kde k_x , k_y , k_z sú zložky vlnového vektora

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{n} \,, \tag{145}$$

pričom \vec{n} určuje smer šírenia a λ je vlnová dĺžka. Po dosadení do konečnodiferenčných rovníc (39) dostaneme homogénny systém rovníc pre amplitúdy A_i . Aby existovalo netriviálne riešenie, musí byť determinant sústavy nulový. Dostaneme tak rovnicu

$$(1 - CX^{2})(CY^{2} - 1)(CZ^{2} - 1)(r^{2} - 1)^{3}p^{6} + (CY^{2} - 1)(CZ^{2} - 1)(r^{2} - 1)^{2} \cdot$$
(146)

$$\cdot \left[(CXr^2 - r^2 + CY + CZ - 2)p^2 + r^2 - CW(r^2 + 1) + 1 \right] p^4 + + (CX^2 - 1)(CZ^2 - 1)(r^2 - 1)^2 \cdot \cdot \left[(CYr^2 - r^2 + CX + CZ - 2)p^2 + r^2 - CW(r^2 + 1) + 1 \right] p^4 + + (CX^2 - 1)(CY^2 - 1)(r^2 - 1)^2 \cdot \cdot \left[(CZr^2 - r^2 + CX + CY - 2)p^2 + r^2 - CW(r^2 + 1) + 1 \right] p^4 + + 4[-(CXr^2 - r^2 + CY + CZ - 2)p^2 - r^2 + CW(r^2 + 1) - 1] \cdot \cdot \left[-(CYr^2 - r^2 + CX + CZ - 2)p^2 - r^2 + CW(r^2 + 1) - 1 \right] \cdot \cdot \left[-(CZr^2 - r^2 + CX + CZ - 2)p^2 - r^2 + CW(r^2 + 1) - 1 \right] \cdot \cdot \left[-(CZr^2 - r^2 + CX + CZ - 2)p^2 - r^2 + CW(r^2 + 1) - 1 \right] = 0,$$

kde

$$r = \alpha/\beta, \qquad p = \frac{\Delta t \beta \sqrt{1 + r^2}}{h}$$
 (147)

sú pomer rýchlostí šírenia a pomer stability,

$$CW = \cos\left(\frac{2\pi}{N}\frac{p}{\sqrt{1+r^2}}\omega\right) \qquad CX = \cos\left(\frac{2\pi}{N}n_x\right)$$
$$CY = \cos\left(\frac{2\pi}{N}n_y\right) \qquad CZ = \cos\left(\frac{2\pi}{N}n_z\right). \tag{148}$$

Podmienka stability a teda aj pomer stability vyplývajú z rovnice (146). Použili sme už dopredu definíciu pomeru stability p, ktorú by sme dostali až požadovaním, aby uhlová frekvencia vyjadrená z rovnice (146) bola reálne číslo (odvodenie je komplikovanejšie a neuvádzame ho).

Rovnica (146) je kubická rovnica pre CW, v ktorom sa nachádza aj ω . Vo všeobecnosti dostaneme teda tri korene, z ktorých môžeme vypočítať disperzné vzťahy pre tri rýchlosti šírenia v sieti. Jeden vzťah je pre šírenie rýchlosťou α^{grid} , dva vzťahy sú pre šírene rýchlosťou β^{grid} . Odlíšime β_1^{grid} a β_2^{grid} , pretože vo všeobecnosti nebudú totožné. Či ide o α^{grid} alebo β^{grid} , môžeme odlíšiť na základe limít:

$$\lim_{h \to 0, \Delta t \to 0} \beta_{1,2}^{grid} = \beta \qquad \lim_{h \to 0, \Delta t \to 0} \alpha^{grid} = \alpha \tag{149}$$

Moczo et al. (2000) ukázali, že pre striedavo usporiadanú schému VSstag4 dostaneme v ľubovoľnom smere dva identické disperzné vzťahy pre $\beta_{1,2}^{grid}$, preto ich nie je potrebné rozlišovať. Všeobecné riešenie rovnice (146) je pomerne komplikované. Názornejšie je zaoberať sa šírením vlnenia v smere osi, diagonály a telesovej diagonály. Veľkosť relatívnej chyby fázovej rýchlosti $\Delta \alpha^{grid} / \alpha$, $\Delta \beta_1^{grid} / \beta$ a $\Delta \beta_2^{grid} / \beta$ v závislosti od pomeru stability p a vzorkovania N je na obrázkoch 8-10. Sú definované analogicky, ako v 1D prípade – pozri rovnicu (140).

V smere osi je $\beta_1^{grid} \equiv \beta_2^{grid}$. Na základe obr. 8 môžeme konštatovať, že chyba $\beta_{1,2}^{grid}$ je väčšia ako chyba α^{grid} . Je to predovšetkým v dôsledku lepšieho vzorkovania, ktoré je nastavené na vlnové dĺžky S vĺn. Vlnové dĺžky P vĺn sú teda r-krát lepšie vzorkované. Pre vysoký aj nízky pomer rýchlostí šírenia r je chyba relatívne malá.

V smere diagonály $\beta_1^{grid} \not\equiv \beta_2^{grid}$. Chyba β_1^{grid} je relatívne malá pri r = 2 aj pri r = 10 (obr. 9). Chyba β_2^{grid} v smere diagonály je najväčšia zo všetkých chýb vo všetkých smeroch šírenia (v smere osi, diagonály i telesovej diagonály) pre r = 2 a tiež pri r = 10. Pre r = 10 dosahuje pre N = 6 chyba β_2^{grid} hodnoty až 2, čo znamená, že vlnenie sa v modeli šíri v smere telesovej diagonály rýchlosťou 3β (na obr. 9 je tento graf v inej mierke ako ostatné, preto je v rámiku). Tento zaujímavý jav, kedy sa časť vlny šíri správnou rýchlosťou a časť sa separuje šírením výrazne vyššou rýchlosťou, sme pozorovali pri numerických testoch, ktoré uvedieme v kapitole 3.2.6.

V smere telesovej diagonály je opäť $\beta_1^{grid} \equiv \beta_2^{grid}$. Chyba $\beta_{1,2}^{grid}$ nie je veľká pri r = 2; dosahuje podobné hodnoty ako v prípade šírenia v smere osi. Pre r = 10 je chyba $\beta_{1,2}^{grid}$ pomerne veľká, pre N = 6 dosahuje hodnoty okolo 1.4. Je teda menšia ako v diagonálnom smere, tiež je však pomerne veľká vzhľadom na ostatné chyby, ktoré dosahujú hodnoty do 0.1 (grafy v rámčekoch sú opäť v inej mierke).

Na základe tejto analýzy môžeme konštatovať, že pri r = 2 aj r = 10 je najväčšia chyba β_2^{grid} pri šírení v smere diagonály. Relatívne veľkú chybu dosahujú aj $\beta_{1,2}^{grid}$ v smere telesovej diagonály pri r = 10.

Chyba v ľubovoľnom inom smere, ako sme uviedli v našej analýze, sa bude zrejme spojite meniť medzi chybami v týchto základných smeroch. Pre ilustráciu je smerová závislosť chyby β_2^{grid} v sieťovej rovine pre vybrané hodnoty N = 12, p = 0.9, a r = 2, 5, 10 ukázaná na obr. 11. Najmenšia chyba je v smere osi a najväčšia v smere diagonály, obrazec je deformovaný s rastúcim r.


Obr. 8. Relatívna chyba fázovej rýchlosti 3D schémy Dconv2 v smere osi ako funkcia N (počtu sieťových krokov na minimálnu vlnovú dĺžku) a p (pomeru stability).



Obr. 9. Relatívna chyba fázovej rýchlosti 3D schémy Dconv2 v smere diagonály ako funkcia N (počtu sieťových krokov na minimálnu vlnovú dĺžku) a p (pomeru stability).



Obr. 10. Relatívna chyba fázovej rýchlosti 3D schémy Dconv2 v smere telesovej diagonály ako funkcia N (počtu sieťových krokov na minimálnu vlnovú dĺžku) a p (pomeru stability).



Obr. 11. Smerová závislosť β_2^{grid}/β v sieťovej rovine pri vybraných hodnotách N = 12, p = 0.9, a r = 2, 5, 10.

3.2.2 Optimálne presná schéma

Optimálne presné schémy pre SH, PSV a 3D prípad odvodili už Takeuchi a Geller (2000). Ich prístup spočíva v definovaní optimálne presných operátorov pomocou konvolúcie 1D operátorov derivácií s operátormi identity. Cieľom modifikácie konvenčných operátorov je dosiahnuť analogickú štruktúru optimálne presného operátora, ako je to v 1D prípade (rovnica 78). Podľa nášho názoru dáva takýto prístup len veľmi obmedzenú kontrolu štruktúry chyby aproximácie a neumožňuje optimalizovať počet časopriestorových pozícií používaných pri aproximácii.

Odvodené 2D SH a PSV schémy autori testovali a konštatujú 30-násobné zvýšenie presnosti pri 3.5-násobnom zvýšení nárokov na výpočtový čas. Z popisu numerického testu však nie je zrejmé, aký pomer rýchlostí šírenia P a S vĺn použili a v akom smere od zdroja bol umiestnený prijímač. Podľa nášho názoru je tento údaj veľmi podstatný, pretože v 2D prípade je chyba fázovej rýchlosti β^{grid} v diagonálnom smere relatívne veľká (ako pre β_2^{grid} v diagonálnom smere v 3D). Je teda principiálne dôležité schému rigorózne odvodiť a komplexne vyšetriť, aby bolo zrejmé, aký prínos v modelovaní šírenia seizmických vĺn znamená.

Pri odvodení budeme sledovať zodpovedajúce odvodenie v práci Moczo et al. (2007b). Pre jednoduchosť uvažujme homogénne prostredie, v ktorom šírenie vl-

nenia je popísané pohybovou rovnicou (5). Vlastné módy sú riešením systému za predpokladu nulovej objemovej sily $f_i = 0$. Analogicky s 1D prípadom označíme zložky pohybovej rovnice (pozri 23) pre vlastné módy:

$$E_{x} = X_{2} u + M_{xy} v + M_{xz} w,$$

$$E_{y} = M_{yx} u + Y_{2} v + M_{yz} w,$$

$$E_{z} = M_{zx} u + M_{zy} v + Z_{2} w.$$
(150)

Operátory sú definované rovnicami (24). Budeme hľadať také modifikované aproximácie pre každú z rovníc (23), aby mali štruktúru, ktorá je 3D zovšeobecnením rovnice (78):

$$\tilde{\mathbf{G}}_{x} ** \mathbf{u}_{I,J,K}^{m} + \tilde{\mathbf{H}}_{xy} ** \mathbf{v}_{I,J,K}^{m} + \tilde{\mathbf{H}}_{xz} ** \mathbf{w}_{I,J,K}^{m} = \\ = E_{x} + \sum d_{jk}^{x} \mathcal{D}_{j} \{E_{k}\} + \mathcal{E}_{x} ,$$

$$\tilde{\mathbf{H}}_{xy} ** \mathbf{u}_{I,J,K}^{m} + \tilde{\mathbf{G}}_{y} ** \mathbf{v}_{I,J,K}^{m} + \tilde{\mathbf{H}}_{yz} ** \mathbf{w}_{I,J,K}^{m} = \\ = E_{y} + \sum d_{jk}^{y} \mathcal{D}_{j} \{E_{k}\} + \mathcal{E}_{y} , \qquad (151)$$

$$\tilde{\mathbf{H}}_{xz} ** \mathbf{u}_{I,J,K}^{m} + \tilde{\mathbf{H}}_{yz} ** \mathbf{v}_{I,J,K}^{m} + \tilde{\mathbf{G}}_{z} ** \mathbf{w}_{I,J,K}^{m} =$$

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{xz} &+ \mathbf{u}_{I,J,K} + \mathbf{u}_{yz} &+ \mathbf{v}_{I,J,K} + \mathbf{G}_{z} &+ \mathbf{w}_{I,J,K} - \\ &= E_{z} + \sum d_{jk}^{z} \mathcal{D}_{j} \{ E_{k} \} + \mathcal{E}_{z} \,; \\ k \in \{1, 2, 3\}, \qquad j \in \{1, 2, \ldots\}. \end{aligned}$$

V 3D prípade je postup súčasného hľadania operátorov aj koeficientov d_{jk} príliš komplikovaný. Preto sa opäť pokúsime analyzovať štruktúru chýb štandardných operátorov a na základe nej navrhnúť modifikované operátory. Vďaka tomu, že rovnice (23) môžeme dostať cyklickou zámenou x, y, z a u, v, w v jednej z rovníc, stačí sa zaoberať aproximáciou jednej rovnice. Bez ujmy na všeobecnosti si zvolíme prvú z nich.

Na obr. 12 sú uvedené členy Taylorovho rozvoja, ktoré vzniknú pri štandardných aproximáciách druhých nezmiešaných derivácií a druhých zmiešaných derivácií. Členy 4. a vyššieho rádu sme zahrnuli do chyby. Štruktúru štandardných aproximácií je potrebné modifikovať tak, aby sme dostali štruktúru optimálne presného operátora (151). Najjednoduchší možný spôsob sme vyznačili pridaním členov. Po ich doplnení vznikne štruktúra tvaru

$$\tilde{\mathbf{G}}_{x} ** \mathbf{u}_{I,J,K}^{m} + \tilde{\mathbf{H}}_{xy} ** \mathbf{v}_{I,J,K}^{m} + \tilde{\mathbf{H}}_{xz} ** \mathbf{w}_{I,J,K}^{m} =$$

$$= E_{x} + \frac{1}{12} (\Delta t^{2} \partial_{t}^{2} + h^{2} \partial_{x}^{2} + h^{2} \partial_{y}^{2} + h^{2} \partial_{z}^{2}) E_{x} + \mathcal{E}_{x}.$$
(152)



Obr. 12. Vytváranie štruktúry chyby aproximácie 3D optimálne presného operátora.

Porovnaním s 1D prípadom zistíme, že pre získanie schémy s rovnakým rádom chyby by sme mali požadovať

$$\mathcal{E}_x = O(\Delta t^4) + O(\Delta t^2 h^2) + O(h^4).$$
(153)

Uvažujme časť rovnice (152), ktorá obsahuje len u zložku posunutia. Potrebujeme odvodiť jeden časopriestorový konečno-diferenčný operátor $\tilde{\mathbf{G}}_x$, ktorý bude mať štruktúru rozvoja v rámčeku 1 s presnosťou do štvrtého rádu:

$$TE\{\tilde{\mathbf{G}}_{x} ** \mathbf{u}\} = X_{2}u + \frac{1}{12}(\Delta t^{2}\partial_{t}^{2} + h^{2}\partial_{x}^{2} + h^{2}\partial_{y}^{2} + h^{2}\partial_{z}^{2})X_{2}u + O(\Delta t^{4}) + O(\Delta t^{4}) + O(\Delta t^{2}h^{2}) + O(h^{4}).$$
(154)

Analogicky s 1D prípadom použijeme nasledujúce diskrétne hodnoty posunutia:

$$u_{I+i,J+j,K+k}^{m+M}; \qquad M, i, j, k \in \{-1, 0, 1\}.$$
(155)

Symetria časopriestorových pozícií okolo bodu aproximácie (t_m, x_I, y_J, z_K) umožňuje dosiahnuť požadovaný rád aproximácie s použitím minimálneho počtu časopriestorových pozícií.

Definícia (155) zahŕňa 81 pozícií a preto je potrebné určiť 81 neznámych koeficientov operátora, aby bola splnená rovnica (154). Postupom, ktorý sme uviedli v kapitole 1.3.9, môžeme tieto koeficienty získať. Na obr. 13 sú vyznačené nenulové koeficienty operátora $\tilde{\mathbf{G}}_x$, ktorých je len 7+19+7 = 33 z celkového počtu 81.



Obr. 13. Štruktúra nenulových koeficientov operátora $\mathbf{\tilde{G}}_x$.

Operátory $\tilde{\mathbf{H}}_{xy}$ a $\tilde{\mathbf{H}}_{xz}$ pre zmiešané derivácie musia spĺňať vzťahy (pozri aj obr. 12, 2 a 3):

$$\operatorname{TE}\{\tilde{\mathbf{H}}_{xy} \ast \ast \mathbf{v}\} = X_{xy}v + \frac{1}{12}(\Delta t^2 \partial_t^2 + h^2 \partial_x^2 + h^2 \partial_y^2 + h^2 \partial_z^2)X_{xy}v + O(\Delta t^4) + O(\Delta t^2 h^2) + O(h^4),$$
(156)

$$TE\{\tilde{\mathbf{H}}_{xz} ** \mathbf{w}\} = X_{xz}w + \frac{1}{12}(\Delta t^2 \partial_t^2 + h^2 \partial_x^2 + h^2 \partial_y^2 + h^2 \partial_z^2)X_{xz}w + O(\Delta t^4) + O(\Delta t^2 h^2) + O(h^4).$$
(157)

Koeficient pri chybovom člene najnižšieho rádu pre nezmiešané derivácie je 1/12a pre zmiešané derivácie 1/6. Ak majú byť skombinované do jednej rovnice, je potrebné mať jednotný koeficient. V našom prípade sme sa rozhodli prispôsobiť koeficient zmiešanej derivácie. Na obr. 12 sú zobrazené aj pôvodné členy s koeficientom 1/6 aj požadované s koeficientom 1/12.

Ako uvádzajú aj Takeuchi a Geller (2000), modifikácia koeficientu 1/6 vyžaduje rozšíriť rozsah konečno-diferenčného operátora zmiešanej derivácie. Inak sa nedá požadovaná štruktúra dosiahnuť. Zmena je možná, ak pridáme pozície pre operátor zmiešanej derivácie s rozsahom 4h:

$$v_{I+i,J+j,K+k}^{m+M}; \qquad M, i, j, k \in \{-1, 0, 1\},$$

$$v_{I+2,J+2,K}^{m}, v_{I-2,J+2,K}^{m}, v_{I+2,J-2,K}^{m}, v_{I-2,J-2,K}^{m}.$$
 (158)

Výsledné nenulové koeficienty operátora $\tilde{\mathbf{H}}_{xy}$ sú na obr. 14. Operátor $\tilde{\mathbf{H}}_{xz}$ potom môžeme dostať rotáciou $\tilde{\mathbf{H}}_{xy}$ okolo osi x o 90°.



Obr. 14. Štruktúra nenulových koeficientov operátora $\tilde{\mathbf{H}}_{xy}$.

Po zostavení aproximácií pre E_x vieme analogicky zostaviť aj aproximácie pre E_y a E_z . Celú schému môžeme zapísať v tvare

$$\tilde{\mathbf{G}}_{x} * * \mathbf{u}_{I,J,K}^{m} + \tilde{\mathbf{H}}_{xy} * * \mathbf{v}_{I,J,K}^{m} + \tilde{\mathbf{H}}_{xz} * * \mathbf{w}_{I,J,K}^{m} = F_{I,J,K}^{x,m},$$

$$\tilde{\mathbf{H}}_{xy} * * \mathbf{u}_{I,J,K}^{m} + \tilde{\mathbf{G}}_{y} * * \mathbf{v}_{I,J,K}^{m} + \tilde{\mathbf{H}}_{yz} * * \mathbf{w}_{I,J,K}^{m} = F_{I,J,K}^{y,m}, \qquad (159)$$

$$\tilde{\mathbf{H}}_{xz} * * \mathbf{u}_{I,J,K}^{m} + \tilde{\mathbf{H}}_{yz} * * \mathbf{v}_{I,J,K}^{m} + \tilde{\mathbf{G}}_{z} * * \mathbf{w}_{I,J,K}^{m} = F_{I,J,K}^{z,m}.$$

Túto schému budeme označovať DOA2.



Obr. 15. Vizualizácia optimálne presných nezmiešaných druhých derivácií v operátoroch $\tilde{\mathbf{G}}_x$, $\tilde{\mathbf{G}}_y$, $\tilde{\mathbf{G}}_z$.



Obr. 16. Vizualizácia optimálne presných zmiešaných druhých derivácií v operátoroch $\tilde{\mathbf{H}}_{xy}$, $\tilde{\mathbf{H}}_{xz}$, $\tilde{\mathbf{H}}_{yz}$.

3D problém

Operátory pre všetky typy derivácií sú zobrazené na obr. 15 a 16. V plnej forme môžeme schému zapísať v tvare:

$$\frac{\rho}{12\Delta t^{2}} \left(6 L_{\circ\circ\circ}^{\bullet} + L_{-\circ\circ}^{\bullet} + L_{\circ\circ\circ}^{\bullet} + L_{\circ-\circ}^{\bullet} + L_{\circ+\circ}^{\bullet} + L_{\circ\circ\circ}^{\bullet} + L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + L_{\circ\circ\circ}^{\bullet} + L_{\circ\circ\circ}^{\bullet} + L_{\circ\circ\circ}^{\bullet} + L_{\circ\circ\circ}^{\bullet} + L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + L_{\circ\circ\circ}^{\bullet} + L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + L_{\circ\circ\circ}^{\bullet} + L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} - 2L_{\circ\circ\circ}^{+} - 2L_{\circ\circ\circ}^{-} - 2L_{\circ\circ\circ}^{+}) W = -\frac{\lambda + \mu}{96h^{2}} \left(10 L_{\circ\circ\circ}^{\circ} - \bar{L}_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} - 2L_{\circ\circ\circ}^{+} - 2L_{\circ\circ\circ}^{-} - 2L_{\circ\circ\circ}^{+}) W = -\frac{\lambda + \mu}{96h^{2}} \left(10 L_{\circ\circ\circ}^{\circ} - \bar{L}_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} - 2L_{\circ\circ\circ}^{+} - 2L_{\circ\circ\circ}^{-} - 2L_{\circ\circ\circ}^{+}) W = -\frac{\lambda + \mu}{96h^{2}} \left(10 L_{\circ\circ\circ}^{\circ} - \bar{L}_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} - 2L_{\circ\circ\circ}^{+}) W = -\frac{\lambda + \mu}{96h^{2}} \left(10 L_{\circ\circ\circ}^{\circ} - \bar{L}_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} - 2L_{\circ\circ\circ}^{+}) W = -\frac{\lambda + \mu}{96h^{2}} \left(10 L_{\circ\circ\circ}^{\circ} - \bar{L}_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} - 2L_{\circ\circ\circ}^{+}) W = -\frac{\lambda + \mu}{96h^{2}} \left(10 L_{\circ\circ\circ}^{\circ} - \bar{L}_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} - 2L_{\circ\circ\circ}^{+}) W = -\frac{\lambda + \mu}{96h^{2}} \left(10 L_{\circ\circ\circ}^{\circ} - \bar{L}_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ}^{\circ} - 2L_{\circ\circ\circ}^{+}) W = -\frac{\lambda + \mu}{96h^{2}} \left(10 L_{\circ\circ\circ\circ}^{\circ} - \bar{L}_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ\circ}^{\circ} - 2L_{\circ\circ\circ\circ}^{\circ}) W = -\frac{\lambda}{96h^{2}} \left(10 L_{\circ\circ\circ\circ}^{\circ} - L_{\circ\circ\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ\circ}^{\circ} - 2L_{\circ\circ\circ\circ}^{\circ}) W = -\frac{\lambda}{96h^{2}} \left(10 L_{\circ\circ\circ\circ\circ}^{\circ} - L_{\circ\circ\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ\circ\circ}^{\circ} + 2L_{\circ\circ\circ\circ\circ}$$

$$-\frac{\lambda+\mu}{96h^{2}} \left(10 L_{\bullet\bullet\bullet}^{\circ} - \bar{L}_{\bullet\bullet\bullet}^{\circ} + 2 L_{\bullet\bullet\bullet}^{\circ} + 2 L_{\bullet\bullet\bullet}^{\circ} - 2 L_{\bullet\bullet\bullet}^{-} - 2 L_{\bullet\bullet\bullet}^{+}\right) U + \\ +\frac{\rho}{12\Delta t^{2}} \left(6 L_{\bullet\circ\circ}^{\bullet} + L_{-\circ\circ}^{\bullet} + L_{+\circ\circ}^{\bullet} + L_{\bullet-\circ}^{\bullet} + L_{\bullet+\circ}^{\bullet} + L_{\bullet\circ-}^{\bullet} + L_{\bullet\circ+}^{\bullet}\right) V - \\ -\frac{\mu}{12h^{2}} \left(6 L_{\bullet\circ\circ}^{\circ} + L_{\bullet\circ\circ}^{-} + L_{\bullet\circ\circ}^{\bullet} + L_{\bullet-\circ}^{\circ} + L_{\bullet+\circ}^{\circ} + L_{\bullet\circ-}^{\circ} + L_{\bullet\circ+}^{\circ}\right) V - \\ -\frac{\lambda+2\mu}{12h^{2}} \left(6 L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + L_{\circ\circ\circ}^{-} + L_{\circ\circ\circ}^{+} + L_{-\circ\circ}^{\circ} + L_{\bullet\circ-}^{\circ} + L_{\circ\circ-}^{\circ} + L_{\circ\circ+}^{\circ}\right) V - \\ -\frac{\mu}{12h^{2}} \left(6 L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + L_{\circ\circ\circ}^{-} + L_{\circ\circ\circ}^{+} + L_{\circ\circ\circ}^{\circ} + L_{\circ\circ-}^{\circ} + L_{\circ\circ-}^{\circ} + L_{\circ\circ+}^{\circ}\right) V - \\ -\frac{\lambda+\mu}{12h^{2}} \left(10 L_{\circ\circ\circ}^{\circ} - \bar{L}_{\circ\circ\circ}^{\circ} + 2 L_{\bullet-}^{\circ} + 2 L_{\bullet+}^{\circ} - 2 L_{\circ\circ-}^{-} - 2 L_{\bullet\circ\circ}^{+}\right) W = \\ = F_{J,K,L}^{y,m}, \quad (161)$$

$$-\frac{\lambda+\mu}{96h^{2}} \left(10 L_{\bullet\bullet\bullet}^{\circ} - \bar{L}_{\bullet\bullet\bullet}^{\circ} + 2 L_{\bullet\bullet\bullet}^{\circ} + 2 L_{\bullet\bullet\bullet+}^{\circ} - 2 L_{\bullet\bullet\bullet}^{-} - 2 L_{\bullet\bullet\bullet}^{+} \right) U - -\frac{\lambda+\mu}{96h^{2}} \left(10 L_{\bullet\bullet\bullet}^{\circ} - \bar{L}_{\bullet\bullet\bullet}^{\circ} + 2 L_{\bullet\bullet\bullet}^{\circ} + 2 L_{\bullet\bullet\bullet}^{\circ} - 2 L_{\bullet\bullet\bullet}^{-} - 2 L_{\bullet\bullet\bullet}^{+} \right) V + +\frac{\rho}{12\Delta t^{2}} \left(6 L_{\bullet\bullet\bullet}^{\circ} + L_{-\bullet\bullet}^{\bullet} + L_{+\bullet\circ}^{\bullet} + L_{\bullet-\bullet}^{\bullet} + L_{\bullet+\bullet}^{\bullet} + L_{\bullet\bullet-}^{\bullet} + L_{\bullet\bullet+}^{\bullet} + L_{\bullet\bullet+}^{\bullet} + L_{\bullet\bullet+}^{\bullet} \right) W - -\frac{\mu}{12h^{2}} \left(6 L_{\bullet\bullet\bullet}^{\circ} + L_{\bullet\bullet\bullet}^{-} + L_{\bullet\bullet\bullet}^{\bullet} + L_{\bullet+\bullet}^{\circ} + L_{\bullet+\bullet}^{\circ} + L_{\bullet+\bullet}^{\circ} + L_{\bullet+\bullet}^{\circ} \right) W - -\frac{\mu}{12h^{2}} \left(6 L_{\bullet\bullet\bullet}^{\circ} + L_{\bullet\bullet\bullet}^{-} + L_{\bullet\bullet\bullet}^{\bullet} + L_{\bullet+\bullet}^{\circ} + L_{\bullet+\bullet}^{\circ} + L_{\bullet+\bullet}^{\circ} + L_{\bullet+\bullet}^{\circ} \right) W - -\frac{\lambda+2\mu}{12h^{2}} \left(6 L_{\bullet\bullet\bullet}^{\circ} + L_{\bullet\bullet\bullet}^{-} + L_{\bullet\bullet\bullet}^{\bullet} + L_{\bullet+\bullet}^{\circ} + L_{\bullet+\bullet}^{\circ} + L_{\bullet+\bullet}^{\circ} + L_{\bullet+\bullet}^{\circ} \right) W = = F_{J,K,L}^{2m},$$
 (162)

kde

$$p = 0, + = +1, - = -1.$$

Operátory v rovniciach sú definované nasledovne:

$$L^{p}_{\bullet rs}U = U^{m+p}_{I-1,J+r,K+s} - 2U^{m+p}_{I,J+r,K+s} + U^{m+p}_{I+1,J+r,K+s} ,$$

$$L^{p}_{q\bullet s}U = U^{m+p}_{I+q,J-1,K+s} - 2U^{m+p}_{I+q,J,K+s} + U^{m+p}_{I+q,J+1,K+s} ,$$

$$L^{p}_{qr\bullet}U = U^{m+p}_{I+q,J+r,K-1} - 2U^{m+p}_{I+q,J+r,K} + U^{m+p}_{I+q,J+r,K+1} ,$$

$$L^{\bullet}_{qrs}U = U^{m-1}_{I+q,J+r,K+s} - 2U^{m}_{I+q,J+r,K+s} + U^{m+1}_{I+q,J+r,K+s} ,$$
(163)

$$L^{p}_{\bullet \bullet s}U = -U^{m+p}_{I-1,J-1,K+s} + U^{m+p}_{I-1,J+1,K+s} + U^{m+p}_{I+1,J-1,K+s} - U^{m+p}_{I+1,J+1,K+s} ,$$

$$L^{p}_{\bullet r \bullet}U = -U^{m+p}_{I-1,J+r,K-1} + U^{m+p}_{I-1,J+r,K+1} + U^{m+p}_{I+1,J+r,K-1} - U^{m+p}_{I+1,J+r,K+1} ,$$

$$L^{p}_{q \bullet \bullet}U = -U^{m+p}_{I+q,J-1,K-1} + U^{m+p}_{I+q,J+1,K-1} + U^{m+p}_{I+q,J-1,K+1} - U^{m+p}_{I+q,J+1,K+1} ,$$
(164)

$$\bar{L}^{p}_{\bullet \bullet s}U = -U^{m+p}_{I-2,J-2,K+s} + U^{m+p}_{I-2,J+2,K+s} + U^{m+p}_{I+2,J-2,K+s} - U^{m+p}_{I+2,J+2,K+s} ,$$

$$\bar{L}^{p}_{\bullet r \bullet}U = -U^{m+p}_{I-2,J+r,K-2} + U^{m+p}_{I-2,J+r,K+2} + U^{m+p}_{I+2,J+r,K-2} - U^{m+p}_{I+2,J+r,K+2} ,$$

$$\bar{L}^{p}_{q \bullet \bullet}U = -U^{m+p}_{I+q,J-2,K-2} + U^{m+p}_{I+q,J+2,K-2} + U^{m+p}_{I+q,J-2,K+2} - U^{m+p}_{I+q,J+2,K+2} .$$
(165)

3.2.3 Sieťová disperzia optimálne presnej schémy

Rovnako, ako sme v kapitole 3.2.1 vyšetrovali sieťovú disperziu pre konvenčnú schému, budeme vyšetrovať aj odvodenú optimálne presnú schému. Odvodili sme analogickú rovnicu k rovnici (146) a na základe nej vykreslili grafy chyby fázovej rýchlosti, ktoré sú na obr. 17-19. Porovnaním s obr. 8-10 zistíme, že chyba fázovej rýchlosti je podstatne menšia vo všetkých prípadoch. V smere diagonály $\beta_{1,2}^{grid}$ a telesovej diagonály $\beta_{1,2}^{grid}$ sú však rovnako ako pri Dconv2 chyby väčšie a preto aj disperzia DOA2 má podobný charakter ako disperzia Dconv2. Dôležité je, že pokles chyby je pre Doptm2 podstatne rýchlejší so zväčšujúcim sa N – to znamená rýchlejšiu konvergenciu.



Obr. 17. Relatívna chyba fázovej rýchlosti 3D schémy DOA2 v smere osi ako funkcia N (počtu sieťových krokov na minimálnu vlnovú dĺžku) a p (pomeru stability).



Obr. 18. Relatívna chyba fázovej rýchlosti 3D schémy DOA2 v smere diagonály ako funkcia N (počtu sieťových krokov na minimálnu vlnovú dĺžku) a p (pomeru stability).



Obr. 19. Relatívna chyba fázovej rýchlosti 3D schémy DOA2 v smere telesovej diagonály ako funkcia N (počtu sieťových krokov na minimálnu vlnovú dĺžku) a p (pomeru stability).

3.2.4 Prediktor-korektor schéma

Operátory na obrázkoch 15 a 16 využívajú aj posunutia v časovej hladine m+1 (čas $t+\Delta t$), ktoré v čase výpočtu m-tej hladiny nie sú známe. Preto je schéma implicitná. Riešenie implicitnej schémy zostavením sústavy rovníc, ktorá by mala $3 \times NX \times NY \times NZ$ (často stovky miliónov) rovníc, je neefektívne a často aj prakticky nerealizovateľné. Preto zrejme jedinou možnosťou, ako schému implementovať, je riešenie pomocou prediktor-korektor algoritmu, ktorý je zovšeobecnením 1D prípadu (pozri kapitolu 1.3.9). Na výpočet korekcie budeme potrebovať rozdiely konvenčných a optimálne presných operátorov:

$$\delta \mathbf{G}_i = \tilde{\mathbf{G}}_i - \mathbf{G}_i \tag{166}$$

$$\delta \mathbf{H}_{ij} = \tilde{\mathbf{H}}_{ij} - \mathbf{H}_{ij} \,. \tag{167}$$

Celý algoritmus môžeme zapísať analogicky ako v 1D prípade:

- 1. vo všetkých priestorových pozíciách vypočítame konvenčné riešenie $u_{I,J,K}^{m+1}$, $v_{I,J,K}^{m+1}$, $w_{I,J,K}^{m+1}$ z rovníc (39), ktoré sú explicitné.
- 2. vo všetkých priestorových pozíciách vypočítame korekciu posunutí z rovníc:

$$\delta u_{I,J,K}^{m+1} =$$
(168)

$$-\frac{\Delta t^2}{\rho} \left(\delta \mathbf{G}_x * \mathbf{u}_{I,J,K}^m + \delta \mathbf{H}_{xy} * \mathbf{v}_{I,J,K}^m + \delta \mathbf{H}_{xz} * \mathbf{w}_{I,J,K}^m \right),$$
(169)

$$-\frac{\Delta t^2}{\rho} \left(\delta \mathbf{H}_{xy} * \mathbf{u}_{I,J,K}^m + \delta \mathbf{G}_y * \mathbf{v}_{I,J,K}^m + \delta \mathbf{H}_{yz} * \mathbf{w}_{I,J,K}^m \right),$$
(170)

$$-\frac{\Delta t^2}{\rho} \left(\delta \mathbf{H}_{xz} * \mathbf{u}_{I,J,K}^m + \delta \mathbf{H}_{yz} * \mathbf{v}_{I,J,K}^m + \delta \mathbf{G}_z * \mathbf{w}_{I,J,K}^m \right),$$
(170)

ktoré sú analógiou rovnice (111).

vypočítame korigované hodnoty hodnoty posunutia, ktoré priamo priradíme do polí u^{m+1}_{I,J,K}, v^{m+1}_{I,J,K}, w^{m+1}_{I,J,K}.

$$u_{I,J,K}^{m+1} := u_{I,J,K}^{m+1} + \delta u_{I,J,K}^{m+1},$$
$$v_{I,J,K}^{m+1} := v_{I,J,K}^{m+1} + \delta v_{I,J,K}^{m+1},$$
$$w_{I,J,K}^{m+1} := w_{I,J,K}^{m+1} + \delta w_{I,J,K}^{m+1}.$$

4. m := m + 1, pokračujeme ďalším časovým krokom (1. krok).

V jednej časovej hladine sa teda najskôr počíta konvenčné riešenie, následne pomocou neho určíme korekciu a vykonáme ju. Prediktor-korektor schému, ktorej prediktorom je Dconv2, budeme nazývať Doptm2.

Značné chyby fázovej rýchlosti pri šírení v smere diagonály a telesovej diagonály schémy Dconv2 by mohli znamenať značné chyby aj v riešení získanom pomocou Doptm2, ak korekcia do prvého rádu nie je dostatočná. Môže nás zaujímať, ako sa zmení presnosť ak zvolíme presnejší prediktor. Testovali sme Dconv4, v ktorej sú priestorové aproximácie aproximované s presnosťou do 4. rádu - rovnice (40) a (41). Túto prediktor-korektor schému budeme označovať Doptm4. Jej algoritmus je formálne identický s algoritmom Doptm2, prediktor je však Dconv4 a aj rozdielové operátory optimálne presnej a konvenčnej schémy δG_i a δH_{ij} budú iné.

3.2.5 Výpočtové programy Dconv2, Dconv4, Doptm2, Doptm4

Zostavili sme výpočtové programy Dconv2, Dconv4, Doptm2 a Doptm4 v programovacom jazyku Fortran 90/95. Sú určené na výpočet seizmického pohybu v homogénnom dokonale elastickom neobmedzenom prostredí metódou konečných diferencií. Implementované sú v nich konečno-diferenčné schémy, ktoré používajú konvenčnú sieť (obr. 2):

- Dconv2 schéma druhého rádu v čase aj priestore (rovnice 39),
- Dconv4 schéma druhého rádu v čase a štvrtého rádu v priestore (rovnice 39 s aproximáciami 40 a 41),
- Doptm2 prediktor-korektor schéma, prediktorom je Dconv2, korektor je zostavený na základe optimálne presnej schémy (rovnica 159),
- Doptm4 prediktor-korektor schéma, prediktorom je Dconv4, korektor je zostavený na základe optimálne presnej schémy (rovnica 159).

Súradnicový systém: pravotočivý súradnicový systém s osami rovnobežnými so sieťovými rovinami, *z*-ová os smeruje nadol, *x*-ová os smeruje na sever. Tieto konvencie sú dôležité kvôli orientácii bodového DC (double couple) zdroja.

Výpočtová oblasť: výpočtovú oblasť tvorí kváder ohraničený neodrážajúcimi hra-

nicami. Užívateľ zadá NX, NY a NZ. Potom model obsahuje

$$(NX - 1) \times (NY - 1) \times (NZ - 1)$$

konečno-diferenčných buniek a má rozmery

$$(NX - 1)h \times (NY - 1)h \times (NZ - 1)h,$$

kde h je sieťový krok.

Hranice výpočtovej oblasti: neodrážajúce hranice; k dispozícii je 9 typov, je možné zvoliť aj pevnú hranicu.

Implementácia seizmických zdrojov: programy umožňujú dva typy excitácie vlnového poľa:

- bodový DC zdroj
- bodový explozívny zdroj

Bodové zdroje je možné vzájomne kombinovať a ich počet je ľubovoľný. Časová závislosť sa udáva ako normovaná závislosť sklzu od času voľbou typu signálu.

Výstupy programu: Ako prijímače (body, v ktorých chceme zaznamenávať časovú závislosť posunutia) je možné špecifikovať ľubovoľné body siete. Programy ukladajú hodnoty seizmogramov do osobitných súborov pre každú zložku a prijímač. Programy môžu ukladať aj hodnoty posunutí v celých zvolených xy-rovinách. Tieto je možné potom využiť na tvorbu animácií.

Nároky na operačnú pamäť:

Dconv2, Dconv4:

 $NX \times NY \times NZ \times 9 \times 4$ byty = 36 $NX \times NY \times NZ$ bytov

Doptm2, Doptm4:

 $NX \times NY \times NZ \times 12 \times 4$ byty = 48 $NX \times NY \times NZ$ bytov

Zvýšené výpočtové nároky prediktor-korektor sú z dôvodu uchovávania korekcie posunutí v pamäti.

3.2.6 Numerické testovanie konečno-diferenčných schém

Presnosť konečno-diferenčných schém pri modelovaní šírenia vlnenia v homogénnom prostredí budeme analyzovať na základe porovnávania numerického a analytického riešenia.

Analytické riešenie pre bodový zdroj (program PDS)

Ak na ploche A v prostredí so šmykovým modulom μ došlo k priemernej diskontinuite v posunutí $\bar{u}(t)$, charakterizujeme tento zdroj vlnenia skalárnym seizmickým momentom $M_0(t) = \mu \bar{u}(t)A$. Uvažujme súradnicovú sústavu na obr. 20. Posunutie v mieste s polohovým vektorom \vec{r} vzhľadom na plochu A môžeme vyjadriť nasledovne (Aki a Richards, 2002) vzťahom

$$\vec{u}(\vec{r},t) = \frac{1}{4\pi\rho r^4} \vec{A}^N \int_{r/\alpha}^{r/\beta} \tau M_0(t-\tau) dt + (171) + \frac{1}{4\pi\rho\alpha^2 r^2} \vec{A}^{I\alpha} M_0 \left(t - \frac{r}{\alpha}\right) + \frac{1}{4\pi\rho\beta^2 r^2} \vec{A}^{I\beta} M_0 \left(t - \frac{r}{\beta}\right) + + \frac{1}{4\pi\rho\alpha^3 r} \vec{A}^{F\alpha} \dot{M}_0 \left(t - \frac{r}{\alpha}\right) + \frac{1}{4\pi\rho\beta^3 r} \vec{A}^{F\beta} \dot{M}_0 \left(t - \frac{r}{\beta}\right),$$

kde zložky vektorových amplitúd sú uvedené v tab. 1. Tieto vzťahy boli implementované do výpočtového programu PDS vyvinutom v Oddelení fyziky Zeme KAFZM FMFI Univerzity Komenského v Bratislave.



Obr. 20. Konfigurácia bodového zdroja (Aki a Richards, 2002).

		α		β			
	$\hat{ec{r}}$	$\hat{\vec{ heta}}$	$\hat{\vec{\phi}}$	$\hat{ec{r}}$	$\hat{ec{ heta}}$	$\hat{\vec{\phi}}$	
\vec{A}^N	$+9\sin 2\theta\cos\phi$	$-6\cos 2\theta\cos\phi$	$+6\cos\theta\sin\phi$	$+9\sin 2\theta\cos\phi$	$-6\cos 2\theta\cos\phi$	$+6\cos\theta\sin\phi$	
\vec{A}^{I}	$+4\sin 2\theta\cos\phi$	$-2\cos 2\theta\cos\phi$	$+2\cos\theta\sin\phi$	$-3\sin 2\theta\cos\phi$	$+3\cos 2\theta\cos\phi$	$-3\cos\theta\sin\phi$	
\vec{A}^F	$+1\sin 2\theta \cos \phi$				$+1\cos 2 heta\cos\phi$	$-1\cos\theta\sin\phi$	

Tab. 1. Vektorové amplitúdy analytického riešenia

Pri analýze budeme skúmať presnosť modelovania šírenia vlnenia v dvoch základných smeroch, ktoré označíme F_S a F_P :

$$F_S: \phi = 0, \quad \theta = \pi/2,$$
 (172)

$$F_P: \quad \phi = 0, \quad \theta = \pi/4.$$
 (173)

Smery šírenia a kmitania sú zobrazené v tab. 2.

Smer F_S : $\phi = 0$, $\theta = \pi/2$

		α			β	
	$\hat{\vec{r}}$	$\hat{\vec{ heta}}$	$\hat{\vec{\phi}}$	$\hat{\vec{r}}$	$\hat{\vec{ heta}}$	$\hat{\vec{\phi}}$
N		6			+6	
Ι		2			-3	
F					-1	

Smer F_P : $\phi = 0$, $\theta = \pi/4$

		α			β	
	$\hat{\vec{r}}$	$\hat{\vec{\theta}}$	$\hat{\vec{\phi}}$	$\hat{\vec{r}}$	$\hat{\vec{\theta}}$	$\hat{\vec{\phi}}$
N	9			+9		
Ι	4			-3		
F	1					





Tab. 2. Vektorové amplitúdy pre smery F_S a F_P .

Pri numerických testoch budeme používať signál charakterizujúci časový priebeh sklzu na zlomovej ploche, ktorý má tvar

$$\bar{u}(t) = e^{-2\pi f_p \left(\frac{t-t_s}{\gamma}\right)^2} \cos(2\pi f_p (t-t_s) + \theta),$$
(174)

kde $f_p = 1$ je prevládajúca frekvencia, parameter $\gamma = 5$ určuje tlmenie signálu, $t_s = 2.5$ časový posun a $\theta = \pi/2$ fázový posun (obr. 21). V simuláciách sme volili skalárny seizmický moment $M_0 = 10^{13}$ Nm.

Modelom, v ktorom sa vlnenie bude šíriť, je homogénny priestor s hustotou $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ a rýchlosťou šírenia S vĺn $\beta = 175 \text{ m/s}$. Rýchlosť šírenia P vĺn budeme voliť $\alpha = 350 \text{ m/s}$ ($r = \alpha/\beta = 2$, Poissonov pomer $\sigma = 1/3$), $\alpha = 875 \text{ m/s}$ ($r = 5, \sigma = 0.479$) a $\alpha = 1758.75 \text{ m/s}$ ($r = 10.05, \sigma = 0.495$). Jednotlivé prípady budeme skrátene označovať R2, R5 a R10. Hodnota pomeru rýchlostí šírenia je reprezentatívnou hodnotou pre mnohé situácie. V prípade lokálnych sedimentárnych



Obr. 21. Časová závislosť sklzu a jej amplitúdové spektrum.

štruktúr nie zriedkavosťou pomer r = 5, ktorý reprezentuje rýchlosť P vĺn vo vodou nasýtených sedimentoch a zodpovedajúcu rýchlosť S vĺn. Ani r = 10 nie je hraničnou hodnotou – pomer r v sedimentoch pod hlavným mestom Mexika dosahuje hodnotu $r \approx 20$.

Seizmogram vo vzdialenosti $d = 6\lambda_{dom}^S$ pre krajné prípady R2 a R10 je na obr. 22. Vo vzťahu (172) sú členy rozdelené do troch skupín podľa rýchlosti poklesu ich amplitúd na blízke členy (N α , N β - near) úmerné r^{-3} , stredné členy (I α , I β intermediate) úmerné r^{-2} a ďaleké členy (F α , F β - far) úmerné r^{-1} . Blízke, stredné a vzdialené členy sú na obr. 22 farebne odlíšené. Ako prvá prichádza vždy vlnová skupina šíriaca sa rýchlosťou α , následne vlnová skupina šíriaca sa rýchlosťou β – vo vzdialenosti $d = 6\lambda_{dom}^S$ sú dobre odlíšiteľné. Vzdialená P vlna má v prípade R10 veľmi malé amplitúdy, ktoré nie sú viditeľné.

Vzdialenosť $d = 6\lambda_{dom}^S$ je stále relatívne blízko zdroja, stredné členy majú ešte amplitúdy porovnateľné s amplitúdami ďalekých členov. Kedy sa amplitúdy vzdialených členov stanú dominantné, závisí od hodnoty α a β . Na obr. 23 môžeme vidieť, že sklon všetkých kriviek charakterizujúcich útlm amplitúd je pre danú časť riešenia rovnaký na všetkých obrázkoch. Posun kriviek spôsobujú len hodnoty rýchlostí, pretože amplitúdy riešenia sú úmerné $1/\alpha^2$ a $1/\beta^2$ pre stredné a $1/\alpha^3$ a $1/\beta^2$ pre ďaleké členy. V prípade F_P R10 sú amplitúdy P vín veľmi malé, preto ani vo vzdialenosti $100\lambda_{dom}^S = 10\lambda_{dom}^P$ nie je vzdialený člen dominantný.

Ako sme už uviedli, bodový zdroj je singularita, ktorú nemôžeme v metóde konečných diferencií simulovať presne. Blízke a stredné členy sú pravdepodobne



Smer F_S : vertikálna zložka ($\vec{\theta}$): N α , N β , I α , I β , F β

Obr. 22. Priebeh posunutia generovaného bodovým DC zdrojom vo vzdialenosti $d = 6\lambda_{dom}^S$.

najviac ovplyvňované touto nepresnosťou, a preto je potrebné vedieť, či sú dominantnou časťou riešenia alebo nie.

Konfigurácia numerických testov

Výpočtovou oblasťou programov Dconv2, Dconv4, Doptm2 a Doptm4 je kváder tvorený $(NX - 1) \times (NY - 1) \times (NZ - 1)$ konečno-diferenčnými bunkami s hranou *h*. Jeden zo sieťových bodov sme zvolili ako polohu bodového DC zdroja. Časový priebeh posunutia je možné zaznamenávať v ľubovoľnom sieťovom bode. Hlavným cieľom modelovania je vyšetrovanie sieťovej disperzie. Aby sme získali seizmogramy pri šírení vlnenia v smere sieťovej osi a v smere diagonály, umiestnili sme prijímače rovnomerne v radiálnom smere od seizmického zdroja v týchto dvoch smeroch do vzdialenosti 6 dominantných vlnových dĺžok – výpočty pre väčšie



Obr. 23. Amplitúda členov presného riešenia pre bodový DC zdroj v závislosti od vzdialenosti.

vzdialenosti vyžadovali výkonnejšie počítače. Súčasne sme zvolili orientáciu zdroja tak, aby smer osi a diagonálny smer v sieti boli súčasne aj smermi F_S a F_P (pre orientáciu S1 bola os x smerom F_S , pre S2 smerom F_P).

Dvojrozmerný rez modelom s vyznačením prijímačov (trojuholníky) je na obr. 24. V programoch sú implementované neodrážajúce hranice, ktoré však nie sú dokonalé. Preto sme veľkosť modelu v prípadoch R2 volili takú, aby odrazy od hraníc prichádzali až po skončení užitočného signálu a nemohli spôsobiť chybu riešenia. Fyzické rozmery modelu určujú počty konečno-diferenčných buniek v jednotlivých smeroch, ak predpíšeme priestorový krok h. Ten sa určuje tak, aby najmenšia vlnová dĺžka, ktorá sa sieťou bude šíriť, bola dostatočne vzorkovaná. Pri modelovaní lokálnych efektov sa pre schémy druhého rádu sa často používa kritérium $\lambda_{min} = 12h$, pre schémy 4. rádu $\lambda_{min} = 6h$. V našich experimentoch budeme voliť hodnoty vzorkovania $\lambda_{min} = (6, 8, 10, 12, 14)h$, aby bolo možné skúmať aj rýchlosť konvergencie k analytickému riešeniu. Uvádzame príklad jednoduchého určenia veľkosti výpočtového modelu pre prípad R2 a vzorkovanie $\lambda_{min} = 12h$:



Obr. 24. Výpočtový model. a) odraz od spodnej hranice, b) odraz od hranice za radom prijímačov.

$$\alpha = 350$$
 m/s, $\beta = 175$ m/s, $f_p = 1$ Hz, $f_{max} = 1.75$ Hz

$$\begin{split} \lambda_{\min} &= \beta/f_{\max} = 100 \text{ m} \\ \lambda_{\text{dom}}^S &= \beta/f_{\text{dom}} = 175 \text{ m}, \, \lambda_{\text{dom}}^P = \alpha/f_{\text{dom}} = 350 \text{ m} \\ h &= \lambda_{\min}/12 = 8 \text{ 1/3 m}, \, 12h = \lambda_{\min}, \, 21h = \lambda_{\text{dom}}^S \end{split}$$

Podmienka pre odrazy: čas konca signálu na poslednom prijímači $t_f = d/\beta + 2t_S$ musí byť menší ako čas príchodu odrazu od vzdialenejšej a bližšej steny k zdroju:

a)
$$\frac{2b}{\alpha} > t_f + 2t_S = d/\beta + 2t_S$$

b) $\frac{d+2a}{\alpha} > t_f + 2t_S = d/\beta + 2t_S$
 $d = 6\lambda_{dom}^S = 1050 \text{ m} = 126 h$
 $b > \frac{1}{2}350(6+5) \text{ m} = 1925 \text{ m} = 231 h$
 $a > \frac{1}{2}350(6+5) - \frac{1}{2}1050 \text{ m} = 1400 \text{ m} = 168 h$
 $2 \times 231 = 462$, $231 + 126 + 168 = 525$

N	rozmery	potrebná pamäť (Dconv2)	potrebná pamäť (Dconv2)
6	263, 231, 263	$263\times231\times263\times36=548~\mathrm{MB}$	$263\times231\times263\times48=731~\mathrm{MB}$
8	350, 308, 350	$350\times 308\times 350\times 36=1295~\mathrm{MB}$	$350\times 308\times 350\times 48 = 1727\mathrm{MB}$
10	438, 385, 438	$438\times 385\times 438\times 36=2536~\mathrm{MB}$	$438\times 385\times 438\times 48=3381\mathrm{MB}$
12	525, 462, 525	$525 \times 462 \times 525 \times 36 = 4372 \text{ MB}$	$525 \times 462 \times 525 \times 48 = 5829 \text{ MB}$
14	613, 539, 613	$613 \times 539 \times 613 \times 36 = 6953 \text{ MB}$	$613\times539\times613\times48=9271~\mathrm{MB}$

Tab. 3. Rozmery modelov pre vzorkovanie $N = \lambda_{min}/h = (6, 8, 10, 12, 14)$.

V tab. 3 sú uvedené počty konečno-diferenčných buniek v jednotlivých smeroch a súčasne aj pamäťové nároky programov Dconv2 a Dconv4, Doptm2 a Doptm4 v závislosti od zvoleného vzorkovania $N = \lambda_{min}/h = (6, 8, 10, 12, 14)$. Pre program VSstag4 bola použitá rovnaká výpočtová oblasť, pamäťové nároky sú rovnaké ako pre Dconv2.

Prijímače boli umiestnené v každom siedmom sieťovom bode v smere osi x a v každom piatom v diagonálnom smere preto, aby sa v oboch smeroch vlnenie šírilo do približne rovnakej vzdialenosti ($5\sqrt{2} \approx 7$).

Výpočty, ktoré boli vykonané v rámci testovania výpočtových metód, sú sumarizované v tab. 4. Porovnaním nárokov na operačnú pamäť zistíme, že Doptm2 je asi 10-krát náročnejšia na výpočtový čas ako Dconv2 a 2-krát náročnejšia ako Dconv4. VSstag4 má približne dvakrát väčšie výpočtové nároky pri N = 6, rast nárokov na výpočtový čas je väčší ako pre Dconv2, Dconv4, Doptm2 – pri N = 10 je VSstag4 2-krát náročnejšia ako Doptm2.

S Dconv2 sme počítali so vzorkovaním N = 10, 12, 14; hodnota N = 12 sa považuje za minimálnu na získanie dostatočne presných výsledkov pri modelovaní lokálnych efektov. S Doptm2 sme pre R2 počítali pre všetky hodnoty vzorkovania, pre R5 a R10 sme počítali až od hodnoty N = 10, pretože sme predpokladali, že pre nižšie hodnoty nebude riešenie dostatočne presné. S VSstag4 sme počítali pre hodnoty N = 6, 8, 10 pre všetky hodnoty pomeru rýchlostí, pretože hodnota N = 6 sa pri modelovaní lokálnych efektov považuje za dostatočnú. S Dconv4 a Doptm4 sme počítali pre hodnoty N = 6, 8, 10, pretože obsahujú aproximácie 4. rádu podobne ako VSstag4. Mali byť preto presnejšie už pri nižších hodnotách vzorkovania.

		R	22 (S1+S2	5)			R	5 (S1+S2	(;			R	10 (S1+S	2)	
N	9	8	10	12	14	9	8	10	12	14	9	8	10	12	14
Dconv2			0.39	0.96	1.61			0.85	1.64				1.76	4.02	7.05
Doptm2	0.81	1.71	3.54	9.30	14.40			8.28	21.04				16.55	42.57	64.87
VSstag4	1.99	6.30	13.45			4.48	14.17	34.58			9.21	28.33	67.23		
Dconv4	0.39	0.78	1.89			0.73	2.33	5.52			1.64	4.73	12.90		
Doptm4						3.78	7.12	19.84			8.14	16.92	39.40		
FE_L				8.17					19.70					39.7	
FE_G				2.40					6.06					11.9	

Porovnanie pamäťových nárokov (GB)

		R2, R	5, R10 (S	l+S2)	
N	6	8	10	12	14
buniek (mil.)	16.0	37.7	73.9	127.3	202.5
Dconv2			2.5	4.3	6.8
Doptm2	0.8	1.8	3.5	0'9	<i>L</i> .6
VSstag4	0.5	1.2	2.5		
Dconv4	0.5	1.2	2.5		
Doptm4	0.8	1.8	3.5		
FE_L				15.0	
FE_G				15.0	

Tab. 4. Tabuľka výpočtov a výpočtových časov, tabuľka pamäťových nárokov.



Obr. 25. Grafické znázornenie výpočtových časov a pamäťových nárokov.

Okrem výsledkov získaných metódou konečných diferencií sme vyhodnotili aj výsledky získané metódou konečných elementov. Výpočty vykonal a poskytol M. Gális. Aplikovaná bola Gaussova a Lobattova kvadratúra (FE_G, FE_L; Gális, 2007). Bolo použité len vzorkovanie N = 12, ktoré nám poskytlo indikáciu, aká je chyba v prípade vysokého pomeru rýchlostí v štandardnej formulácii konečných elementov. Teoretická analýza i numerické výsledky potvrdili, že FE_L je schéma temer identická s Dconv2. Preto výsledky pre FE_L nebudeme komentovať osobitne, uvedieme len charakteristiku pre Dconv2.

Získané seizmogramy sme kvantitatívne porovnávali pomocou časovo-frekvenčných misfitov (Kristeková et al., 2006).

Analýza a zhodnotenie numerických testov

Misfity EM a PM pre R2 a R5 sú na obr. 26-43. Misfity pre R10 sú na obr. 55-64 v prílohe.

Môžeme konštatovať, že s rastúcim N sa EM aj PM u všetkých metód zmenšuje a to v smere diagonály aj osi. Preto ďalej budeme pre jednotlivé hodnoty r charakterizovať priebeh misfitov so vzdialenosťou.¹

metóda	0	٠	EM	PM
Dconv2	F_S	0	rastie	rastie
		d	rastie	rastie
	F_P	0	rastie, potom klesá	rastie minimálne
		d	v $d=2.5$ sa ustáli	rastie
FE_G	F_S	0	mierne rastie	mierne rastie
		d	mierne rastie	mierne rastie
	F_P	0	mierne rastie	rastie minimálne
		d	v $d=2$ sa ustáli	rastie minimálne
Dconv4	F_S	0	nerastie	nerastie
		d	rastie	rastie
	F_P	0	rastie, potom klesá	rastie minimálne
		d	klesá, potom rastie	rastie
Doptm2	F_S	0	nerastie	nerastie
		d	rastie	rastie
	F_P	0	rastie, potom klesá	klesá, potom rastie minimálne
		d	mierne rastie	mierne rastie
VSstag4	F_S	0	nerastie	nerastie
		d	nerastie	nerastie
	$\overline{F_P}$	0	rastie, potom klesá	klesá, potom rastie minimálne
		d	nerastie	nerastie

R2 - pomer	rýchlostí	šírenia	Рa	S v	ĺn r	= 2
------------	-----------	---------	----	-----	------	-----

¹V tabuľkách v stĺpci označenom \circ je vyznačený typ vyžarovania, v stĺpci \bullet je smer šírenia (o = os, d = diagonála). Vzdialenosť budeme skrátene udávať v jednotkách λ_{dom}^S

Dconv2 dáva najhoršie výsledky, FE_G je $2-3 \times$ lepšia. Dconv4 je mierne lepšia ako FE_G. Doptm2 je systematicky lepšia ako Dconv4, všetky hodnoty EM a PM sú do 0.1. VSstag4 je spoločne s Doptm2 najlepšia, všetky hodnoty EM a PM sú do 0.1.

metóda	0	•	EM	$_{\rm PM}$
Dconv2	F_S	0	v $d = 2.5$ sa ustáli	klesá, od $d = 2.5$ rastie
		d	rastie	rastie, od $d = 5$ klesá
	F_P	0	v $d = 2.5$ sa ustáli	rastie, od $d = 1.5$ klesá
		d	rastie	rastie
FE_G	F_S	0	mierne rastie	rastie
		d	rastie	rastie
	F_P	0	v $d=2$ sa ustáli	mierne rastie
		d	v $d = 4$ sa ustáli	rastie
Dconv4	F_S	0	v $d=2.5~{\rm sa}$ ustáli	nerastie
		d	rastie	rastie
	F_P	0	rastie, od $d = 2.5$ mierne klesá	klesá, ustáli sa v $d=2.5$
		d	rastie	rastie
Doptm2	F_S	0	nerastie	nerastie
		d	rastie	rastie
	F_P	0	v $d = 2.5$ sa ustáli	klesá, ustáli sa
		d	rastie	mierne rastie
Doptm4	F_S	0	v $d = 2.5$ sa ustáli	nerastie
		d	rastie	rastie
	F_P	0	v $d = 2.5$ sa ustáli	klesá, ustáli sa
		d	rastie	mierne rastie
VSstag4	F_S	0	nerastie	nerastie
		d	nerastie	nerastie
	F_P	0	ustáli sa v $d = 2$	mierne klesá
		d	nerastie	nerastie

R5 - pomer rýchlostí šírenia P a S vĺnr=5

S výnimkou VSstag4 sú chyby všetkých iných riešení dramaticky väčšie ako v prípade R2. Dconv2 dáva najhoršie výsledky zo všetkých metód. FE_G má podobný charakter ako Dconv2, ale EM a PM majú $2 - 5 \times$ menšie hodnoty. Dconv4 je mierne lepšia ako FE_G. Doptm2 je systematicky lepšia ako Dconv4. Doptm4 je systematicky lepšia ako Doptm2. EM a PM pre VSstag4 temer nerastú, všetky hodnoty sú do 0.1.



Obr. 26. R2, F_S , N = 6, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 27. R5, F_S , N = 6, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 28. R2, F_P , N = 6, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 29. R5, F_P , N = 6, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 30. R2, F_S , N = 8, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 31. R5, F_S , N = 8, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 32. R2, F_P , N = 8, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.


Obr. 33. R5, F_P , N = 8, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 34. R2, F_S , N = 10, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 35. R5, F_S , N = 10, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 36. R2, F_P , N = 10, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 37. R5, F_P , N = 10, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 38. R2, F_S , N = 12, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 39. R5, F_S , N = 12, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 40. R2, F_P , N = 12, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 41. R5, F_P , N = 12, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 42. R2, F_S , N = 14, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.

metóda	0	•	EM	PM
Dconv2	F_S	0	v $d = 2.5$ sa ustáli	klesá, od $d = 2.5$ rastie
		d	rastie	rastie, od $d = 3$ klesá
	F_P	0	v $d = 2.5$ sa ustáli	rastie, od $d = 1.5$ klesá
		d	rastie	rastie, od $d = 4$ klesá
FE_G	F_S	0	v $d=3~{\rm sa}$ ustáli	mierne rastie
		d	rastie	rastie, od $d = 5$ klesá
	F_P	0	v $d=2.5$ sa ustáli	rastie, $d = 1.5$ klesá
		d	rastie	rastie
Dconv4	F_S	0	v $d=2.5~{\rm sa}$ ustáli	nerastie
		d	rastie	rastie
	F_P	0	rastie, v $d=2.5$ sa ustáli	klesá, ustáli sa v $d=2.5$
		d	rastie	rastie
Doptm2	F_S	0	v $d=2.5~{\rm sa}$ ustáli	nerastie
		d	rastie	rastie
	F_P	0	v $d = 2.5$ sa ustáli	klesá, ustáli sa v $d=2.5$
		d	rastie	rastie
Doptm4	F_S	0	v $d=2.5~{\rm sa}$ ustáli	mierne klesá
		d	rastie	rastie
	F_P	0	v $d=2.5$ sa ustáli	klesá, ustáli sa v $d=2.5$
		d	rastie	rastie
VSstag4	F_S	0	nerastie	nerastie
		d	nerastie	nerastie
	F_P	0	ustáli sa v $d = 2$	mierne klesá, od $d=3$ rastie
		d	nerastie	nerastie

R10 - pomer rýchlostí šírenia P a S vĺn r = 10

Dconv2 dáva najhoršie výsledky zo všetkých metód. FE_G má podobný charakter ako Dconv2, ale EM a PM majú menšie hodnoty. Dconv4 je podstatne lepšia ako FE_G. Doptm2 je systematicky lepšia ako Dconv4. Doptm4 je systematicky lepšia ako Doptm2. VSstag4 je najlepšia, oproti prípadu R2 a R5 pozorujeme len malé zmeny.

Konvergencia riešení

Dôležitou vlastnosťou numerických metód je rýchlosť, s akou sa numerické riešenie blíži presnému riešeniu. Na obr. 44 - 49 je závislosť EM a PM vo vzdialenosti $d = 6\lambda_{dom}$ od vzorkovania.

Môžeme konštatovať, že Doptm2, Doptm4 a Dconv4 majú najrýchlejšiu konvergenciu. Predovšetkým v EM majú krivky väčší sklon ako krivky VSstag4. Krivky pre Doptm2, Doptm4, Dconv4, Dconv2 a FE₋G sú s rastúcim r posúvané nahor. Pri VSstag4 sa krivky závislosti EM od vzorkovania temer nemenia s rastúcim r, krivky PM dokonca mierne klesajú s rastúcim r. Majú ale menší sklon, čo znamená pomalšiu konvergenciu.



Obr. 43. R2, F_P , N = 14, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.

Sumarizácia analýzy numerických výsledkov

Zistili sme, že v prípade nízkeho pomeru rýchlostí P a S vĺn dáva odvodená schéma Doptm2 veľmi dobré výsledky, ktoré sú porovnateľné s VSstag4. V smere diagonály sa so vzdialenosťou prejavuje disperzia a EM aj PM rastie. Tento nedostatok kompenzuje rýchlejšia konvergencia Doptm2 vzhľadom na VSstag4. Zvyšujúci sa pomer rýchlostí P a S vĺn má na chybu riešenia výrazný vplyv. Tak, ako to indikovala analýza, chyba fázovej rýchlosti predovšetkým v diagonálnom smere spôsobuje výraznú chybu riešenia. Tento jav je dobre pozorovateľný pre schému Dconv2. Pre r = 10 je relatívne presná α^{grid} a $\beta_{1,2}^{grid}$ v smere osi, ale veľmi nepresná β_2^{grid} v smere diagonály pri relatívne presných α^{grid} a β_1^{grid} . Na seizmogramoch (obr. 54) môžeme vidieť separáciu vlnových skupín šíriacich sa rýchlosťou α^{grid} , β_1^{grid} a β_2^{grid} v zhode s teoretickou analýzou.

Charakter chyby môžeme dobre pozorovať na obrazoch vlnového poľa na obr. 50-53. Pre porovnanie je zobrazený prípad R2 a R10. Aj v prípade R2 môžeme pozorovať malé rozdiely v smere diagonály pre Dconv2. V prípade R10 dochádza k jasnému deformovaniu vlnoplôch v dôsledku vyššej rýchlosti šírenia v smere diagonály, ako to indikuje smerová závislosť rýchlosti β_2^{grid} (obr. 11).

So zvýšenou rýchlosťou šírenia v diagonálnom smere sú spojené aj zvýšené amplitúdy, ktoré zrejme spôsobujú pokles amplitúd v smere osi (obr. 54). Tento pokles je intenzívny pri väčšom zakrivení vlnoplôch v blízkosti zdroja, postupne ako šírenie prechádza do smeru osi sa pokles zastavuje a vlnenie sa ďalej v smere osi šíri správne. Ďalším možným vysvetlením zastavenia rastu EM v smere osi môže byť aj postupný pokles zastúpenia blízkych a stredných členov v riešení (obr. 23).

Analýza ukázala, že schéma VSstag4 má najlepšie vlastnosti pri vysokom pomere rýchlostí P a S vĺn. Presnosť riešení je temer identická pre prípady R2, R5 aj R10. Rýchlosť konvergencia VSstag4 je nižšia ako v prípade Doptm4, Doptm2 aj Dconv4.



Obr. 44. R2, smer F_P : EM a PM v závislosti od vzorkovania.



Obr. 45. R2, smer F_S : EM a PM v závislosti od vzorkovania.



Obr. 46. R5, smer F_P : EM a PM v závislosti od vzorkovania.



Obr. 47. R5, smer F_S : EM a PM v závislosti od vzorkovania.



Obr. 48. R10, smer F_P : EM a PM v závislosti od vzorkovania.



Obr. 49. R10, smer F_S : EM a PM v závislosti od vzorkovania.



R2 radiálna zložka $t=5.99~{\rm s}$

Obr. 50. R2 - Obraz vlnového poľa, radiálna zložka.

3D problém

R10 radiálna zložka $t=6.02~{\rm s}$

Dconv

Doptm





VSstag4

PDS





Obr. 51. R10 - Obraz vlnového poľa, radiálna zložka.

R2 transverzálna zložka $t=5.99~{\rm s}$



Dconv2



Doptm2

VSstag4

PDS





Obr. 52. R2 - Obraz vlnového poľa, transverzálna zložka.

3D problém

R10 transverzálna zložka $t=6.02~{\rm s}$

Dconv2

Doptm2



VSstag4



PDS





Obr. 53. R10 - Obraz vlnového poľa, transverzálna zložka.



Obr. 54. R10 - seizmogramy vo vzdialenosti $d = 6\lambda_{dom}^S$.

4 Závery

Výsledky dizertačnej práce sú príspevkom k vývoju efektívnych numerických metód na simuláciu seizmického pohybu. Možno ich zhrnúť nasledovne:

- Analyzovali sme konvenčné a striedavo usporiadané konečno-diferenčné schémy používané v súčasnosti pri modelovaní šírenia seizmických vĺn. V 1D prípade sme skúmali sieťovú fázovú rýchlosť šírenia a na základe jej chyby interpretovali hodnoty fázových misfitov a misfitov obálky. V 3D prípade sme analyzovali konvenčnú konečno-diferenčnú schému a zistili existenciu dvoch vo všeobecnosti rôznych sieťových rýchlostí β₁^{grid} a β₂^{grid}. Pri pomere rýchlostí šírenia P a S vĺn r = 10 má v smere diagonály výraznú chybu len β₂^{grid}. V smere telesovej diagonály majú relatívne veľkú chybu β₁^{grid} i β₂^{grid}.
- 2. Analyzovali sme dosiaľ vyvinuté/publikované optimálne presné operátory a optimálne presné schémy. Navrhli sme odvodenie, ktoré je všeobecnejšie ako dosiaľ známe odvodenia. Analyzovali sme prediktor-korektor schému a zistili, že v prípade homogénneho prostredia sa redukuje na Lax-Wendroffovu schému. Prediktor-korektor schéma bude mať pravdepodobne lepšie vlastnosti v heterogénnom prostredí.
- Navrhli sme optimálne presné operátory pre 3D prípad a odvodili implicitnú 3D optimálne presnú schému. Navrhli sme prediktor-korektor algoritmus na explicitné riešenie optimálne presnej schémy.
- Vyvinuli sme výpočtové programy Doptm2 a Doptm4 implementujúce prediktorkorektor algoritmus.
- Vykonali sme rozsiahle parametrické výpočty, ktoré umožnili numerické porovnanie vyvinutej schémy s dosial'známymi schémami.
- Analyzovali sme výsledky numerických výpočtov. Použili sme pritom časovofrekvečné misfity obálky a fázy.

Analýza konvenčnej konečno-diferenčnej schémy 2. rádu v priestore a čase (Dconv2) ukázala, že najväčšiu chybu má sieťová fázová rýchlosť v smere diagonály. V prípade vysokého pomeru rýchlostí šírenia P a S vĺn chyba dosahuje hodnoty až 200% v závislosti od vzorkovania. Odvodená optimálne presná schéma (DOA2)

má chybu výrazne menšiu, avšak pre vysoký pomer rýchlostí šírenia P a S vĺn je chyba pre nízke hodnoty vzorkovania tiež pomerne vysoká. Chyba DOA2 však so vzorkovaním klesá oveľa rýchlejšie, ako je to pre Dconv2.

Numerické výsledky potvrdzujú teoreticky indikované vlastnosti konvenčnej schémy. Teoretická analýza aj numerické výsledky potvrdili, že FE_L (štandardná formulácia metódy konečných elementov s použitím Lobattovej kvadratúry) je schéma temer identická s Dconv2.

Dconv2 mala najhoršie vlastnosti zo všetkých testovaných schém. FE_G (štandardná formulácia metódy konečných elementov s použitím Gaussovej kvadratúry) má lepšie vlastnosti, ako FE_L. Doptm2 a Doptm4 mali najrýchlejšiu konvergenciu. Presnosť VSstag4 sa temer nemení s rastúcim pomerom rýchlostí šírenia P a S vĺn.

Literatúra

- Aki, K. a P. G. Richards, 1980. Quantitative Seismology. Theory and Methods, Vol. I and II. W. H. Freeman & Co., San Francisco.
- Aki, K. a P. G. Richards, 2002. Quantitative Seismology. Second Edition. University Science Books.
- Alekseev, A. S. a B. G. Mikhailenko, 1980. The solution of dynamic problems of elastic wave propagation in inhomogeneous media by a combination of partial separation of variables and finite-difference methods. *J. Geophys.* 48, 161 172.
- Alford, R. M., K. R. Kelly, and D. M. Boore, 1974. Accuracy of finite difference modeling of the acoustics wave equation. *Geophysics* 39, 834-842.
- Alterman, Z. and F. C. Karal, 1968. Propagation of elastic waves in layered media by finite-difference methods. *Bull. Seism. Soc. Am.* 58, 367-398.
- Andrews, D. J., 1973. A numerical study of tectonic stress release by underground explosions. *Bull. Seism. Soc. Am.* 63, 1375 1391.
- Bayliss, A., K. E. Jordan, B. J. LeMesurier a E. Turkel , 1986. A fourth-order accurate finite-difference scheme for the computation of elastic waves. *Bull. Seism. Soc. Am.* 76, 1115-1132.
- Bérenger, J.-P., 1994. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. J. Comp. Phys. 114, 185-200.
- Bielak J., K. Loukakis, Y. Hisada a Ch. Yoshimura, 2003. Domain Reduction Method for Three-Dimensional Earthquake Modeling in Localized Regions, Part I: Theory Bull. Seism. Soc. Am. 93, 817 - 824.
- Blanch, J. O. and J. O. A. Robertsson, 1997. A modified Lax-Wendroff correction for wave propagation in media described by Zener elements. *Geophys. J. Int.* 131, 381-386.

- **Bohlen, T. and E. H. Saenger, 2006**. Accuracy of heterogeneous staggered-grid finite-difference modeling of Rayleigh waves, *Geophysics* 71, T109-T115.
- Boore, D., 1972. Finite-difference methods for seismic wave propagation in heterogeneous materials. In *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.
- Bouchon, M. and O. Coutant, 1994. Calculation of synthetic seismograms in a laterally-varying medium by the boundary element discrete wavenumber method. *Bull. Seism. Soc. Am.* 84, 1869 1881.
- Clayton, R. a B. Engquist, 1977. Absorbing boundary conditions for acoustic and elastic wave equations. *Bull. Seism. Soc. Am.* 67, 1529 1540.
- Crase, E., Ch. Wideman, M. Noble, and A. Tarantola, 1992. Nonlinear elastic waveform inversion of land seismic reflection data. *J. Geophys. Res.* 97, 4685-4703.
- **Dablain, M. A., 1986**. The application of high-order differencing to the scalar wave equation. *Geophysics* 51, 54-66.
- **Dumbser, M. a M. Käser, 2006**. An arbitrary high-order discontinuous Galerkin method for elastic waves on unstructured meshes II. The three-dimensional isotropic case. *Geophys. J. Int.* 167, 319 336
- **Dumbser, M., M. Käser a E. Toro, 2007**. An arbitrary high-order Discontinuous Galerkin method for elastic waves on unstructured meshes V. Local time stepping and p-adaptivity. *Geophys. J. Int.*, in press.
- Emmerich, H., 1989. 2-D wave propagation by a hybrid method. *Geophys. J. Int.* 99, 307 319.
- 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. a 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.
- Fäh, D., P. Suhadolc a G. F. Panza, 1993. Variability of seismic ground motion in complex media: the case of a sedimentary basin in the Friuli (Italy) area. J. Applied Geophysics 30, 131 - 148.
- **Fornberg, B., 1988.** Generation of finite-difference formulas on arbitrary spaced grids. *Mathematics of computation* 51(184), 699-706.
- Fricke, J. R., 1991. Estimating order-of-accuracy for numerical wave propagation solutions in heterogeneous media. (A) J. Acoust. Soc. Am. 90(4), 2298-2298
- Gális, M., 2007. Hybridná MKD-MKP metóda simulácie zemetrasení a seizmického pohybu. Dizertačná práca. *FMFI, Univerzita Komenského*, Bratislava.

Gális, M., 2008.

- Gaffet, S. a M. Bouchon, 1989. Effects of two-dimensional topographies using the discrete wavenumber-boundary integral equation method in P-SV cases. J. Acoust. Soc. Am. 85, 2277 - 2283.
- Geller, R. J., N. Hirabayashi a H. Mizutani, 2007. A comparison of staggeredgrid, 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.
- Graves, R. W., 1996. Simulating seismic wave propagation in 3D elastic media using staggered-grid finite differences. *Bull. Seism. Soc. Am.* 86, 1091-1106.
- Holberg, O., 1987. Computational aspects of the choice of operator and sampling interval for numerical differentiation in large-scale simulation of wave phenomena. *Geophysical prospecting* 35, 629-655.
- **Higdon, R. L., 1991**. Absorbing boundary conditions for elastic waves. Geophysics 56, 231-241.
- Chaljub, E., D. Komatitsch, J. P. Vilotte, Y. Capdeville, B. Valette a G. Festa, 2007. Spectral-element analysis in seismology. In Advances in Wave Propagation in Heterogeneous Earth, 365 - 419, R.-S. Wu and V. Maupin, eds., Advances in Geophysics Vol. 48, R. Dmowska, ed. Elsevier - Academic Press.
- Igel, H., P. Mora, and B. Riollet, 1995. Anisotropic wave propagation through finite-difference grids. *Geophysics* 60, 1203-1216.
- Ilan, A., A. Ungar, and Z. S. Alterman, 1975. An improved representation of boundary conditions in finite difference schemes for seismological problems. *Geophys. J. R. Astr. Soc.* 43, 727-745.
- Iserles, A. a G. Strang, 1983. Optimal accuracy of difference schemes. *Trans. Amer. Math. Soc.* 277, 779-803.
- Kawase, H., 1988. Time-domain response of a semi-circular canyon for incident SV,
 P, and Rayleigh waves calculated by the discrete wavenumber boundary element method. *Bull. Seism. Soc. Am.* 78, 1415 1437.
- Käser, M. a M. Dumbser, 2006. An arbitrary high-order discontinuous Galerkin method for elastic waves on unstructured meshes - I. The two-dimensional isotropic case with external source terms. *Geophys. J. Int.* 166, 855 - 877.

- Käser, M., M. Dumbser, J. de la Puente a H. Igel, 2007. An arbitrary high-order Discontinuous Galerkin method for elastic waves on unstructured meshes - III. Viscoelastic attenuation. *Geophys. J. Int.* 168, 224 - 242.
- Klimeš, L., 1996. Accuracy of elastic finite differences in smooth media. *PAGEOPH* 148, 39-76.
- Komatitsch, D. a J. Tromp, 1999. Introduction to the spectral-element method for 3D seismic wave propagation. *Geophys. J. Int.* 139, 806 822.
- Kosloff, R. and D. Kosloff, 1986. Absorbing boundaries for wave propagation problems. *J. Comp. Phys.* 63, 363-376.
- Kristek, J. a P. Moczo, 2003. Seismic wave propagation in viscoelastic media with material discontinuities – a 3D 4th-order staggered-grid finite-difference modeling. *Bull. Seism. Soc. Am.* 93, 2273 - 2280.
- 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.
- Kristeková, M., J. Kristek, P. Moczo, and S. M. Day, 2006. Misfit criteria for quantitative comparison of seismograms. *Bull. Seism. Soc. Am.* 96, 1836-1850.
- Kruger, O. S., E. H. Saenger, and S. A. Shapiro, 2005. Scattering and diffraction by a single crack: an accuracy analysis of the rotated staggered grid. *Geophys. J. Int.* 162, 25-31.
- Kummer, B., A. Behle, a F. Dorau, 1987. Hybrid modelling of elastic-wave propagation in two-dimensional laterally inhomogeneous media. *Geophysics* 52, 765 -771.
- Lax, P. D. and B. Wendroff, 1964. Difference schemes for hyperbolic equations with high order accuracy. *Comm. Pure appl. Math.* 27.
- Lecomte, I., H. Gjøystdal, F. Maaø, R. Bakke, Å. Drottning a T.-A. Johansen, 2004. Efficient and flexible seismic modelling of reservoirs: the HybriSeis concept. *The Leading Edge* 23, 432 - 437.

- Levander, A. R., 1988. Fourth-order finite-difference P-SV seismograms. *Geophysics* 53, 1425-1435.
- Ma, S., R. J. Archuleta a P. Liu, 2004. Hybrid Modeling of Elastic P-SV Wave Motion: A Combined Finite-Element and Staggered-Grid Finite-Difference Approach. *Bull. Seism. Soc. Am.* 94, 1557 - 1563.
- Madariaga, R., 1976. Dynamics of an expanding circular fault. *Bull. Seism. Soc. Am.* 67, 163-182.
- Marfurt, K. J., 1984. Accuracy of finite-difference and finite-element modeling of the scalar and elastic wave equations. *Geophysics* 49, 533-549.
- Magnier, S.-A., P. Mora, and A. Tarantola, 1994. Finite differences on minimal grids. *Geophysics* 59, 1435-1443.
- 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.
- 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., E. Bystrický, J. Kristek, J. M. Carcione a M. Bouchon, 1997. Hybrid modeling of P-SV seismic motion at inhomogeneous viscoelastic topographic structures. *Bull. Seism. Soc. Am.* 87, 1305 1323.
- 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 finitedifference 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. Kristek a L. Halada, 2004b. The Finite-Difference Method for Seismologists. An Introduction. *Comenius University*, Bratislava.
- Moczo, P., J. Kristek, M. Galis, P. Pazak, a M. Balazovjech, 2007b. The Finite-Difference and Finite-Element Modeling of Seismic Wave Propagation and Earthquake Motion. *Acta Physica Slovaca*, 57(2), 177 - 406.
- Moczo, P., J. O. A. Robertsson a L. Eisner, 2007a. The finite-difference timedomain 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.
- **Ohtsuki, A. a K. Harumi, 1983**. Effects of topography and subsurface inhomogeneities on seismic SV waves. *Earthquake Eng. Struct. Dyn.*, 11, 441 462.
- 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.
- de la Puente, J., M. Käser, M. Dumbser a H. Igel, 2007. An arbitrary high order discontinuous Galerkin method for elastic waves on unstructured meshes IV: Anisotropy. *Geophys. J. Int.* 169, 1210 - 1228, doi:10.1111/j.1365-246X.2007.03381.x.
- Richtmayer, R. D. a K. W. Morton, 1967. Difference methods for initial value problems: New York, Interscience.
- **Robertsson, J. O. A., 1996**. A numerical free-surface condition for elastic/viscoelastic finite-difference modeling in the presence of topography. *Geophysics* 61, 1921 - 1934.
- Rovelli, A., A. Caserta, L. Malagnini a F. Marra, 1994. Assessment of potential strong ground motions in the city of Rome. *Annali di Geofisica* 37, 1745-1769.

123

- Sänger, E. H., S. A. Shapiro, and Y. Keehm, 2005. Seismic effects of viscous Biot-coupling: Finite difference simulations on micro-scale. *Geophys. Res. Lett.* 32 (14), L14310.
- Sänger, E. H. and T. Bohlen, 2004. Finite-difference modeling of viscoelastic and anisotropic wave propagation using the rotated staggered grid. *Geophysics* 69, 583-591.
- Serón, F. J., F. J. Sanz a M. Kindelán, 1989. Elastic wave propagation with the finite element method. *IBM*, *European center for science and engineering computing*, ICE-0028.
- Shtivelman, V., 1984. A hybrid method for wave field computation. *Geophys. Prospect.* 32, 236 257.
- Shtivelman, V., 1985. Two-dimensional acoustic modelling by a hybrid method. *Geophysics* 50, 1273 1284.
- Stead, R.J. a D. V. Helmberger, 1988. Numerical-analytical interfacing in two dimensions with applications to modeling NTS seismograms. In *Scattering and Attenuation of Seismic Waves*, 157-193, Eds. A. Aki and R.-S. Wu. *Birkhauser*, Basel.
- 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.
- Van den Berg, A., 1984. A hybrid solution for wave propagation problems in regular media with bounded irregular inclusions. *Geophys. J. R. Astr. Soc.*, 79, 3 - 10.

- Virieux, J., 1986. P-SV wave propagation in heterogeneous media: velocity-stress finite-difference method. *Geophysics* 51, 889-901.
- Yoshimura Ch., J. Bielak, Y. Hisada a A. Fernández, 2003. Domain Reduction Method for Three-Dimensional Earthquake Modeling in Localized Regions, Part II: Verification and Applications *Bull. Seism. Soc. Am.* 93, 825 – 840.
- Zahradník, J., 1995. Comment on 'A hybrid method for estimation of ground motion in sedimentary basins: Quantitative modeling for Mexico City' by D. Fäh, P. Suhadolc, St. Mueller and G. F. Panza. *Bull. Seism. Soc. Am.* 85, 1268-1270.
- Zahradník, J. a E. Priolo, 1995. Heterogeneous formulations of elastodynamic equations and finite-difference schemes. *Geophys. J. Int.* 120, 663-676.
- Zahradník, J. a P. Moczo, 1996. Hybrid seismic modeling based on discretewavenumber and finite-difference methods. *PAGEOPH* 148, 21 - 38.



Príloha

Obr. 55. R10, F_S , N = 6, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.


Obr. 56. R10, F_P , N = 6, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 57. R10, F_S , N = 8, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 58. R10, F_P , N = 8, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 59. R10, F_S , N = 10, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 60. R10, F_P , N = 10, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 61. R10, F_S , N = 12, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 62. R10, F_P , N = 12, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 63. R10, F_S , N = 14, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.



Obr. 64. R10, F_P , N = 14, EM a PM v závislosti od vzdialenosti.