

UNIVERZITA KOMENSKÉHO
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

SIMULÁCIA VOĽNÉHO POVRCHU
V METÓDE KONEČNÝCH DIFERENCIÍ

Bakalárska práca

UNIVERZITA KOMENSKÉHO
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

SIMULÁCIA VOĽNÉHO POVRCHU
V METÓDE KONEČNÝCH DIFERENCIÍ

Bakalárska práca

Študijný program: Fyzika
Študijný odbor: 1160 Fyzika
Školiace pracovisko: Katedra astronómie, fyziky Zeme a meteorológie
Školiteľ: prof. RNDr. Peter Moczo, DrSc.

Bratislava 2014

Barbara Badová



ZADANIE ZÁVEREČNEJ PRÁCE

Meno a priezvisko študenta: Barbara Badová
Študijný program: fyzika (Jednoodborové štúdium, bakalársky I. st., denná forma)
Študijný odbor: 4.1.1. fyzika
Typ záverečnej práce: bakalárska
Jazyk záverečnej práce: slovenský

Názov: Simulácia voľného povrchu v metóde konečných diferencií / *Simulation of the free surface in the finite-difference method*

Cieľ: Analyzovať možnosti aproximácie podmienky nulového vektora napätia na nerovinnom voľnom povrchu Zeme pomocou tzv. meshless prístupu.

Vedúci: prof. RNDr. Peter Moczo, DrSc.
Katedra: FMFIKAFZM - Katedra astronómie, fyziky Zeme a meteorológie
Vedúci katedry: prof. RNDr. Peter Moczo, DrSc.
Dátum zadania: 07.10.2013

Dátum schválenia: 08.10.2013
prof. RNDr. Jozef Masarik, DrSc.
garant študijného programu

študent

vedúci práce

Čestné prehlásenie

Čestne prehlasujem, že som predloženú bakalársku prácu vypracovala samostatne s použitím citovaných zdrojov.

.....
Barbara Badová

Pod'akovanie

Moja vďaka patrí predovšetkým vedúcemu tejto práce, prof. RNDr. Petrovi Moczovi, DrSc., za jeho ochotu, cenné rady a odborné vedenie. Za umožnenie štúdia na vysokej škole a neustálu podporu počas uplynulých troch rokov ďakujem svojim rodičom, ako aj celej svojej rodine.

Abstrakt

Barbara Badová

Simulácia voľného povrchu v metóde konečných diferencií

Univerzita Komenského

Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

Katedra astronómie, fyziky Zeme a meteorológie

Školiteľ: prof. RNDr. Peter Moczo, DrSc.

Bratislava 2014

56 strán

Šírenie seizmických vln a seizmický pohyb povrchu Zeme môžu byť výrazne ovplyvnené topografiou (nerovinnosťou) voľného povrchu Zeme. Samotná lokálna topografia môže spôsobovať výrazné lokálne anomálie seizmického pohybu. Spolu s blízkou povrchovou sedimentárnou štruktúrou môže dominantne určovať seizmický pohyb na povrchu. Pri predikcii seizmického pohybu počas budúcich zemetrasení musia preto numerické metódy dostatočne presne zahrnúť okrajovú podmienku na voľnom povrchu – podmienku nulového vektora napätia. V niektorých metódach je táto podmienka splnená automaticky, v niektorých metódach je nutné ju explicitne implementovať. To je aj prípad metódy konečných diferencií. Metóda konečných diferencií aproximuje jednak pohybovú rovnicu kontinua, jednak Hookeov konštitučný vzťah. V prípade striedavo usporiadanej siete štandardne aplikuje centrované aproximácie prvých priestorových derivácií. V prípade nerovinného voľného povrchu sú však sieťové priestorové body, v ktorých nie je možné aplikovať centrované aproximácie, pretože v okolí bodu neexistuje potrebná množina okolitých bodov. Táto práca je venovaná možnosti aproximovať deriváciu v takom prípade pomocou MLS (Moving Least Squares) prístupu, ktorý umožňuje využiť hodnoty derivovanej veličiny v bodoch nerovnomerne rozmiestnených v okolí záujmového bodu. V práci sme podrobne odvodili MLS aproximáciu v 3D prípade. Vlastnosti MLS aproximácie sme analyzovali v kanonickom 1D prípade na striedavo usporiadanej sieti.

Našli sme dve dôležité vlastnosti MLS aproximácie a tiež váhovú funkciu, pre ktorú dáva MLS prístup aproximáciu zhodnú s centrovanou aproximáciou na striedavo usporiadanej sieti (2. i 4. rádu presnosti).

Kľúčové slová: topografia voľného povrchu Zeme, metóda konečných diferencií, MLS aproximácia

Abstract

Barbara Badová

Simulation of the free surface in the finite-difference method

Comenius University

Faculty of Mathematics, Physics and Informatics

Department of Astronomy, Physics of the Earth and Meteorology

Supervisor: prof. RNDr. Peter Moczo, DrSc.

Bratislava 2014

56 pages

Seismic wave propagation and seismic motion of the Earth's surface can be significantly affected by topography of the Earth's free surface. A local topography itself can cause considerable local anomalies of seismic motion. Together with near surface sedimentary structure they can dominantly determine seismic motion at the surface. In predicting seismic motion during future earthquakes, numerical methods must therefore sufficiently accurately implement boundary condition at the free surface – the traction-free condition. In some methods, this condition is satisfied automatically, in some methods its explicit implementation is necessary. One of the latter methods is the finite-difference method. The finite-difference method approximates both equation of motion and Hooke's constitutive law. In case of staggered grid scheme it applies centred approximations of the first spatial derivatives. However, if the free surface is not planar, there are some spatial grid points, at which the centred approximation cannot be applied because there is no required set of points in their vicinity. This thesis is devoted to the possibility of approximating the first derivative in such a case using the MLS (Moving Least Squares) approach, which enables using values of a function to be differentiated at points distributed non-uniformly in the vicinity of the chosen point. In the thesis we derived in detail the MLS approximation in 3D case. We analysed properties of the MLS approximation in a canonical 1D case on the staggered grid. We found two important properties of the MLS approximation and also a

weight function for which the MLS approach gives approximation equal to the centred approximation on the staggered grid (2. and 4. order accurate).

Key words: Earth's surface topography, finite-difference method, MLS approximation

Predhovor

Topografia voľného povrchu Zeme v značnej miere ovplyvňuje šírenie seizmických vln a zemetrasný pohyb. Súčasnú metódu poskytujú uspokojivé výsledky v prípade simulácie rovinného voľného povrchu (Moczo et al. 2014). Zahnutie okrajovej podmienky v prípade nerovinného rozhrania prostredí pevná látka/vzduch alebo kvapalina/vzduch však stále predstavuje jednu z najzložitejších úloh numerického modelovania šírenia seizmických vln, čo je zároveň aj dôvodom vzniku tejto bakalárskej práce. Jej cieľom je podrobné štúdium a analýza hybridnej výpočtovej metódy, umožňujúcej výpočet veličín vlnového poľa a ich derivácií aj v blízkosti a na nerovinnom voľnom povrchu Zeme.

Túto bakalársku prácu som si vybrala na odporúčanie môjho spolužiaka, kvôli jej matematickej podstate a záujmu o mechaniku kontinua, v snahe zdokonaľiť svoje programovacie schopnosti. Práca môže slúžiť ako stručný úvod do problematiky numerického modelovania seizmického pohybu v prípade topografie voľného povrchu Zeme. Práca zároveň vytvára podklad pre riešenie problému v nadväzujúcom magisterskom štúdiu.

Bakalárska práca bezprostredne nadväzuje na nepublikovaný návrh Leily Etemadsaeed z Iránu, ktorý vypracovala počas polročnej návštevy u školiteľa tejto práce. Pokračovanie práce bude súčasťou spoločného zámeru o implementáciu nerovinného voľného povrchu do konečno-diferenčného programu FDSim3D (Kristek a Moczo 2014).

Zoznam použitého značenia

Skratky

AFDA	adjustovaná konečno-diferenčná aproximácia
EQ	parciálna diferenciálna rovnica
FD	konečno-diferenčný
$FDEQ$	konečno-diferenčná aproximácia parciálnej diferenciálnej rovnice
FDM	metóda konečných diferencií
FEM	metóda konečných prvkov
MLS	moving least squares
SG	striedavo usporiadaná sieť
VS	formulácia v rýchlosti a napätí

Matematické označenia

$\frac{d^j}{d\xi^j}$	j-ta úplná derivácia podľa ξ
$\frac{\partial^j}{\partial\xi^j}$	j-ta parciálna derivácia podľa ξ
\mathbf{D}^x	diskretizovaný MLS operátor derivácie podľa x
\mathbf{P}	matica tvorená hodnotami bázičného vektora \bar{p}
\mathbf{W}	diagonálna matica váhových koeficientov w_I
ξ'	prvá derivácia ξ podľa x

Grécke symboly

δ_{ij}	Kroneckerov δ symbol
Δ	časový krok
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	priestorové kroky
ε_{ij}	tenzor deformácie
λ, μ	Laméove elastické koeficienty
ρ	hustota

σ_{ij}	tenzor napätia
$\varphi_{I,K,L}^m, \Phi_{I,K,L}^m$	presná a aproximatívna hodnota funkcie u v sieťovom bode (x_I, y_K, z_L, t_m)
Latinské symboly	
\vec{a}	vektor neznámych koeficientov
C_{ijkl}	tenzor elastických koeficientov
$D_x^{(1-4)}$	konečno-diferenčná aproximácia prvej priestorovej derivácie podľa x štvrtého rádu
D_x^F, D_x^B	konečno-diferenčné forward a backward aproximácie prvej derivácie podľa x
h	sieťový krok
I, K, L	priestorové indexy sieťového bodu
m	index časovej hladiny
\vec{n}, n_j	normálový vektor
$O(h^n)$	rád zvyšku Taylorovho rozvoja
\vec{p}	polynomický bázový vektor
t	čas
$T_{I\pm 1/2}^m$	diskrétna aproximácia napätia
\tilde{u}	diskrétna FDM-MLS aproximácia veličiny vlnového poľa u
$\vec{u}, u_i, u_x, u_y, u_z$	posunutie
$\vec{v}, v_i, v_x, v_y, v_z$	rýchlosť (posunutia)
V_I^m	diskrétna aproximácia rýchlosti (posunutia)
w_I	váhový koeficient
(x_I, y_K, z_L, t_m)	priestorovo-časové súradnice sieťového bodu

Obsah

ÚVOD.....	13
1 ZÁKLADNÉ VELIČINY A VZŤAHY MECHANIKY KONTINUA.....	15
1.1 Vektor napätia a tenzor napätia.....	15
1.2 Pohybová rovnica kontinua a Hookeov zákon.....	16
2 SÚČASNÉ KONEČNO-DIFERENČNÉ SCHÉMY PRE VOĽNÝ POVRCH.....	19
2.1 Metóda konečných diferencií.....	19
2.2 Aproximácia derivácií v metóde konečných diferencií.....	21
2.3 Metódy simulácie rovinného voľného povrchu v metóde konečných diferencií	23
2.3.1 Stress Imaging.....	24
2.3.2 Adjustovaná FD Aproximácia.....	25
2.4 Metódy simulácie nerovinného voľného povrchu.....	26
2.4.1 FD schémy v karteziánskych súradniciach.....	26
2.4.2 FD schémy v krivočiarych súradniciach.....	27
2.4.3 Simulácia voľného povrchu pomocou hybridných metód.....	27
3 SIMULÁCIA VOĽNÉHO POVRCHU POMOCOУ HYBRIDNEJ FDM-MLS METÓDY.....	29
3.1 MLS aproximácia zložky tenzora napätia alebo vektora rýchlosti posunutia.....	29
3.2 Prvá priestorová derivácia aproximatívnej veličiny.....	34
3.3 Formulácia pohybovej rovnice a Hookeovho zákona v rýchlosti a napätí.....	38
4 VÝSLEDKY.....	47
4.1 Aproximácia derivácie druhého rádu presnosti.....	47
4.2 Aproximácia derivácie štvrtého rádu presnosti.....	49
ZÁVER.....	53
Zoznam použitej literatúry.....	54

ÚVOD

Zemetrasenia patria k prírodným javom spôsobujúcim veľké materiálne škody a často aj straty na ľudských životoch. Ich ničivé účinky sme mohli pozorovať napríklad pri zemetrasení na Haiti (momentové magnitúdo $M_w = 7.0$, 12. január 2010) alebo v Japonsku ($M_w = 9.0$, 11. marec 2012). Účinky zemetrasení závisia nielen od veľkosti uvoľnenej energie ale aj od tzv. lokálnych efektov zemetrasení, t.j. lokalizovaných zosilnení alebo predĺžení trvania seizmického pohybu v dôsledku lokálnych povrchových geologických podmienok (napríklad sedimentárnych bazénov). V dôsledku týchto lokálnych efektov môže aj relatívne slabé zemetrasenie spôsobiť nemalé ekonomické škody. Fakt, že oblasti najzraniteľnejšie z hľadiska lokálnych efektov, sú zároveň najosídlenejšími, zdôrazňuje dôležitosť predpovede budúceho zemetrasenia.

Predpovedať čas, miesto a veľkosť budúceho zemetrasenia v súčasnosti nie je možné a otáznym zostáva aj to, či v budúcnosti bude. Bez ohľadu na to, či vieme alebo nevieme zemetrasenie predpovedať, je nesmierne dôležitá práve predikcia účinkov budúcich zemetrasení na zvolených záujmových lokalitách, akými sú napríklad husto zaľudnené a priemyselné oblasti. Predpoveď seizmického pohybu, založená na empirických pozorovaniach v danej lokalite, je veľmi často z dôvodu nedostatočného množstva údajov nemožná, a preto sa pre tieto účely využívajú numerické metódy.

Numerické modelovanie šírenia seizmických vln má zásadný význam takmer v každej oblasti seizmológie. Množstvo numerických metód, používaných v seizmológii, je ovplyvnené širokou škálou skúmaných problémov a žiadna z nich nie je najpresnejšia a najefektívnejšia pre všetky prípady.

Numerické metódy sa líšia rôznymi vlastnosťami a aspektmi. Každá z nich musí dostatočne presne zahrnúť okrajové podmienky na voľnom povrchu Zeme. V prípade povrchových lokálnych štruktúr je voľný povrch výrazným faktorom určujúcim vlnové pole a výsledný seizmický pohyb na povrchu. Topografia voľného povrchu môže spôsobovať výrazné lokálne anomálie seizmického pohybu.

Voľný povrch, vo všeobecnosti rozhranie prostredí pevná látka/vzduch alebo kvapalina/vzduch, možno vo väčšine seizmologických problémov nahradiť rozhraním pevná látka/vákuum alebo kvapalina/vákuum. V takom prípade ide o podmienku nulového vektora napätia na rozhraní. V niektorých metódach je podmienka voľného povrchu splnená automaticky, v niektorých metódach je nutné podmienku voľného povrchu

explicitne implementovať. To je aj prípad metódy konečných diferencií. Bolo vyvinutých niekoľko metód implementácie (či simulácie) voľného povrchu v rôznych typoch konečno-diferenčných schém. Väčšina z nich vyžaduje veľmi jemné vzorkovanie a mnohé z nich majú problémy so stabilitou. Implementácia voľného povrchu v metóde konečných diferencií je v súčasnosti stále veľkou výzvou.

Táto bakalárska práca je venovaná hybridnému prístupu, ktorý kombinuje metódu konečných diferencií a tzv. MLS aproximáciu (Etemadsaeed 2013).

Po uvedení základných pojmov mechaniky kontinua v kapitole 1 v krátkosti priblížime metódu konečných diferencií, typy konečno-diferenčných sietí a spôsoby aproximácie veličín a ich derivácií v bodoch siete. Tie sú spolu so súčasnými metódami simulácie voľného povrchu prezentované v kapitole 2. Kapitola 3 je venovaná hybridnej metóde – pomocou MLS aproximácie nájdeme približné vyjadrenie veličín vlnového poľa a ich derivácií v sieťových bodov, ktoré slúžia na diskretizáciu pohybovej rovnice kontinua a Hookeovho konštitučného vzťahu so zahrnutím okrajovej podmienky voľného povrchu v celom objeme kontinua. Dosiahnuté výsledky sú prezentované v kapitole 4.

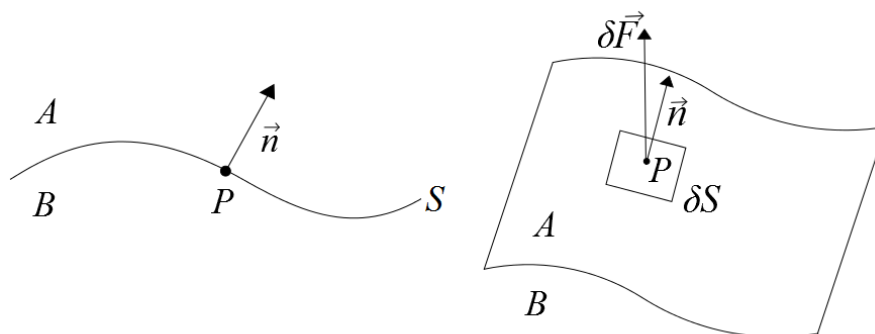
1 ZÁKLADNÉ VELIČINY A VZŤAHY MECHANIKY KONTINUA

Pri opise mnohých fyzikálnych javov pracujeme s modelom kontinua, t.j. makroskopicky spojitého prostredia. V kontinuu priradujeme vlastnosti materiálových parametrov, napríklad Laméových elastických koeficientov λ a μ v prípade elastického kontinua, geometrickým bodom, čo umožňuje popis úlohy prostredníctvom spojitéch veličín. Model kontinua sa najčastejšie využíva pri opise tekutín a reálnych makroskopických telies, ktoré sa pôsobením síl a napätí deformujú.

V úvodnej kapitole sa oboznámime so základnými veličinami charakterizujúcimi kontinuum a uvedieme dva základné vzťahy, ktoré spoločne plne opisujú pohybový stav, ako aj vzťah medzi napätím a deformáciou, pre prípad ľubovoľného kontinua. Úvodná kapitola bola spracovaná podľa práce Moczo (2006).

1.1 Vektor napätia a tenzor napätia

Uvažujme plochu S oddeľujúcu časť kontinua A od časti kontinua B (Obr. 1.1).



Obr. 1.1 Kontaktné silové pôsobenie časti kontinua A na časť B oddelené plochou S .

Kontaktné silové pôsobenie časti kontinua A na časť kontinua B na ploche S sa prenáša do celého objemu a v kontinuu vzniká stav napätia. Ak je \vec{n} normálový vektor k ploche S v bode P orientovaný v smere $B \rightarrow A$ a $\delta \vec{F}$ je infinitezimálna sila charakterizujúca silové pôsobenie na infinitezimálnej ploche δS , potom vektor napätia je definovaný vzťahom

$$\vec{T}(\vec{n}) = \lim_{\delta S \rightarrow 0} \frac{\delta \vec{F}}{\delta S}, \quad (1.1)$$

pričom δS sa zmršťuje do bodu P . Vektor napätia $\vec{T}(\vec{n})$ v bode P teda vyjadruje silové pôsobenie časti kontinua A na časť kontinua B cez plochu S . Zo závislosti vektoru napätia $\vec{T}(\vec{n})$ od plochy S vyplýva, že na opis stavu napätia v bode, nezávisle od plochy, potrebujeme poznať vektor napätia $\vec{T}(\vec{n})$ pre nekonečne veľa orientácií normálového vektora \vec{n} , čo je prakticky nemožné. Na opis stavu napätia v bode nezávisle od plochy preto zavádzame tenzorovú veličinu – tenzor napätia $\vec{\sigma}$. Vzťah medzi vektorom napätia $\vec{T}(\vec{n})$ a tenzorom napätia $\vec{\sigma}$ udáva Cauchyho vzťah

$$\vec{T}(\vec{n}) = \vec{n} \vec{\sigma}. \quad (1.2)$$

Kontaktným silovým pôsobením dvoch častí kontinua vzniká v uvažovanom objeme okrem stavu napätia aj stav deformácie, ktorá je lokálnou mierou relatívnej zmeny v polohe častíc kontinua. Poznamenajme, že v Lagrangeovskom opise nesledujeme zmenu danej fyzikálnej veličiny v geometrickom bode, ale zaujímame sa o pohyb jednej konkrétne zvolenej častice, ktorá je určená počiatočnou polohou v referenčnom čase t_0 .

Vektor posunutia $\vec{u}(\vec{X}, t) = [u_x, u_y, u_z]$, ktorý predstavuje vektorovú vzdialenosť medzi jej polohou $\vec{X} = [x, y, z]$ v čase t_0 a polohou $\vec{X}' = [x', y', z']$ v čase t , je tak funkciou pôvodnej polohy a času. Ak sa vzdialenosť dvoch ľubovoľne zvolených bodov v čase mení, nastáva deformácia, ktorú možno v každom bode kontinua charakterizovať tenzorom deformácie $\vec{\varepsilon}$ definovaným vzťahom

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (1.3)$$

Vo vzťahu (1.3), rovnako ako aj v ďalšej práci, používame Einsteinovu sumačnú konvenciu a značenie $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$, kde $i, j, k \in \{1, 2, 3\}$.

1.2 Pohybová rovnica kontinua a Hookeov zákon

Silové pôsobenie v kontinuu môže byť uskutočňované dvoma spôsobmi. V časti 1.1 sme uviedli príklad kontaktného silového pôsobenia dvoch častí kontinua A a B oddelených plochou S . Iným druhom síl sú sily objemové, kde ku vzájomnému silovému pôsobeniu

dvoch telies dochádza prostredníctvom polí. Príkladom takejto sily je gravitačná sila. Aplikáciou druhého Newtonovho zákona na objem kontinua V ohraničený plochou S a využitím Gaussovej vety dostávame pohybovú rovnicu kontinua v tvare

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + f_i, \quad (1.4)$$

kde člen $\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}$ predstavuje objemovú hustotu plošných (kontaktných) síl, člen f_i

objemovú hustotu objemových (nekontaktných) síl a $\rho(\vec{X})$ hustotu prostredia. Na úplný opis javu, akým je napríklad šírenie seizmických vln v elastickej prostredí zemského vnútra, nie je pohybová rovnica postačujúca, nakoľko nezohľadňuje vzťah medzi napätím a deformáciou pre jednotlivé materiály. Pohybovú rovnicu preto dopĺňa konštitučný vzťah – Hookeov zákon

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad (1.5)$$

kde C_{ijkl} je tenzor elastickej koeficientov. V prípade elastickej izotropného kontinua ho možno vyjadriť v tvare

$$C_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}), \quad (1.6)$$

kde $\lambda(\vec{x})$ a $\mu(\vec{x})$ sú Laméove elastickej koeficienty a δ_{ij} je Kroneckerov delta symbol definovaný ako

$$\delta_{ij} = 1 \text{ ak } i = j, \delta_{ij} = 0 \text{ ak } i \neq j.$$

Zo vzťahu (1.5) potom pre prípad elastickej izotropného kontinua dostávame

$$\sigma_{ij} = \lambda \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (1.7)$$

Hookeov zákon spolu s pohybovou rovnicou kontinua a príslušnými počiatočnými a okrajovými podmienkami plne charakterizujú šírenie elastickej vln v neobmedzenom izotropnom elastickej kontinuu.

V numerickom modelovaní seizmického pohybu v závislosti od typu skúmaného problému využívame štyri základné formulácie týchto dvoch rovníc. Vzťahy (1.4) a (1.7) spolu tvoria formuláciu v posunutí a napätí:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + f_i, \quad (1.8)$$

$$\sigma_{ij} = \lambda \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right).$$

Po dosadení vzťahu (1.7) do vzťahu (1.4) dostávame formuláciu v posunutí:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + f_i. \quad (1.9)$$

Ak využijeme definíciu rýchlosti častice a vo vzťahu (1.4) použijeme namiesto druhej časovej derivácie vektora posunutia prvú časovú deriváciu vektora rýchlosti, dostávame formuláciu v posunutí, rýchlosti a napätí:

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + f_i,$$

$$\sigma_{ij} = \lambda \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (1.10)$$

$$v_i = \frac{\partial u_i}{\partial t},$$

kde $\vec{v}(\vec{X}, t) = [v_x, v_y, v_z]$ je vektor rýchlosti posunutia. Posledným typom formulácie je formulácia v rýchlosti a napätí, v ktorej je použitá časová derivácia Hookeovho zákona a príslušné časové derivácie vektora posunutia, vystupujúce v oboch rovniciach, sú nahradené vektorom rýchlosti posunutia:

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + f_i, \quad (1.11)$$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial t} = \lambda \delta_{ij} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} + \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right).$$

Formuláciu pohybovej rovnice kontinua a Hookeovho zákona v rýchlosti a napätí budeme využívať v metóde simulácie voľného povrchu Zeme, prezentovanej v kapitole 2.4.3.

2 SÚČASNÉ KONEČNO-DIFERENČNÉ SCHÉMY PRE VOLNÝ POVRCH

Numerické modelovanie šírenia seizmických vln predstavuje významný prostriedok pri skúmaní štruktúry Zeme, vysvetlení procesov prebiehajúcich v zemskom vnútri a analýzy signálov zaznamenaných seizmologickými stanicami, čo podmieňuje jeho dôležitosť takmer v každej oblasti seizmológie. Zložitá geometrická i reologická štruktúra zemského vnútra spôsobuje komplikované šírenie seizmických vln a seizmický pohyb na povrchu Zeme. Spojitá i nespojitá heterogénnosť prostredia, zložitá geometria materiálových rozhraní vnútri Zeme a topografia voľného povrchu sú dôvodom, pre ktorý nie je možné na popis šírenia seizmických vln v Zemi a seizmického pohybu na povrchu Zeme použiť presné matematické metódy. Je nutné použiť približné metódy. Medzi približnými metódami sú pre výpočet šírenia seizmických vln najdôležitejšie numerické doménové metódy.

V súvislosti s rôznymi konfiguráciami prostredia a vlnového poľa vzniklo v seizmológii veľké množstvo numerických doménových metód. Najvyužívanejšími sú metóda konečných diferencií a metóda spektrálnych prvkov. Používanou je stále aj metóda konečných prvkov, prípadne hybridné metódy využívajúce ich kombináciu. Medzi najnovšie a najuniverzálnejšie metódy patrí tzv. ADER-DG metóda (Arbitrary high-order Derivative Discontinuous Galerkin). Každá z uvedených metód má svoje výhody a nevýhody a je vhodná pre iný typ problému.

Výskumný tím školiteľa rozpracoval na svetovej úrovni metódu konečných diferencií. V nasledujúcej kapitole sa preto v krátkosti oboznámime s metódou konečných diferencií, základnými konečno-diferenčnými schémami a súčasnými implementáciami voľného povrchu v metóde konečných diferencií.

2.1 Metóda konečných diferencií

Túto podkapitolu sme spracovali podľa knihy Moczo et al. (2014). Metóda konečných diferencií (ďalej FDM, podľa anglického finite-difference method) patrí v súčasnosti k najvyužívanejším metódam v numerickom modelovaní šírenia seizmických vln a seizmického pohybu. Aplikácia metódy konečných diferencií na daný problém spočíva v pokrytí výpočtovej oblasti priestorovo-časovou sieťou. Štvordimenzionálny priestor

premenných (x, y, z, t) pokryjeme sieťou diskrétnych bodov (x_I, y_K, z_L, t_m) ; $I, K, L, m \in \{0, 1, 2, \dots\}$, so sieťovými krokmi $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ a časovým krokom Δ .

Potom

$$x_I = x_0 + I \Delta x, \quad y_K = y_0 + K \Delta y, \quad z_L = z_0 + L \Delta z, \quad t_m = t_0 + m \Delta. \quad (2.1)$$

V ďalších výpočtoch budeme uvažovať pravidelnú sieť s $\Delta x = \Delta y = \Delta z = h$. Po pokrytí výpočtovej oblasti vhodnou priestorovo-časovou sieťou aproximujeme pohybovú rovnicu a Hookeov zákon v bodoch siete: nahradíme derivácie ich konečno-diferenčnými aproximáciami, aproximujeme relevantné veličiny a príslušné počiatočné a okrajové podmienky. Veličinu vlnového poľa $\varphi(x, y, z, t)$ v bode (x_I, y_K, z_L, t_m) budeme označovať ako $\varphi_{I,K,L}^m$ a jej diskrétnu aproximáciu v tom istom sieťovom bode ako $\Phi_{I,K,L}^m$.

Na základe priestorových pozícií veličín vlnového poľa, v našom prípade jednotlivých zložiek vektora posunutia/rýchlosti a tenzora napätia, rozlišujeme štyri základné typy konečno-diferenčných sietí. Prvým typom siete je konvenčná sieť, v ktorej sú všetky zložky vektora posunutia v každom bode siete. V tzv. collocated sieti sú v každom sieťovom bode všetky zložky vektora rýchlosti a tenzora napätia. Ak sú všetky zložky vektora rýchlosti v jednom bode siete a všetky zložky tenzora napätia tiež v jednom bode siete, rôznom od predchádzajúceho, hovoríme o čiastočne striedavo usporiadanej sieti. Posledným typom siete je striedavo usporiadaná sieť. V striedavo usporiadanej sieti má každá zložka vektora rýchlosti a každá nediagonálna zložka tenzora napätia svoju sieťovú pozíciu. Diagonálne (normálové) zložky tenzora napätia sú spoločne v jednej sieťovej pozícii. Priestorové rozmiestnenie zložiek vektora rýchlosti a tenzora napätia presne mapuje štruktúru Hookeovho zákona a pohybovej rovnice a umožňuje centrovane aproximácie derivácie ako najprirodzenejšie aproximácie.

Aproximácia derivácií a relevantných veličín v pohybovej rovnici kontinua a Hookeovom zákone vedie na systém konečno-diferenčných algebraických rovníc. Označme systém parciálnych diferenciálnych rovníc ako EQ a systém konečno-diferenčných rovníc ako $FDEQ$. Systém algebraických rovníc sa označuje aj ako konečno-diferenčná schéma. Konečno-diferenčná schéma musí byť konzistentná s pôvodným (diferenciálnym) problémom, stabilná a konvergentná.

$FDEQ$ je konzistentný s EQ , ak sa rozdiel medzi nimi blíži k nule pre sieťový a časový krok blížiaci sa k nule. Podmienku konzistencie možno zapísať v tvare

$$\lim_{h \rightarrow 0, \Delta \rightarrow 0} |EQ - FDEQ| = 0. \quad (2.2)$$

$FDEQ$ je konvergentný, ak sa približné riešenie $FDEQ$ blíži k presnému riešeniu EQ pre sieťový a časový krok blížiaci sa k nule:

$$\lim_{h \rightarrow 0, \Delta \rightarrow 0} |\varphi_{I,K,L}^m - \Phi_{I,K,L}^m| = 0, \quad (2.3)$$

kde $\varphi_{I,K,L}^m$ je presné riešenie EQ a $\Phi_{I,K,L}^m$ je približné riešenie $FDEQ$.

Ak je riešenie EQ ohraničené, $FDEQ$ je stabilný, ak je jeho riešenie ohraničené. Ak je riešenie EQ ohraničené, avšak riešenie $FDEQ$ nie je ohraničené, $FDEQ$ je nestabilný.

Konečno-diferenčné schémy sa líšia formuláciou pohybových rovníc (1.8) - (1.11) a konečno-diferenčnou sieťou. Pri numerickom modelovaní seizmického pohybu a šírenia seizmických vln je najpoužívanejšia formulácia v rýchlosti a napätí na striedavo usporiadanej sieti (ďalej VS SG schéma, podľa anglického velocity-stress staggered-grid scheme). S VS SG schémou sa bližšie oboznámime neskôr v tejto kapitole.

2.2 Aproximácia derivácií v metóde konečných diferencií

Transformácia pohybovej rovnice kontinua a Hookeovho zákona na systém algebraických konečno-diferenčných rovníc vyžaduje aproximáciu derivácií v bodoch siete. Bez ujmy na všeobecnosti uvažujme jednorozmerný prípad. Za predpokladu hladkosti funkcie φ možno jej deriváciu v bode x vyjadriť prostredníctvom Taylorovho rozvoja funkcie φ v bode $x+h$ okolo bodu x :

$$\varphi(x+h) = \varphi(x) + h\varphi'(x) + \frac{1}{2}h^2\varphi''(x) + \frac{1}{6}h^3\varphi'''(x) + O(h^4) \quad (2.4)$$

z čoho

$$\varphi'(x) = \frac{1}{h}[\varphi(x+h) - \varphi(x)] - \frac{1}{2}h\varphi''(x) - \frac{1}{6}h^2\varphi'''(x) - O(h^3). \quad (2.5)$$

Na základe vzťahu (2.5) môžeme definovať forward aproximáciu prvej derivácie funkcie $\varphi(x)$ podľa x ako

$$D_x^F \varphi(x) \equiv \frac{1}{h}[\varphi(x+h) - \varphi(x)]. \quad (2.6)$$

Presnosť zvolenej aproximácie možno kvantifikovať pomocou rozdielu Taylorovho rozvoja použitej aproximácie a derivácie, ktorú sme aproximovali, t.j.

$$\begin{aligned} \text{TrunErr} \left\{ D_x^F \varphi(x) \right\} &\equiv \text{TaylorovRozvoj} \left\{ D_x^F \varphi(x) \right\} - \varphi'(x) \\ &= \frac{1}{2} h \varphi''(x) + \frac{1}{6} h^2 \varphi'''(x) + O(h^3) \end{aligned} \quad (2.7)$$

Označenie *TrunErr* pochádza z anglického názvu truncation error. Hlavný chybový člen, teda člen s najnižšou mocninou h , je úmerný h v prvej mocnine. Potom môžeme povedať, že použitá aproximácia derivácie je aproximáciou prvého rádu. Analogicky možno definovať aj backward aproximáciu

$$D_x^B \varphi(x) \equiv \frac{1}{h} [\varphi(x) - \varphi(x-h)]. \quad (2.8)$$

Rozdielom Taylorových rozvojev funkcií $\varphi(x+h)$ a $\varphi(x-h)$ okolo bodu x dostávame

$$\varphi'(x) = \frac{1}{2h} [\varphi(x+h) - \varphi(x-h)] - \frac{1}{6} h^2 \varphi'''(x) - O(h^4) \quad (2.9)$$

a môžeme zaviesť centrovanú aproximáciu

$$D_x \varphi(x) \equiv \frac{1}{2h} [\varphi(x+h) - \varphi(x-h)], \quad (2.10)$$

ktorá je aproximáciou druhého rádu presnosti. Vyššiu presnosť použitej aproximácie možno dosiahnuť tým, že na určenie derivácie funkcie v bode x využijeme Taylorov rozvoj funkcie vo viacerých okolitých bodoch bodu x . Pre ilustráciu uvedieme aproximáciu derivácie funkcie φ v bode x s využitím jej hodnôt v bodoch $\{x-3h/2, x-h/2, x+h/2, x+3h/2\}$, používanú vo VS SG schémach. Uvažujme aproximáciu derivácie v tvare

$$D_x^{(1-4)} \varphi(x) = \frac{1}{h} \sum_{j=1}^2 c_j \left\{ \varphi \left[x + \frac{1}{2}(2j-1)h \right] - \varphi \left[x - \frac{1}{2}(2j-1)h \right] \right\}, \quad (2.11)$$

kde značenie (1-4) vyjadruje aproximáciu štvrtého rádu prvej priestorovej derivácie.

Taylorovým rozvojom funkcie v uvedených bodoch dostávame

$$\begin{aligned} D_x^{(1-4)} &= (c_1 + 3c_2) \varphi'(x) + \frac{1}{24} (c_1 + 27c_2) \varphi'''(x) h^2 \\ &+ \frac{1}{1920} (c_1 + 243c_2) \varphi^{(5)}(x) h^4 + O(h^6). \end{aligned} \quad (2.12)$$

Požadujeme aby

$$(c_1 + 3c_2) = 1, \quad (c_1 + 27c_2) = 0. \quad (2.13)$$

Riešením sústavy (2.13) dostávame $c_1 = \frac{9}{8}$ a $c_2 = -\frac{1}{24}$. Aproximáciu derivácie tak môžeme vyjadriť v tvare

$$D_x^{(1-4)} \varphi(x) = \frac{1}{h} \left\{ \frac{9}{8} \left[\varphi\left(x + \frac{1}{2}h\right) - \varphi\left(x - \frac{1}{2}h\right) \right] - \frac{1}{24} \left[\varphi\left(x + \frac{3}{2}h\right) - \varphi\left(x - \frac{3}{2}h\right) \right] \right\} \quad (2.14)$$

Využitiu vzťahu (2.14) pri aproximácii derivácií vystupujúcich v pohybovej rovnici kontinua a Hookeovom zákone sa budeme venovať v nasledujúcej podkapitole.

2.3 Metódy simulácie rovinného voľného povrchu v metóde konečných diferencií

Pri numerickom modelovaní šírenia seizmických vln a seizmického pohybu možno v prípade rozhraní tuhá látka/vzduch a kvapalina/vzduch nahradiť vzduch nad zemským povrchom vákuom, čím získavame rozhranie charakterizované vzťahom

$$\vec{T}(\vec{n}) = \vec{n} \vec{\vec{\sigma}} = \vec{0}. \quad (2.15)$$

Takéto rozhranie nazývame voľným povrchom a vzťah (2.15) okrajovou podmienkou voľného povrchu. Pre prípad horizontálneho rovinného voľného povrchu s normálovým vektorom $\vec{n} = [0, 0, -1]$ zo vzťahu (2.15) dostávame

$$\sigma_{iz} = 0, \quad (2.16)$$

kde $i \in \{x, y, z\}$.

Bez ohľadu na typ použitej FD schémy, pri aproximácii derivácií v sieťových bodoch umiestnených na a v tesnej blízkosti voľného povrchu Zeme chýbajú hodnoty veličiny nad voľným povrchom. Toto možno riešiť rôznymi spôsobmi. V jednom prístupe sú uvažované nulové hodnoty veličín nad voľným povrchom (tzv. vákuový formalizmus). V inom prístupe sa uvažujú virtuálne hodnoty veličín a na ich výpočet sa využíva okrajová podmienka. Napokon možno na aproximáciu derivácií použiť len sieťové pozície pod voľným povrchom.

V častiach 2.3.1 a 2.3.2 v krátkosti priblížime tzv. metódu Stress Imaging (Levander 1988) založenú na využití virtuálnych hodnôt nad voľným povrchom Zeme a tzv. adjustovanú FD aproximáciu (ďalej AFDA, podľa anglického adjusted FD approximation)

(Kristek et al. 2002). Viac o metódach simulácie rovinného voľného povrchu s využitím VS SG schémy možno nájsť v prácach Moczo et al. (2007a,b, 2014).

2.3.1 Stress Imaging

Základná myšlienka metódy spočíva vo využití virtuálnych hodnôt tenzora napätia, umiestnených v sieťových bodoch nad voľným povrchom. Tie určíme predpokladajúc antisymetriu zložiek tenzora napätia umiestnených nad a pod voľným povrchom s rovinou symetrie ležiacou v rovine voľného povrchu. Predpoklad antisymetrie

$$\sigma(-x) = -\sigma(x) \quad (2.17)$$

zabezpečuje splnenie okrajovej podmienky danej vzťahom (2.15) .

Pre ilustráciu uvedieme aplikáciu metódy v 1D prípade (Moczo et al. 2014). Uvažujme VS SG schému s aproximáciou derivácií druhého rádu v čase a štvrtého rádu v priestore. Po diskretizácii funkcií v bodoch siete dostávame pre prípad napätia s priestorovým indexom $I+1/2$

$$\begin{aligned} V_I^{m+1/2} &= V_{-I}^{m-1/2} \\ &+ b_I \frac{\Delta}{h} \left[\frac{9}{8} \left(T_{I+1/2}^m - T_{I-1/2}^m \right) - \frac{1}{24} \left(T_{I+3/2}^m - T_{I-3/2}^m \right) \right] \\ T_{I+1/2}^m &= T_{I+1/2}^{m-1} \\ &+ M_{I+1/2} \frac{\Delta}{h} \left[\frac{9}{8} \left(V_{I+1}^{m-1/2} - V_{I-1}^{m-1/2} \right) - \frac{1}{24} \left(V_{I+2}^{m-1/2} - V_{I-1}^{m-1/2} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.18)$$

kde M je elastický modul a $b = \frac{1}{\rho}$. Nech $I=0$ zodpovedá voľnému povrchu, teda $x=0$.

Hodnoty napätia $T_{-1/2}^m$ a $T_{-3/2}^m$, umiestnené v sieťových bodoch nad voľným povrchom, určíme pomocou vzťahu (2.17). Na určenie hodnoty rýchlosti $V_{-1}^{m-1/2}$, potrebnej pre výpočet $T_{1/2}^m$, použijeme aproximáciu časovej derivácie okrajovej podmienky druhého rádu presnosti:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma}{\partial t} \Big|_{-h/2}^{m-1/2} &= - \frac{\partial \sigma}{\partial t} \Big|_{h/2}^{m-1/2}, \\ M_{-1/2} \frac{1}{h} \left(V_0^{m-1/2} - V_{-1}^{m-1/2} \right) &= - M_{1/2} \frac{1}{h} \left(V_1^{m-1/2} - V_0^{m-1/2} \right). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Ak predpokladáme

$$M_{-1/2} = M_{1/2}, \quad (2.20)$$

pre hľadajú hodnotu rýchlosti dostávame

$$V_{-1}^{m-1/2} = V_1^{m-1/2}. \quad (2.21)$$

Aplikácia metódy v 3D simuláciách rovinného voľného povrchu, jej výpočtová efektívnosť a náročnosť, sú podrobne prezentované v práci Moczo et al. (2014).

2.3.2 Adjustovaná FD Aproximácia

Rovinný voľný povrch možno simulovať aj iným spôsobom, ako s využitím virtuálnych hodnôt vektora rýchlosti a tenzora napätia nad voľným povrchom. AFDA spočíva vo využití len vnútorných sieťových bodov, pričom zložky tenzora napätia umiestnené na voľnom povrchu sú na základe vzťahu (2.15) rovné nule. Na aproximáciu derivácií podľa z v sieťových bodoch na voľnom povrchu a vo vnútorných sieťových bodoch vo vzdialenostiach $h/2$ a h Kristek et al. (2002) navrhli tieto aproximácie štvrtého rádu pre relevantné pozície sieťového bodu:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial z}(z_0) = \frac{1}{h} & \left[-\frac{352}{105} \varphi(z_0) + \frac{35}{8} \varphi\left(z_0 + \frac{1}{2}h\right) - \frac{35}{24} \varphi\left(z_0 + \frac{3}{2}h\right) \right. \\ & \left. + \frac{21}{40} \varphi\left(z_0 + \frac{5}{2}h\right) - \frac{5}{56} \varphi\left(z_0 + \frac{7}{2}h\right) \right] + O(h^4), \end{aligned} \quad (2.22)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial z}(z_0) = \frac{1}{h} & \left[-\frac{11}{12} \varphi\left(z_0 - \frac{1}{2}h\right) + \frac{17}{24} \varphi\left(z_0 + \frac{1}{2}h\right) + \frac{3}{8} \varphi\left(z_0 + \frac{3}{2}h\right) \right. \\ & \left. - \frac{5}{24} \varphi\left(z_0 + \frac{5}{2}h\right) + \frac{1}{24} \varphi\left(z_0 + \frac{7}{2}h\right) \right] + O(h^4), \end{aligned} \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial z}(z_0) = \frac{1}{h} & \left[-\frac{1}{12}h \varphi(z_0 - h) - \frac{577}{528} \varphi\left(z_0 - \frac{1}{2}h\right) + \frac{201}{176} \varphi\left(z_0 + \frac{1}{2}h\right) \right. \\ & \left. - \frac{9}{176} \varphi\left(z_0 + \frac{3}{2}h\right) + \frac{1}{528} \varphi\left(z_0 + \frac{5}{2}h\right) \right] + O(h^4) \end{aligned} \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial z}(z_0) = \frac{1}{h} & \left[\frac{16}{105}h \varphi(z_0 - h) - \frac{31}{24} \varphi\left(z_0 - \frac{1}{2}h\right) + \frac{29}{24} \varphi\left(z_0 + \frac{1}{2}h\right) \right. \\ & \left. - \frac{3}{40} \varphi\left(z_0 + \frac{3}{2}h\right) + \frac{1}{168} \varphi\left(z_0 + \frac{5}{2}h\right) \right] + O(h^4) \end{aligned} \quad (2.25)$$

Viac o adjustovanej FD aproximácii možno nájsť v prácach Kristek et al. (2002) a Moczo et al. (2004a).

2.4 Metódy simulácie nerovinného voľného povrchu

Simulácia nerovinného voľného povrchu predstavuje jednu z najzložitejších úloh numerického modelovania seizmických vln a seizmického pohybu. Zložitá geometria povrchu Zeme môže výrazne skomplikovať zahrnutie okrajovej podmienky danej vzťahom (2.15). Zahrnutie okrajovej podmienky je okrem typu prostredia (napr. elastické, viskoelastické) ovplyvnené aj charakteristikami modelu popisujúceho daný problém, ako je formulácia základných vzťahov kontinua, voľba konečno-diferenčnej siete a jej geometria.

Na základe uvedených vlastností možno metódy simulácie nerovinného voľného povrchu, s ktorými sa bližšie oboznámime v tejto podkapitole, rozdeliť do troch hlavných skupín: FD metódy využívajúce karteziánske súradnice, FD metódy využívajúce krivočiare súradnice a hybridné metódy, využívajúce kombináciu FDM a inej výpočtovej metódy.

2.4.1 FD schémy v karteziánskych súradniciach

Najjednoduchším prístupom v prípade karteziánskej siete je aproximácia nerovinného voľného povrchu tzv. schodovitým (staircase) povrchom: skutočná geometria voľného povrchu je nahradená povrchom pozostávajúcim zo stien sieťových buniek. Takýto prístup aplikovali napr. Robertsson (1996), Pitarka a Irikura (1996), Ohminato and Chouet (1997) a ďalší. Uvedený prístup má dva zásadné nedostatky: 1. Na hranách stien dochádza k umelej difrakcii (napr. Muir et al. 1992), 2. Príslušné schémy vyžadujú veľmi jemné vzorkovanie, ktoré musí byť niekoľkokrát jemnejšie ako vzorkovanie vnútri modelu. Problémy možno zmierniť použitím diskontinuitnej priestorovej siete, v ktorej je vnútorná oblasť pokrytá sieťou s väčším priestorovým krokom ako oblasť v blízkosti voľného povrchu (Robertsson and Holliger 1997, Hayashi et al. 2001).

Jeden z prístupov, pri ktorých nedochádza k zdanlivému odrazu seizmických vln, bol prezentovaný v práci Lombard et al. (2008). Použitím formulácie v rýchlosti a napätí na collocated sieti riešili simuláciu 2D nerovinného voľného povrchu pre prípad elastického izotropného kontinua. Ich cieľom bolo nájsť stabilné riešenie pre ľubovoľne tvarované rozhranie, opísateľné hladkou a spojitou funkciou, ktorého presnosť nebude ovplyvnená vzájomnou polohou rozhrania a konečno-diferenčnej siete. K tomu dospeli použitím fiktívnych hodnôt rýchlosti a napätia nad voľným povrchom. Tieto fiktívne hodnoty predstavujú Taylorov rozvoj hraničných riešení s požadovanou mierou presnosti. Na určenie riešení na hranici sú použité derivácie vyšších rádov podmienky voľného povrchu a podmienky kompatibility (Love 1944).

2.4.2 FD schémy v krivočiarych súradniciach

Zabrániť umelej difrakcii seizmických vln možno aj použitím krivočiarych súradníc a ich nasledovným stotožnením s hraničnou plochou. Tento prístup využili pri simulovaní 2D nerovinného voľného povrchu aj Zhang a Chen (2006). Vo svojej práci využili formuláciu v rýchlosti a napätí na collocated sieti. Vhodnou transformáciou premenných previedli reálny tvar rozhrania na rovinný, ktorý bol ďalej používaný pri numerických výpočtoch. Splnenie okrajovej podmienky na vytvorenom rovinnom voľnom povrchu zabezpečili tzv. Traction Imaging metódou, ktorá pri určení hodnôt vektora napätia nad voľným povrchom predpokladá antisymetrické rozloženie jeho hodnôt okolo voľného povrchu, podobne ako v metóde Stress Imaging. V prípade voľného povrchu, ktorý je rovinný len vo výpočtovej oblasti, sa žiadna zo zložiek tenzora napätia na voľnom povrchu nerovná nule a podmienku antisymetrie tak nemožno aplikovať na jednotlivé zložky tenzora napätia, ale na zložky vektora napätia. Metóda Traction Imaging teda predstavuje zovšeobecnenie metódy Stress Imaging pre prípad nerovinného voľného povrchu.

Inými prácami, využívajúcimi krivočiare súradnice, sú práce Appelö a Petersson (2009), Tarrass et al. (2011), Lan a Zhang (2011) a Zhang et al. (2012).

2.4.3 Simulácia voľného povrchu pomocou hybridných metód

Problému implementácie podmienky voľného povrchu v metóde konečných diferencií sa možno vyhnúť pomocou hybridnej kombinácie metódy konečných diferencií s metódou, v ktorej je podmienka voľného povrchu splnená automaticky. Príkladom takej metódy je metóda konečných prvkov (ďalej FEM, podľa anglického finite-element method).

Aplikácia metódy konečných prvkov na daný problém spočíva v rozdelení skúmanej oblasti na menšie podoblasti – konečné prvky. V rámci každého konečného prvku hľadajú funkciu aproximujeme vhodne zvolenou funkciou, jednoznačne definovanou jej hodnotami v pevne zvolených bodoch – uzloch. Diskretizácia problému tak umožňuje nahradiť hľadanie pôvodnej funkcie hľadaním jej hodnôt v uzloch siete. Výhoda metódy konečných prvkov je zrejماً – stotožnenie hranice nespojitosti materiálových parametrov s hranicou prvkov s rozdielnymi charakteristikami umožňuje modelovať aj zložitejšie nerovinné rozhrania. Predovšetkým v 3D prípade je však táto metóda výpočtovo náročná.

Nedostatky jednotlivých výpočtových metód možno eliminovať použitím ich kombinácie – hybridnej metódy. Moczo et al. (1997), Moczo et al. (2007a) a Gális et al. (2008) vyvinuli hybridné metódy kombinujúce FDM a FEM. V práci Moczo et al. (1997)

je to kombinácia FD schémy v posunutí na konvenčnej sieti pre 2D modelovanie. V prácach Moczo et al. (2007a, 2008) ide o kombináciu FD schémy v rýchlosti a napätí na striedavo usporiadanej sieti 4. rádu v priestore a 2. rádu v čase a štandardnej FEM schémy v posunutí 2. rádu v priestore i čase. Prevažná časť výpočtovej oblasti je pokrytá konečno-diferenčnou schémou. Kauzálna komunikácia medzi FD a FE schémou v každej časovej hladine je uskutočňovaná v oblasti, v ktorej sa jednotlivé schémy prekrývajú, t.j. v prechodovej zóne. Gális et al. (2008) navrhli tzv. hladkú prechodovú zónu pozostávajúcu z troch častí: Dirichletovej hranice FEM oblasti, zóny s priemerovaním FEM-FDM a Dirichletovej zóny FDM oblasti. Okrem simulácie seizmického pohybu v prípade nerovinného voľného povrchu možno hybridnú metódu použiť aj na 3D simuláciu spontánneho šírenia trhliny v zlome.

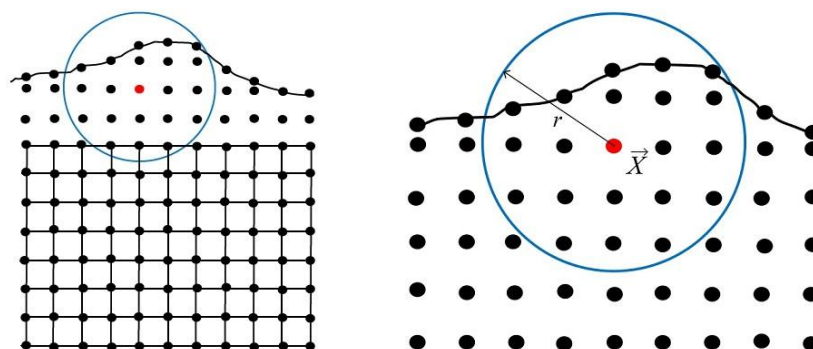
3 SIMULÁCIA VOĽNÉHO POVRCHU POMOCOU HYBRIDNEJ FDM-MLS METÓDY

Napriek významnému pokroku, zaznamenanému v simulovaní nerovinného voľného povrchu v priebehu posledných rokov, predstavuje táto problematika stále jednu z najzložitejších úloh numerického modelovania, ktorá si vyžaduje ďalšiu analýzu, ako aj rozvoj súčasných používaných výpočtových metód.

V tejto kapitole uvedieme hybridnú metódu, využívajúcu kombináciu FDM a váženej metódy najmenších štvorcov, ktorej presnosť a stabilitu je potrebné numericky otestovať. Na vnútornú časť výpočtovej oblasti je aplikovaná FDM a v časti oblasti, nachádzajúcej sa v blízkosti rozhrania, sú veličiny vlnového poľa, v našom prípade zložky vektora rýchlosti a tenzora napätia, aproximované váženou metódou najmenších štvorcov. V práci použijeme tzv. MLS aproximáciu (z anglického moving least squares approximation), t.j. jednotlivé váhové koeficienty budeme uvažovať ako funkcie bodu, v ktorom príslušnú veličinu aproximujeme. Po diskretizácii veličín v blízkosti voľného povrchu vyjadríme priestorové derivácie nájdených MLS aproximácií. Uvedenú hybridnú metódu možno nájsť v práci Etemadsaeed (2013).

3.1 MLS aproximácia zložky tenzora napätia alebo vektora rýchlosti posunutia

Uvažujme nerovinný voľný povrch zobrazený na Obr. 3.1.



Obr. 3.1 Nerovinné rozhranie prostredí kvapalina/vzduch alebo pevná látka/vzduch.
Vľavo: Pokrytie výpočtovej oblasti priestorovou sieťou.
Vpravo: Voľba bodov \bar{X}_I patriacich kruhovej oblasti s polomerom r so stredom v bode \bar{X} .
Obrázok prevzatý z rukopisu Leily Etemadsaeed (2013).

Numerické riešenie pohybovej rovnice kontinua a Hookeovho zákona v blízkosti rozhrania vyžaduje diskretizáciu derivácií jednotlivých zložiek vektora rýchlosti a tenzora napätia v bodoch siete, a teda aj diskretizáciu veličín samotných. Pre tieto účely použijeme spomínanú MLS aproximáciu.

Uvažujme veličinu u vlnového poľa v bode $\vec{X} = [x, y, z]$, t.j. $u(\vec{X})$, a vyjadrime ju takto:

$$u(\vec{X}) \cong \tilde{u}(\vec{X}) \cong \sum_{j=1}^m p_j(\vec{X}) a_j(\vec{X}) = \vec{p}(\vec{X}) \vec{a}(\vec{X}). \quad (3.1)$$

Veličinu $u(\vec{X})$ možno chápať ako zložku vektora rýchlosti alebo tenzora napätia a $\tilde{u}(\vec{X})$ predstavuje jej diskretnú aproximáciu v bode \vec{X} .

Vyjadrime vektory $\vec{p}(\vec{X})$ a $\vec{a}(\vec{X})$ v tvare

$$\begin{aligned} \vec{p}(\vec{X}) &\equiv [1, x, y, z, xy, xz, yz, x^2, y^2, z^2, \dots]_{1 \times m}, \\ \vec{a}^T(\vec{X}) &\equiv [a_1(\vec{X}), \dots, a_m(\vec{X})], \end{aligned} \quad (3.2)$$

pričom $\vec{p}(\vec{X})$ je polynomický bázový vektor a $\vec{a}(\vec{X})$ je vektor neznámych koeficientov, ktorých hodnotu je potrebné určiť. Ak uvažujeme 3D prípad a obmedzíme sa na použitie lineárnej bázy s $m = 4$ alebo kvadratickej bázy s $m = 10$, polynomický bázový vektor nadobudne tvar

$$\vec{p}(\vec{X}) = [1, x, y, z] \text{ pre } m = 4, \quad (3.3)$$

$$\vec{p}(\vec{X}) = [1, x, y, z, x^2, y^2, z^2, xy, xz, zy] \text{ pre } m = 10. \quad (3.4)$$

Miera presnosti použitej aproximácie závisí od voľby vektora $\vec{a}(\vec{X})$. Optimálne hodnoty neznámych koeficientov $a_j(\vec{X})$; $j \in \{1, \dots, m\}$ určíme využitím MLS metódy – minimalizáciou súčtu druhých mocnín rozdielu pôvodnej veličiny u a aproximatívnej veličiny \tilde{u} , pre násobených príslušnými váhovými koeficientmi (Lancaster and Salkauskas 1981). Pri výpočte použijeme hodnoty $u(\vec{X}^{(i)})$ a $\tilde{u}(\vec{X}^{(i)})$ v okolitých bodoch $\vec{X}^{(i)}$; $i \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$, v kruhovej oblasti so stredom v bode \vec{X} a polomerom r (Obr. 3.1). Ak uvažujeme

$$\tilde{u}(\vec{X}^{(i)}) = \vec{p}(\vec{X}^{(i)}) \vec{a}(\vec{X}), \quad (3.5)$$

hľadanú funkciu, ktorú je potrebné minimalizovať, možno vyjadriť v tvare

$$\begin{aligned}
F(\vec{a}) &\equiv \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n w^{(i)}(\vec{X}) \left[\tilde{u}(\vec{X}^{(i)}) - u(\vec{X}^{(i)}) \right]^2 \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n w^{(i)}(\vec{X}) \left[\bar{p}(\vec{X}^{(i)}) \vec{a}(\vec{X}) - u(\vec{X}^{(i)}) \right]^2.
\end{aligned} \tag{3.6}$$

$w^{(i)}(\vec{X})$ sú váhové koeficienty, ktorým sa budeme bližšie venovať neskôr v tejto kapitole.

Rovnosť (3.6) možno vyjadriť v tvare

$$\begin{aligned}
&F(\vec{a}) \\
&= \frac{1}{2} \left[w^{(1)} \left\{ \bar{p}(\vec{X}^{(1)}) \vec{a}(\vec{X}) - u(\vec{X}^{(1)}) \right\}^2 + \dots + w^{(n)} \left\{ \bar{p}(\vec{X}^{(n)}) \vec{a}(\vec{X}) - u(\vec{X}^{(n)}) \right\}^2 \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[w^{(1)} \left\{ \bar{p}(\vec{X}^{(1)}) \vec{a}(\vec{X}) - u(\vec{X}^{(1)}) \right\}, \dots, w^{(n)} \left\{ \bar{p}(\vec{X}^{(n)}) \vec{a}(\vec{X}) - u(\vec{X}^{(n)}) \right\} \right] \\
&\quad \left[\bar{p}(\vec{X}^{(1)}) \vec{a}(\vec{X}) - u(\vec{X}^{(1)}), \dots, \bar{p}(\vec{X}^{(n)}) \vec{a}(\vec{X}) - u(\vec{X}^{(n)}) \right]^T \\
&= \frac{1}{2} \vec{b} \mathbf{W} \vec{b}^T,
\end{aligned} \tag{3.7}$$

kde sme zaviedli značenie

$$\vec{b} \equiv \left[\bar{p}(\vec{X}^{(1)}) \vec{a}(\vec{X}) - u(\vec{X}^{(1)}), \dots, \bar{p}(\vec{X}^{(n)}) \vec{a}(\vec{X}) - u(\vec{X}^{(n)}) \right]$$

a

$$\mathbf{W} \equiv \begin{pmatrix} w^{(1)}(\vec{X}) & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \dots & w^{(n)}(\vec{X}) \end{pmatrix}. \tag{3.8}$$

Stĺpcový vektor \vec{b}^T možno prostredníctvom matematických úprav vyjadriť v tvare

$$\begin{aligned}
\vec{b}^T &= \begin{pmatrix} \bar{p}(\vec{X}^{(1)}) \vec{a}(\vec{X}) - u(\vec{X}^{(1)}) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \bar{p}(\vec{X}^{(n)}) \vec{a}(\vec{X}) - u(\vec{X}^{(n)}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{p}(\vec{X}^{(1)}) \vec{a}(\vec{X}) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \bar{p}(\vec{X}^{(n)}) \vec{a}(\vec{X}) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} u(\vec{X}^{(1)}) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ u(\vec{X}^{(n)}) \end{pmatrix} \\
&= \mathbf{P} \vec{a}(\vec{X}) - \vec{u},
\end{aligned} \tag{3.9}$$

kde

$$\vec{u}^T \equiv \left[u(\vec{X}^{(1)}), \dots, u(\vec{X}^{(n)}) \right] \tag{3.10}$$

je stĺpcový vektor, tvorený hodnotami veličiny u v okolitých bodoch $\vec{X}^{(i)}$, a

$$\mathbf{P} \equiv \begin{pmatrix} p_1(\vec{X}^{(1)}) & \dots & p_m(\vec{X}^{(1)}) \\ \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \dots & \cdot \\ p_1(\vec{X}^{(n)}) & \dots & p_m(\vec{X}^{(n)}) \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

je matica, ktorej riadky sú tvorené hodnotami bázového vektora v okolitých bodoch $\vec{X}^{(i)}$. Vektor \vec{b} bude potom daný vzťahom $\vec{b} = \{ \mathbf{P}\vec{a}(\vec{X}) - \vec{u} \}^T$ a rovnosť (3.7) prejde do tvaru

$$F(\vec{a}) = \frac{1}{2} \{ \mathbf{P}\vec{a}(\vec{X}) - \vec{u} \}^T \mathbf{W} \{ \mathbf{P}\vec{a}(\vec{X}) - \vec{u} \}. \quad (3.12)$$

Funkcia $F(\vec{a})$ nadobúda minimum v bode, v ktorom je nulová jej prvá derivácia. Hľadané hodnoty neznámych parametrov možno určiť z rovníc

$$\frac{\partial F(\vec{a})}{\partial a_j} = 0. \quad (3.13)$$

Pri derivácii vektora \vec{b}^T , daného vzťahom (3.9), podľa neznámeho koeficientu $a_j(\vec{X})$ dostávame z pôvodného vektora $\vec{a}(\vec{X})$, rozmeru $m \times 1$, jednotkový vektor rovnakého rozmeru s jediným nenulovým prvkom na j -tom mieste a z pôvodného výrazu $\mathbf{P}\vec{a}(\vec{X})$ dostávame j -ty stĺpec matice \mathbf{P} , označme ho $(\mathbf{P}_{\cdot,j})^T = [p_j(\vec{X}^{(1)}), \dots, p_j(\vec{X}^{(n)})]$. Z vektora \vec{b} , ktorý možno vyjadriť v tvare

$$\vec{b} = \{ \mathbf{P}\vec{a}(\vec{X}) - \vec{u} \}^T = \{ \mathbf{P}\vec{a}(\vec{X}) \}^T - \vec{u}^T = \vec{a}^T(\vec{X}) \mathbf{P}^T - \vec{u}^T, \quad (3.14)$$

dostávame pri derivácii podľa neznámeho koeficientu $a_j(\vec{X})$ z pôvodného vektora $\vec{a}^T(\vec{X})$ riadkový jednotkový vektor s nenulovým prvkom na j -tom mieste a z výrazu $\vec{a}^T(\vec{X}) \mathbf{P}^T$ j -ty riadok matice \mathbf{P}^T , označme ho $\mathbf{P}_{j\cdot}^T = [p_j(\vec{X}^{(1)}), \dots, p_j(\vec{X}^{(n)})]$.

Keďže $(\mathbf{P}_{\cdot,j})^T = \mathbf{P}_{j\cdot}^T$, deriváciou rovnosti (3.12) dostávame

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F(\vec{a})}{\partial a_j} &= \frac{1}{2} (\mathbf{P}_{\cdot j})^T \mathbf{W} \{ \mathbf{P} \vec{a}(\vec{X}) - \vec{u} \} + \frac{1}{2} \{ \mathbf{P} \vec{a}(\vec{X}) - \vec{u} \}^T \mathbf{W} \mathbf{P}_{\cdot j} \\
&= \frac{1}{2} \left[(\mathbf{P}_{\cdot j})^T \mathbf{W} \mathbf{P} \vec{a}(\vec{X}) + \{ \mathbf{P} \vec{a}(\vec{X}) \}^T \mathbf{W} \mathbf{P}_{\cdot j} \right] \\
&\quad - \frac{1}{2} \left[(\mathbf{P}_{\cdot j})^T \mathbf{W} \vec{u} + \vec{u}^T \mathbf{W} \mathbf{P}_{\cdot j} \right] \\
&= 0
\end{aligned} \tag{3.15}$$

S vyžitím rovností

$$\begin{aligned}
\{ (\mathbf{P}_{\cdot j})^T \mathbf{W} \mathbf{P} \vec{a}(\vec{X}) \}^T &= \{ \mathbf{P} \vec{a}(\vec{X}) \}^T \{ (\mathbf{P}_{\cdot j})^T \mathbf{W} \}^T \\
&= \{ \mathbf{P} \vec{a}(\vec{X}) \}^T \mathbf{W}^T \mathbf{P}_{\cdot j} = \{ \mathbf{P} \vec{a}(\vec{X}) \}^T \mathbf{W} \mathbf{P}_{\cdot j}
\end{aligned} \tag{3.16}$$

$$\begin{aligned}
\{ (\mathbf{P}_{\cdot j})^T \mathbf{W} \vec{u} \}^T &= \vec{u}^T \{ (\mathbf{P}_{\cdot j})^T \mathbf{W} \}^T \\
&= \vec{u}^T \mathbf{W}^T \mathbf{P}_{\cdot j} = \vec{u}^T \mathbf{W} \mathbf{P}_{\cdot j},
\end{aligned}$$

a skutočnosti, že výrazy $(\mathbf{P}_{\cdot j})^T \mathbf{W} \mathbf{P} \vec{a}(\vec{X})$ a $(\mathbf{P}_{\cdot j})^T \mathbf{W} \vec{u}$ sú rozmeru 1×1 dostávame zo vzťahu (3.15)

$$(\mathbf{P}_{\cdot j})^T \mathbf{W} \mathbf{P} \vec{a}(\vec{X}) = (\mathbf{P}_{\cdot j})^T \mathbf{W} \vec{u}. \tag{3.17}$$

V rovnostiach, uvedených vo vzťahu (3.16), sme využil že $\mathbf{W}^T = \mathbf{W}$, čo vyplýva zo symetrie matice \mathbf{W} . Z derivácie funkcie $F(\vec{a})$ podľa všetkých parametrov $a_j(\vec{X})$; $j \in \{1, \dots, m\}$, dostávame m rovníc, ktoré možno spoločne vyjadriť v tvare

$$\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P} \vec{a}(\vec{X}) = \mathbf{P}^T \mathbf{W} \vec{u}. \tag{3.18}$$

Jednoduchými matematickými úpravami výrazu (3.18) získavame pre optimalizovaný vektor neznámych koeficientov $\vec{a}(\vec{X})$ vyjadrenie

$$\vec{a}(\vec{X}) = (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1} \mathbf{P}^T \mathbf{W} \vec{u}, \tag{3.19}$$

prostredníctvom ktorého možno určiť hľadanú diskretnu aproximáciu $\tilde{u}(\vec{X})$ veličiny $u(\vec{X})$ v blízkosti voľného povrchu. Po dosadení vzťahu (3.19) do vzťahu (3.1) táto hľadaná diskretná aproximácia nadobudne tvar

$$\tilde{u}(\vec{X}) = \vec{p}(\vec{X}) (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1} \mathbf{P}^T \mathbf{W} \vec{u}. \tag{3.20}$$

3.2 Prvá priestorová derivácia aproximatívnej veličiny

V podkapitole 3.1 sme prezentovali metódu aproximácie veličín vlnového poľa, ktorú využijeme v časti výpočtovej oblasti, nachádzajúcej sa v blízkosti voľného povrchu. Pohybová rovnica kontinua a Hookeov zákon však predstavujú systém parciálnych diferenciálnych rovníc, ktorých numerické riešenie si okrem aproximácie príslušných veličín, vyžaduje aj aproximáciu derivácií v bodoch priestorovo-časovej siete. Pre tieto účely použijeme v prípade časových derivácií v celej výpočtovej oblasti konečno-diferenčné formuly uvedené v časti 2.2. Pomocou rovnakých formúl aproximujeme aj priestorové derivácie vo vnútornej časti výpočtovej oblasti, zatiaľ čo v časti oblasti, nachádzajúcej sa v blízkosti voľného povrchu, vyjadríme priestorové derivácie prostredníctvom derivácií nájdenej aproximatívnej funkcie.

Deriváciou funkcie $\tilde{u}(\vec{X})$, danej vzťahom (3.20), podľa priestorových premenných dostávame

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{u}(\vec{X})}{\partial x_k} &= \frac{\partial \bar{p}(\vec{X})}{\partial x_k} (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1} \mathbf{P}^T \mathbf{W} \bar{u} \\ &+ \bar{p}(\vec{X}) \frac{\partial (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1}}{\partial x_k} \mathbf{P}^T \mathbf{W} \bar{u} + \bar{p}(\vec{X}) (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1} \mathbf{P}^T \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x_k} \bar{u}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

kde $k \in \{1, 2, 3\}$ a $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$. Pre vyjadrenie derivácie aproximatívnej funkcie $\tilde{u}(\vec{X})$ potrebujeme najprv určiť deriváciu výrazu $(\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1}$. Využijeme pri tom, že

$$(\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})(\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1} = \mathbf{I},$$

kde \mathbf{I} je jednotková matica. Deriváciou tejto rovnosti dostávame

$$\frac{\partial (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})}{\partial x_k} (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1} + (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P}) \frac{\partial (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1}}{\partial x_k} = 0,$$

z čoho pre hľadaný výraz vyplýva

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1}}{\partial x_k} &= -(\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1} \frac{\partial (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})}{\partial x_k} (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1} \\ &= -(\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1} \mathbf{P}^T \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x_k} \mathbf{P} (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Vzťah (3.21) potom možno vyjadriť v tvare

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{u}(\vec{X})}{\partial x_k} = & \left\{ \begin{aligned} & \frac{\partial \bar{p}(\vec{X})}{\partial x_k} (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1} \mathbf{P}^T \mathbf{W} \\ & - \bar{p}(\vec{X}) (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1} \mathbf{P}^T \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x_k} \mathbf{P} (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1} \mathbf{P}^T \mathbf{W} \\ & + \bar{p}(\vec{X}) (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1} \mathbf{P}^T \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x_k} \end{aligned} \right\} \vec{u}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Označme

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^k(\vec{X}) \equiv & \frac{\partial \bar{p}(\vec{X})}{\partial x_k} (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1} \mathbf{P}^T \mathbf{W} \\ & - \bar{p}(\vec{X}) (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1} \mathbf{P}^T \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x_k} \mathbf{P} (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1} \mathbf{P}^T \mathbf{W} \\ & + \bar{p}(\vec{X}) (\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P})^{-1} \mathbf{P}^T \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x_k}, \end{aligned} \quad (3.24)$$

kde vektor $\mathbf{D}^k(\vec{X})$, rozmeru $1 \times n$, predstavuje diskretizovaný operátor priestorovej derivácie. Pre aproximáciu derivácií funkcie $u(\vec{X})$ v blízkosti voľného povrchu, danú vzťahom (3.23), tak získavame vyjadrenie

$$\frac{\partial u(\vec{X})}{\partial x_k} \cong \frac{\partial \tilde{u}(\vec{X})}{\partial x_k} = \mathbf{D}^k(\vec{X}) \vec{u}. \quad (3.25)$$

Výpočet vektora $\mathbf{D}^k(\vec{X})$ zahrňuje deriváciu diagonálnej matice \mathbf{W} . Podľa (3.8) je matica \mathbf{W} tvorená váhovými koeficientmi $w^{(i)}(\vec{X})$, ktorým sme zatiaľ nevenovali väčšiu pozornosť. Pojmom váhové koeficienty budeme označovať funkčné hodnoty váhovej funkcie w , závislej od relatívnej vzdialenosti bodu, v ktorom deriváciu aproximujeme a bodu, ktorý pri tom využívame – označme túto relatívnu vzdialenosť s . Derivácia diagonálnej matice \mathbf{W} bude potom tvorená funkčnými hodnotami derivácie váhovej funkcie w , pre ktorú platí

$$\frac{\partial w}{\partial x_k} = \frac{\partial w}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial x_k}. \quad (3.26)$$

Ak s je relatívna vzdialenosť bodov $\vec{X} = [x, y, z]$ a $\vec{X}' = [x', y', z']$, t.j.

$$s = \frac{\|\vec{X} - \vec{X}'\|}{r}, \quad (3.27)$$

potom

$$\frac{\partial s}{\partial x} = \frac{1}{r} \frac{(x - x')}{\|\vec{X} - \vec{X}'\|}, \quad \frac{\partial s}{\partial y} = \frac{1}{r} \frac{(y - y')}{\|\vec{X} - \vec{X}'\|}, \quad \frac{\partial s}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{(z - z')}{\|\vec{X} - \vec{X}'\|} \quad (3.28)$$

V našom prípade využívame pre aproximáciu derivácie v bode \vec{X} okolité body $\vec{X}^{(i)}$. Matica \mathbf{W} bude potom tvorená váhovými koeficientmi

$$w^{(i)}(\vec{X}) = w\left(\frac{\|\vec{X} - \vec{X}^{(i)}\|}{r}\right) = w(s^{(i)}). \quad (3.29)$$

Prvky diagonálnej matice $\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x_k}$, t.j. funkčne hodnoty derivácie funkcie w podľa s

v bodoch $s^{(i)}$, označme ako

$$w'^{(i)}(\vec{X}) = \frac{\partial w(s^{(i)})}{\partial x_k} \quad (3.30)$$

Možné typy použiteľných váhových funkcií w a príslušné parciálne derivácie $\frac{\partial w}{\partial s}$ sú

zobrazené v nasledujúcej tabuľke.

A. Exponenciálny typ	
$w_A = e^{-\left(\frac{s}{a}\right)^2}; a = 0,4$	$\frac{\partial w_A}{\partial s} = -\frac{2s}{a^2} e^{-\left(\frac{s}{a}\right)^2}; a = 0,4$
B. Gaussovská váhová funkcia	
$w_B = \frac{e^{-\left(\frac{s}{a}\right)^2} - e^{-\left(\frac{1}{a}\right)^2}}{1 - e^{-\left(\frac{1}{a}\right)^2}}; a = 1,25$	$\frac{\partial w_B}{\partial s} = -\frac{2s}{a^2} \frac{e^{-\left(\frac{s}{a}\right)^2}}{1 - e^{-\left(\frac{1}{a}\right)^2}}; a = 1,25$
C. Kubický spline	
$w_C = \begin{cases} 4s^3 - 4s^2 + \frac{2}{3}; & s \in \left(0, \frac{1}{2}\right) \\ \frac{4}{3}(1-s)^3; & s \in \left(\frac{1}{2}, 1\right) \end{cases}$	$\frac{\partial w_C}{\partial s} = \begin{cases} 12s^2 - 8s; & s \in \left(0, \frac{1}{2}\right) \\ -4(1-s)^2; & s \in \left(\frac{1}{2}, 1\right) \end{cases}$
D. Kvadratický spline	
$w_D = -3s^4 + 8s^3 - 6s^2 + 1$	$\frac{\partial w_D}{\partial s} = -12s^3 + 24s^2 - 12s$
E. Kubický polynóm podľa práce Karutz (2000)	
$w_E = 2s^3 - 3s^2 + 1$	$\frac{\partial w_E}{\partial s} = 6s^2 - 6s$
F. Regularizovaná váhová funkcia podľa práce Most and Bucher (2005)	
$w_F = \frac{(s^2 + a)^{-2} - (1 + a)^{-2}}{a^{-2} - (1 + a)^{-2}}; a \ll 1$	$\frac{\partial w_F}{\partial s} = \frac{-4s(s^2 + a)^{-3}}{a^{-2} - (1 + a)^{-2}}; a \ll 1$

Tab. 3.1 Prehľad váhových koeficientov použiteľných pri výpočte derivácie veličiny $\tilde{u}(\vec{X})$.

3.3 Formulácia pohybovej rovnice a Hookeovho zákona v rýchlosti a napätí

Jednotlivé metódy simulácie voľného povrchu Zeme, uvedené v častiach 2.3 a 2.4, sa okrem základnej myšlienky riešenia problému, líšili aj v jej samotnej realizácii, ku ktorej patrí aj voľba formulácie základných vzťahov kontinua – pozri vzťahy (1.8) - (1.11). Úplné riešenie týchto parciálnych diferenciálnych rovníc získavame po zohľadnení okrajovej podmienky, danej vzťahom (2.15). Spoločne možno tieto rovnice využiť na vyjadrenie veličín vlnového poľa lokalizovaných v sieťových bodoch na voľnom povrchu. V tejto podkapitole vyjadríme prostredníctvom uvedených vzťahov priestorové derivácie tenzora napätia na voľnom povrchu, ktorých diskretná aproximácia v bodoch priestorovo-časovej siete je potrebná pre účely numerického modelovania seizmického pohybu.

V prezentovanej FDM-MLS metóde použijeme formuláciu v rýchlosti a napätí, danú vzťahom (1.11) :

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + f_i,$$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial t} = \lambda \delta_{ij} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} + \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right).$$

S ohľadom na skutočnosť, že v použitej formulácii vystupuje časová derivácia tenzora napätia, použijeme namiesto okrajovej podmienky, uvedenej v (2.15), jej časovú deriváciu:

$$n_j \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial t} = 0. \quad (3.31)$$

Nech $F(x, y, z) = 0$ je rovnica plochy voľného povrchu. Za predpokladu, že voľný povrch nie je vertikálny, t.j. platí $F(x, y, z) = f(x, y) - z = 0$, možno príslušný normálový vektor

$$\vec{n} = \frac{\nabla F}{|\nabla F|},$$

vyjadriť v tvare

$$\vec{n} = \frac{\left(\frac{\partial F}{\partial x}, \frac{\partial F}{\partial y}, \frac{\partial F}{\partial z} \right)}{\left| \frac{\partial F}{\partial x}, \frac{\partial F}{\partial y}, \frac{\partial F}{\partial z} \right|} = \frac{\left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, -1 \right)}{\sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 + 1}} = \frac{\left(\frac{\partial z}{\partial x}, \frac{\partial z}{\partial y}, -1 \right)}{\sqrt{\left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial y} \right)^2 + 1}}. \quad (3.32)$$

V závislosti od tvaru normálového vektora \vec{n} možno využitím vzťahov (1.11) a (3.31) určiť časové derivácie všetkých zložiek tenzora napätia $\vec{\sigma}(\vec{x}, t)$ v bodoch siete ležiacich na voľnom povrchu. Podľa toho, ktorá zložka normálového vektora je nulová, existuje 7 rôznych orientácií voľného povrchu v danom bode:

$$\begin{aligned}
 & n_x \wedge n_y \wedge n_z \neq 0, \\
 & n_x = 0, n_y \wedge n_z \neq 0, \\
 & n_y = 0, n_x \wedge n_z \neq 0, \\
 & n_z = 0, n_x \wedge n_y \neq 0, \\
 & n_z \neq 0, n_x \wedge n_y = 0, \\
 & n_y \neq 0, n_x \wedge n_z = 0, \\
 & n_x \neq 0, n_y \wedge n_z = 0.
 \end{aligned} \tag{3.33}$$

V dôsledku symetrie tenzora napätia dostaneme pre každú zo siedmich orientácií 6 rovníc.

$n_x \wedge n_y \wedge n_z \neq 0$		$n_x \sigma_{xx} + n_y \sigma_{yx} + n_z \sigma_{zx} = 0$ $n_x \sigma_{xy} + n_y \sigma_{yy} + n_z \sigma_{zy} = 0$ $n_x \sigma_{xz} + n_y \sigma_{yz} + n_z \sigma_{zz} = 0$
$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial t}$	$= -\frac{n_y}{n_x} \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t} - \frac{n_z}{n_x} \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial t}$ $= -\frac{n_y}{n_x} \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) - \frac{n_z}{n_x} \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)$	
$\frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial t}$	$= -\frac{n_z}{n_y} \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial t} - \frac{n_x}{n_y} \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t}$ $= -\frac{n_z}{n_y} \mu \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right) - \frac{n_x}{n_y} \mu \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial y} \right)$	
$\frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial t}$	$= -\frac{n_x}{n_z} \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial t} - \frac{n_y}{n_z} \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial t}$ $= -\frac{n_x}{n_z} \mu \left(\frac{\partial v_z}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) - \frac{n_y}{n_z} \mu \left(\frac{\partial v_z}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial z} \right)$	
$\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t}$	$= -\frac{n_z}{n_y} \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial t} - \frac{n_x}{n_y} \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial t}$ $= -\frac{n_z}{n_y} \mu \left(\frac{\partial v_z}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) - \frac{n_x}{n_y} \left[(\lambda + 2\mu) \frac{\partial v_x}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v_y}{\partial y} + \lambda \frac{\partial v_z}{\partial z} \right]$	
$\frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial t}$	$= -\frac{n_x}{n_z} \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t} - \frac{n_y}{n_z} \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial t}$ $= -\frac{n_x}{n_z} \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) - \frac{n_y}{n_z} \left[(\lambda + 2\mu) \frac{\partial v_y}{\partial y} + \lambda \frac{\partial v_z}{\partial z} + \lambda \frac{\partial v_x}{\partial x} \right]$	
$\frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial t}$	$= -\frac{n_y}{n_x} \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial t} - \frac{n_z}{n_x} \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial t}$ $= -\frac{n_y}{n_x} \mu \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right) - \frac{n_z}{n_x} \left[(\lambda + 2\mu) \frac{\partial v_z}{\partial z} + \lambda \frac{\partial v_x}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v_y}{\partial y} \right]$	

Tab. 3.2 Podmienka voľného povrchu a časové derivácie zložiek tenzora napätia pre

$$\vec{n} = [n_x, n_y, n_z].$$

$n_x = 0, n_y \wedge n_z \neq 0$	$n_y \sigma_{yx} + n_z \sigma_{zx} = 0$ $n_y \sigma_{yy} + n_z \sigma_{zy} = 0$ $n_y \sigma_{yz} + n_z \sigma_{zz} = 0$
$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial t}$	$= (\lambda + 2\mu) \frac{\partial v_x}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v_y}{\partial y} + \lambda \frac{\partial v_z}{\partial z}$
$\frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial t}$	$= -\frac{n_z}{n_y} \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial t} = -\frac{n_z}{n_y} \mu \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right)$
$\frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial t}$	$= -\frac{n_y}{n_z} \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial t} = -\frac{n_y}{n_z} \mu \left(\frac{\partial v_z}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial z} \right)$
$\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t}$	$= -\frac{n_z}{n_y} \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial t} = -\frac{n_z}{n_y} \mu \left(\frac{\partial v_z}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial z} \right)$
$\frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial t}$	$= -\frac{n_y}{n_z} \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial t} = -\frac{n_y}{n_z} \left[\lambda \frac{\partial v_x}{\partial x} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial v_y}{\partial y} + \lambda \frac{\partial v_z}{\partial z} \right]$
$\frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial t}$	$= -\frac{n_y}{n_z} \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t} = -\frac{n_y}{n_z} \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)$

Tab. 3.3 Podmienka voľného povrchu a časové derivácie zložiek tenzora napätia pre $\vec{n} = [0, n_y, n_z]$.

$n_y = 0, n_x \wedge n_z \neq 0$	$n_x \sigma_{xx} + n_z \sigma_{zx} = 0$ $n_x \sigma_{xy} + n_z \sigma_{zy} = 0$ $n_x \sigma_{xz} + n_z \sigma_{zz} = 0$
$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial t}$	$= -\frac{n_z}{n_x} \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial t} = -\frac{n_z}{n_x} \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)$
$\frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial t}$	$= \lambda \frac{\partial v_x}{\partial x} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial v_y}{\partial y} + \lambda \frac{\partial v_z}{\partial z}$
$\frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial t}$	$= -\frac{n_x}{n_z} \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial t} = -\frac{n_x}{n_z} \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)$
$\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t}$	$= -\frac{n_z}{n_x} \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial t} = -\frac{n_z}{n_x} \mu \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right)$
$\frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial t}$	$= -\frac{n_x}{n_z} \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t} = -\frac{n_x}{n_z} \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)$
$\frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial t}$	$= -\frac{n_x}{n_z} \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial t} = -\frac{n_x}{n_z} \left[(\lambda + 2\mu) \frac{\partial v_x}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v_y}{\partial y} + \lambda \frac{\partial v_z}{\partial z} \right]$

Tab. 3.4 Podmienka voľného povrchu a časové derivácie zložiek tenzora napätia pre $\vec{n} = [n_x, 0, n_z]$.

$n_z = 0, n_x \wedge n_y \neq 0$	$n_x \sigma_{xx} + n_y \sigma_{yx} = 0$ $n_x \sigma_{xy} + n_y \sigma_{yy} = 0$ $n_x \sigma_{xz} + n_y \sigma_{yz} = 0$
$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial t}$	$= -\frac{n_y}{n_x} \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t} = -\frac{n_y}{n_x} \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)$
$\frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial t}$	$= -\frac{n_x}{n_y} \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t} = -\frac{n_x}{n_y} \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)$
$\frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial t}$	$= \lambda \frac{\partial v_x}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v_y}{\partial y} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial v_z}{\partial z}$
$\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t}$	$= -\frac{n_x}{n_y} \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial t} = -\frac{n_x}{n_y} \left[(\lambda + 2\mu) \frac{\partial v_x}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v_y}{\partial y} + \lambda \frac{\partial v_z}{\partial z} \right]$
$\frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial t}$	$= -\frac{n_x}{n_y} \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial t} = -\frac{n_x}{n_y} \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)$
$\frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial t}$	$= -\frac{n_y}{n_x} \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial t} = -\frac{n_y}{n_x} \mu \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right)$

Tab. 3.5 Podmienka voľného povrchu a časové derivácie zložiek tenzora napätia pre $\vec{n} = [n_x, n_y, 0]$.

$n_z \neq 0, n_x \wedge n_y = 0$		$n_z \sigma_{zx} = 0$ $n_z \sigma_{zy} = 0$ $n_z \sigma_{zz} = 0$
$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial t}$	$= (\lambda + 2\mu) \frac{\partial v_x}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v_y}{\partial y} + \lambda \frac{\partial v_z}{\partial z}$	
$\frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial t}$	$= \lambda \frac{\partial v_x}{\partial x} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial v_y}{\partial y} + \lambda \frac{\partial v_z}{\partial z}$	
$\frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial t}$	$= 0$ pretože $\sigma_{zz} = 0$	
$\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t}$	$= \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)$	
$\frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial t}$	$= 0$ pretože $\sigma_{yz} = 0$	
$\frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial t}$	$= 0$ pretože $\sigma_{zx} = 0$	

Tab. 3.6 Podmienka voľného povrchu a časové derivácie zložiek tenzora napätia pre $\vec{n} = [0, 0, n_z]$.

$n_y \neq 0, n_x \wedge n_z = 0$		$n_y \sigma_{yx} = 0$ $n_y \sigma_{yy} = 0$ $n_y \sigma_{yz} = 0$
$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial t}$	$= (\lambda + 2\mu) \frac{\partial v_x}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v_y}{\partial y} + \lambda \frac{\partial v_z}{\partial z}$	
$\frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial t}$	$= 0$ pretože $\sigma_{yy} = 0$	
$\frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial t}$	$= \lambda \frac{\partial v_x}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v_y}{\partial y} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial v_z}{\partial z}$	
$\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t}$	$= 0$ pretože $\sigma_{xy} = 0$	
$\frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial t}$	$= 0$ pretože $\sigma_{yz} = 0$	
$\frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial t}$	$= \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)$	

Tab. 3.7 Podmienka voľného povrchu a časové derivácie zložiek tenzora napätia pre $\vec{n} = [0, n_y, 0]$.

$n_x \neq 0, n_y \wedge n_y = 0$		$n_x \sigma_{xx} = 0$ $n_x \sigma_{xy} = 0$ $n_x \sigma_{xz} = 0$
$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial t}$	= 0 pretože $\sigma_{xx} = 0$	
$\frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial t}$	$= \lambda \frac{\partial v_x}{\partial x} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial v_y}{\partial y} + \lambda \frac{\partial v_z}{\partial z}$	
$\frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial t}$	$= \lambda \frac{\partial v_x}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v_y}{\partial y} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial v_z}{\partial z}$	
$\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t}$	= 0 pretože $\sigma_{xy} = 0$	
$\frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial t}$	$= \mu \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right)$	
$\frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial t}$	= 0 pretože $\sigma_{zx} = 0$	

Tab. 3.8 Podmienka voľného povrchu a časové derivácie zložiek tenzora napätia pre $\vec{n} = [n_x, 0, 0]$.

4 VÝSLEDKY

Aproximáciu derivácií MLS metódou sme analyzovali v 1D prípade na striedavo usporiadanej sieti, v ktorej sú veličiny vlnového poľa, t.j. rýchlosť v a napätie σ , striedavo lokalizované v priestorovej sieti. V sieti s priestorovým krokom h budeme uvažovať rýchlosť v v pozíciách (sieťových bodoch alebo bodoch) $z + (2L+1)h/2$; $L = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ a napätie v pozíciách $z + Lh$; $L = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Naším cieľom bolo nájsť váhovou funkciu w , pre ktorú dá MLS metóda rovnaké aproximácie prvej derivácie, aké používa konečno-diferenčná schéma 2. a 4. rádu na striedavo usporiadanej sieti (uvedené v podkapitole 2.2). Deriváciu rýchlosti v v bode z sme aproximovali najprv pomocou jej hodnôt v bodoch $\{z - h/2, z + h/2\}$, potom pomocou jej hodnôt v bodoch $\{z - 3h/2, z - h/2, z + h/2, z + 3h/2\}$. V prvom prípade bolo cieľom získať aproximáciu 2. rádu, v druhom aproximáciu 4. rádu. Uvažovali sme pritom lineárnu i kvadratickú bázu.

4.1 Aproximácia derivácie druhého rádu presnosti

Použitie lineárnej bázy. Pri aproximácii derivácie v bode z pomocou dvoch bodov sme pri použití lineárnej bázy pre operátor priestorovej derivácie dostali vyjadrenie

$$\mathbf{D}^z(z) = \left\{ -\frac{1}{h}, \frac{1}{h} \right\}, \quad (4.1)$$

z čoho pre aproximáciu derivácie vyplýva

$$\frac{\partial v(z)}{\partial z} \cong \frac{\partial \tilde{v}(z)}{\partial z} = \mathbf{D}^z(z) \vec{v} = \frac{1}{h} \left[v\left(z + \frac{h}{2}\right) - v\left(z - \frac{h}{2}\right) \right]. \quad (4.2)$$

Chyba aproximácie (pre jednoduchosť v bode $z = 0$) je

$$\text{Trun Err} \left\{ \mathbf{D}^z(0) \vec{v} \right\} = \frac{1}{24} v^{(3)}(0) h^2 + O(h)^4. \quad (4.3)$$

Aproximácia je aproximáciou druhého rádu presnosti. Vzťahy (4.2) a (4.3) sú zhodné so štandardnými vyjadreniami pre centrovanú aproximáciu prvej priestorovej derivácie v striedavo usporiadanej sieti. Zo vzťahu (4.2) vyplýva, že voľba váhovej funkcie w nemá v MLS metóde vplyv na aproximáciu prvej derivácie druhého rádu. To je veľmi pozitívne zistenie.

Použitie kvadratickej bázy. Zistili sme, že použitie kvadratickej bázy na aproximáciu derivácie pomocou uvažovaného súboru bodov nie je možné. Matica $\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P}$, potrebná na výpočet vektora $\mathbf{D}^z(z)$, je v tomto prípade singulárna a neexistuje k nej inverzná matica. O singularite matice $\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P}$ sa ľahko možno presvedčiť výpočtom jej determinantu.

Vyjadrenia jednotlivých členov použitých v určení vektora $\mathbf{D}^z(z)$ za predpokladu lineárnej a kvadratickej bázy sú uvedené v Tab. 4.1.

Počet bodov v oblasti so stredom v $\vec{X} = z$: $n = 2$	
$\vec{X}^{(1)} = z - h/2, \vec{X}^{(2)} = z + h/2$	
<i>Lineárna báza s $m=2$</i>	<i>Kvadratická báza s $m=3$</i>
$\vec{p}(z) = [1, z]$	$\vec{p}(z) = [1, z, z^2]$
$\frac{\partial \vec{p}(z)}{\partial z} = [0, 1]$	$\frac{\partial \vec{p}(z)}{\partial z} = [0, 1, 2z]$
$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & z - h/2 \\ 1 & z + h/2 \end{pmatrix}$	$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & z - h/2 & (z - h/2)^2 \\ 1 & z + h/2 & (z + h/2)^2 \end{pmatrix}$
$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} w^{(1)} & \\ 0 & w^{(1)} \end{pmatrix} \quad \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial z} = \begin{pmatrix} -w'^{(1)} & \\ 0 & w'^{(1)} \end{pmatrix}$	
$\vec{v} = [v(z - h/2), v(z + h/2)]^T$	

Tab. 4.1 Prehľad základných veličín použitých v určení vektora $\mathbf{D}^z(z)$ pre $n = 2$.

4.2 Aproximácia derivácie štvrtého rádu presnosti

Použitie lineárnej bázy. Pri aproximácii derivácie rýchlosti v v bode z s využitím jej hodnôt v bodoch $\{z - 3h/2, z - h/2, z + h/2, z + 3h/2\}$ v prípade lineárnej bázy pre vektor $\mathbf{D}^z(z)$ dostávame

$$\mathbf{D}^z(z) = \left\{ \begin{array}{l} -\frac{6w^{(1)}w^{(2)} - 3hw'(1)w^{(2)} + 6(w^{(2)})^2 + hw^{(1)}w'(2)}{2h(w^{(1)} + w^{(2)})(w^{(1)} + 9w^{(2)})}, \\ \frac{2(w^{(1)})^2 + 2w^{(1)}w^{(2)} + 9hw'(1)w^{(2)} - 3hw^{(1)}w'(2)}{2h(w^{(1)} + w^{(2)})(w^{(1)} + 9w^{(2)})}, \\ \frac{2(w^{(1)})^2 + 2w^{(1)}w^{(2)} + 9hw'(1)w^{(2)} - 3hw^{(1)}w'(2)}{2h(w^{(1)} + w^{(2)})(w^{(1)} + 9w^{(2)})}, \\ \frac{6w^{(1)}w^{(2)} - 3hw'(1)w^{(2)} + 6(w^{(2)})^2 + hw^{(1)}w'(2)}{2h(w^{(1)} + w^{(2)})(w^{(1)} + 9w^{(2)})} \end{array} \right\} \quad (4.4)$$

a aproximatívne vyjadrenie derivácie tak možno vyjadriť v tvare

$$\mathbf{D}^z(z)\bar{v} = \frac{1}{h} \left\{ \begin{array}{l} A \left[v\left(z + \frac{1}{2}h\right) - v\left(z - \frac{1}{2}h\right) \right] \\ + B \left[v\left(z + \frac{3}{2}h\right) - v\left(z - \frac{3}{2}h\right) \right] \end{array} \right\}, \quad (4.5)$$

kde

$$\begin{aligned} A &= \frac{2(w^{(1)})^2 + 2w^{(1)}w^{(2)} + 9hw'(1)w^{(2)} - 3hw^{(1)}w'(2)}{2h(w^{(1)} + w^{(2)})(w^{(1)} + 9w^{(2)})}, \\ B &= \frac{6w^{(1)}w^{(2)} - 3hw'(1)w^{(2)} + 6(w^{(2)})^2 + hw^{(1)}w'(2)}{2h(w^{(1)} + w^{(2)})(w^{(1)} + 9w^{(2)})}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Na rozdiel od prechádzajúceho prípadu, tvar a presnosť MLS aproximácie závisí od voľby váhovej funkcie w : koeficienty $w^{(1)}$, $w^{(2)}$, $w'(1)$ a $w'(2)$ sú hodnotami váhovej funkcie pre diskrétné bezrozmerné relatívne vzdialenosti $s^{(1)}$ a $s^{(2)}$ – pozri vzťahy (3.27), (3.29) a (3.30). Pre relatívne vzdialenosti platí

$$s^{(1)} = \frac{1}{2r}, \quad s^{(2)} = \frac{3}{2r}. \quad (4.7)$$

Pre zvolenú bázu a váhovú funkciu závisí teda hodnota váhového koeficientu od polomeru kruhovej oblasti r . Ak má byť aproximácia (4.5) zhodná so štandardnou aproximáciou na striedavo usporiadanej sieti, musí byť

$$A = \frac{9}{8}, \quad B = -\frac{1}{24} \quad (4.8)$$

Skúsili sme váhové funkcie uvedené v Tab. 3.1 **Prehľad váhových koeficientov použiteľných pri výpočte derivácie veličiny $\tilde{u}(\bar{X})$** .

a hodnoty polomeru kruhovej oblasti $r = \{4h/2, 15h/8, 7h/4, 13h/8\}$. Ani v jednom prípade sme nedostali správny výsledok.

Zistili sme však veľmi zaujímavú vlastnosť. Po dosadení zodpovedajúcich hodnôt váhových funkcií a hodnôt A a B podľa (4.8) sme zistili, že podmienky (4.6) sú vlastne identické:

$$(w^{(1)})^2 + 82w^{(1)}w^{(2)} + 81(w^{(2)})^2 - 36w'^{(1)}w^{(2)} + 12w^{(1)}w'^{(2)} = 0. \quad (4.9)$$

To je ďalšia zaujímavá vlastnosť MLS aproximácie.

Preto sme postup modifikovali. Ako váhovú funkciu sme zvolili kubický polynóm vo všeobecnom tvare

$$w_G(s) = 1 - as^2 + bs^3 \quad (4.10)$$

a hodnotu polomeru $r = 3h/2$. Po dosadení príslušných váhových koeficientov do podmienky (4.9) sme získali jednu rovnicu pre dva neznáme koeficienty a a b . Na ich určenie preto potrebujeme aditívnu podmienku. V prípade väčšiny váhových funkcií uvedených v Tab. 3.1 **Prehľad váhových koeficientov použiteľných pri výpočte derivácie veličiny $\tilde{u}(\bar{X})$** .

je hodnota váhového koeficientu pre $s=1$ rovná nule. Požadovali sme preto aj v prípade váhovej funkcie (4.10) rovnakú podmienku:

$$w_G(1) = 1 - a + b = 0. \quad (4.11)$$

Takto sme pre koeficienty a a b dostali

$$a = \frac{337}{109}, \quad b = \frac{228}{109} \quad (4.12)$$

a hľadaná váhová funkcia je teda

$$w_G(s) = 1 - \frac{337}{109}s^2 + \frac{228}{109}s^3. \quad (4.13)$$

Táto váhová funkcia je veľmi podobná váhovej funkcii w_E uvedenej v Tab. 3.1 Pre váhové koeficienty $w^{(1)} = w_G(1/3)$ a $w^{(2)} = w_G(1)$ vzťah (4.5) nadobúda požadovaný tvar:

$$\mathbf{D}^z(z)\vec{v} = \frac{1}{h} \left\{ \begin{aligned} & \frac{9}{8} \left[v\left(z + \frac{1}{2}h\right) - v\left(z - \frac{1}{2}h\right) \right] \\ & - \frac{1}{24} \left[v\left(z + \frac{3}{2}h\right) - v\left(z - \frac{3}{2}h\right) \right] \end{aligned} \right\}. \quad (4.14)$$

Použitie kvadratickej bázy. V prípade použitia kvadratickej bázy dostávame

$$\mathbf{D}^z(z) = \left\{ \begin{aligned} & -\frac{48w^{(1)}(w^{(2)})^2 + 27hw^{(1)}(w^{(2)})^2 + h(w^{(1)})^2 w'^{(2)}}{16hw^{(2)} \left[(w^{(1)})^2 + 9w^{(1)}w^{(2)} \right]}, \\ & -\frac{16(w^{(1)})^2 w^{(2)} + 81hw^{(1)}(w^{(2)})^2 + 3h(w^{(1)})^2 w'^{(2)}}{16hw^{(2)} \left[(w^{(1)})^2 + 9w^{(1)}w^{(2)} \right]}, \\ & -\frac{16(w^{(1)})^2 w^{(2)} + 81hw^{(1)}(w^{(2)})^2 + 3h(w^{(1)})^2 w'^{(2)}}{16hw^{(2)} \left[(w^{(1)})^2 + 9w^{(1)}w^{(2)} \right]}, \\ & \left. \frac{48w^{(1)}(w^{(2)})^2 + 27hw^{(1)}(w^{(2)})^2 + h(w^{(1)})^2 w'^{(2)}}{16hw^{(2)} \left[(w^{(1)})^2 + 9w^{(1)}w^{(2)} \right]} \right\}, \quad (4.15)$$

$$\mathbf{D}^z(z)\vec{v} = \frac{1}{h} \left\{ \begin{aligned} & C \left[v\left(z + \frac{1}{2}h\right) - v\left(z - \frac{1}{2}h\right) \right] \\ & + D \left[v\left(z + \frac{3}{2}h\right) - v\left(z - \frac{3}{2}h\right) \right] \end{aligned} \right\}, \quad (4.16)$$

a

$$\begin{aligned} C &= \frac{16(w^{(1)})^2 w^{(2)} + 81hw^{(1)}(w^{(2)})^2 + 3h(w^{(1)})^2 w'^{(2)}}{16hw^{(2)} \left[(w^{(1)})^2 + 9w^{(1)}w^{(2)} \right]}, \\ D &= \frac{48w^{(1)}(w^{(2)})^2 + 27hw^{(1)}(w^{(2)})^2 + h(w^{(1)})^2 w'^{(2)}}{16hw^{(2)} \left[(w^{(1)})^2 + 9w^{(1)}w^{(2)} \right]}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Keďže pre hodnotu polomeru $r = 3h/2$ je $w^{(2)} = 0$ (t.j. podmienka (4.11)), v podmienke (4.17) dostávame nulový menovateľ. To znamená, že pre túto hodnotu polomeru váhovou funkciu (4.13) nie je možné použiť v prípade kvadratickej bázy.

Poznamenajme, že váhové funkcie uvedené v Tab. 3.1 **Prehľad váhových koeficientov použiteľných pri výpočte derivácie veličiny $\tilde{u}(\bar{X})$** .

nevedú k požadovanej aproximácii prvej derivácie.

Pre úplnosť uvádzame prehľadnú tabuľku základných veličín použitých v určení vektora $\mathbf{D}^z(z)$ - Tab. 4.2

Počet bodov v oblasti so stredom v $\bar{X} = z$: $n = 4$	
$\bar{X}^{(1)} = z - 3h/2, \bar{X}^{(2)} = z - h/2, \bar{X}^{(3)} = z + h/2, \bar{X}^{(4)} = z + 3h/2$	
<i>Lineárna báza s $m=2$</i>	<i>Kvadratická báza s $m=3$</i>
$\bar{p}(z) = [1, z]$	$\bar{p}(z) = [1, z, z^2]$
$\frac{\partial \bar{p}(z)}{\partial z} = [0, 1]$	$\frac{\partial \bar{p}(z)}{\partial z} = [0, 1, 2z]$
$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & z - 3h/2 \\ 1 & z - h/2 \\ 1 & z + h/2 \\ 1 & z + 3h/2 \end{pmatrix}$	$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & z - 3h/2 & (z - 3h/2)^2 \\ 1 & z - h/2 & (z - h/2)^2 \\ 1 & z + h/2 & (z + h/2)^2 \\ 1 & z + 3h/2 & (z + 3h/2)^2 \end{pmatrix}$
$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} w^{(2)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & w^{(2)} \end{pmatrix}$	$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial z} = \begin{pmatrix} -w'^{(2)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -w'^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w'^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & w'^{(2)} \end{pmatrix}$
$\vec{v} = [v(z - 3h/2), v(z - h/2), v(z + h/2), v(z + 3h/2)]^T$	

Tab. 4.2 Prehľad základných veličín použitých v určení vektora $\mathbf{D}^z(z)$ pre $n = 4$.

ZÁVER

V tejto bakalárskej práci sme

- stručne uviedli metódu konečných diferencií a konečno-diferenčnú aproximáciu derivácií,
- stručne uviedli problém simulácie podmienky voľného povrchu v metóde konečných diferencií,
- charakterizovali základné prístupy k simulácii rovinného a nerovinného voľného povrchu,
- podrobne rozpracovali MLS (Moving Least Squares) aproximáciu priestorovej derivácie veličiny pomocou hodnôt veličiny v bodoch nerovnomerne rozmiestnených v priestore na základe návrhu Leily Etemadsaeed,
- analyzovali MLS aproximáciu v 1D prípade a za predpokladu bodov rozmiestnených v striedavo usporiadanej sieti kvôli plánovanej hybridnej kombinácii MLS aproximácie a štandardnej konečno-diferenčnej schémy na striedavo usporiadanej sieti,
- zistili dve dôležité vlastnosti MLS metódy vo vzťahu k aproximácii prvej derivácie druhého a štvrtého rádu presnosti,
- našli váhovou funkciu, ktorá v prípade lineárnej bázy dáva MLS aproximáciu zhodnú so štandardnou aproximáciou na striedavo usporiadanej sieti druhého a štvrtého rádu.

Celá teória prezentovaná v bakalárskej práci predstavuje východisko pre ďalšiu analýzu vlastností MLS aproximácie (napr. vplyv voľby bázevého vektora, vplyv priestorového rozmiestnenia bodov použitých na aproximáciu derivácie) a napokon pre implementáciu hybridnej kombinácie MLS aproximácie a konečno-diferenčnej schémy na striedavo usporiadanej sieti do výpočtového algoritmu a výpočtového programu. V tejto hybridnej aproximácii bude MLS aproximácia použitá v tých bodoch siete blízko voľného povrchu, pre ktoré nebude k dispozícii úplná množina susedných bodov nutná na aplikáciu štandardnej centrovanej konečno-diferenčnej aproximácie.

Zoznam použitej literatúry

- Appelö, D., N. A. Petersson 2009. A stable finite difference method for the elastic wave equation on complex geometries with free surfaces. *Commun. Comput. Phys.* 5, 84-107.
- Etemadsaeed, L. 2013. Simulation of wave propagation in presence of topography by using hybrid finite difference and moving least square method. *Nepublikované poznámky*. Bratislava.
- Gális, M. 2008. Hybridná MKD-MKP metóda simulácie zemetrasení a seizmického pohybu. *Dizertačná práca*. FMFI UK. Bratislava.
- Galis, M., P. Moczo, J. Kristek 2008. A 3-D hybrid finite-difference-finite-element viscoelastic modelling of seismic wave motion. *Geophys. J. Int.* 175, 153-184.
- Hayashi, K., D. R. Burns, M. N. Toksöz 2001. Discontinuous-grid finite-difference seismic modeling including surface topography. *Bull. Seism. Soc. Am.* 91, 1750-1764.
- Karutz, H. 2000. Adaptive Kopplung der Elementfreien Galerkin-Methode mit der Methode der Finiten Elemente bei Rissfortschrittsproblemen. *Dizertačná práca*. Ruhr-Universität Bochum. Nemecko.
- Kristek, J., P. Moczo 2014. FDSim3D. http://www.nuquake.eu/Computer_Codes/FDSim/
- Kristek, J., P. Moczo, R. J. Archuleta 2002. Efficient methods to simulate planar free surface in the 3D 4th-order staggered-grid finite-difference schemes. *Studia Geoph. Geod.* 46, 355-381.
- Lan, H., Z. Zhang 2011. Three-dimensional wave-field simulation in heterogeneous transversely isotropic medium with irregular free surface. *Bull. Seism. Soc. Am.* 101, 1354-1370.
- Lancaster, P., K. Salkauskas 1981. Surface generated by moving least squares methods. *Mathematics of Computation* 87, 141-158.
- Levander, A. R. 1988. Fourth-order finite-difference P-SV seismograms. *Geophysics* 53, 1452-1436.
- Lombard, B., J. Piraux, C. Gélis, J. Virieux 2008. Free and smooth boundaries in 2-D finite-difference schemes for transient elastic waves. *Geophys. J. Int.* 172, 252-261.

- Love, A. 1944. A Treatise on the Mathematical Theory of Elasticity. *Dover Publications*, New York, USA.
- Moczo, P. 2006. Introduction to Theoretical Seismology.
http://www.fyzikazeme.sk/mainpage/stud_mat/Introduction_to_Theoretical_Seismology.pdf
- Moczo, P., E. Bystrický, J. Kristek, J. M. Carcione, M. Bouchon 1997. Hybrid modeling of P-SV seismic motion at inhomogeneous viscoelastic topographic structures. *Bull. Seism. Soc. Am.* 87, 1305-1323.
- Moczo, P., J. Kristek, M. Galis 2004a. Simulation of the planar free surface with near-surface lateral discontinuities in the finite-difference modeling of seismic motion. *Bull. Seism. Soc. Am.* 94, 760-768.
- Moczo, P., J. Kristek, M. Galis 2014. The Finite-difference Modelling of Earthquake Motions. *Cambridge University Press*.
- Moczo, P., J. Kristek, P. Pažák, M. Balažovjeh 2007a. The finite-difference and finite-element modeling of seismic wave propagation and earthquake motion. *Acta Physica Slovaca* 57, 177-406.
- Moczo, P., J. O. A. Robertsson, L. Eisner 2007b. The finite-difference time-domain method for modeling of seismic wave propagation. In R.-S. Wu, V. Maupin (eds.), *Advances in wave propagation in heterogeneous Earth*, 421-516. *Advances in Geophysics* Vol. 48, R. Dmowska (ed.), Elsevier – Academic Press.
- Most, T., C. Bucher 2005. A moving least squares weighting function for the element-free Galerkin method which almost fulfills essential boundary conditions. *Struct. Eng. Mech.* 21, 315-332.
- Muir, F., J. Dellinger, J. T. Etgen, D. Nichols 1992. Modeling elastic fields across irregular boundaries. *Geophysics* 57, 1189-1193.
- Ohminato, T., B. A. Chouet 1997. A free-surface boundary condition for including 3D topography in the finite-difference method. *Bull. Seism. Soc. Am.* 87, 494-515.
- Pitarka, A., K. Irikura 1996. Modeling 3D surface topography by finite-difference method: Kobe-JMA station site, Japan, case study. *Geophys. Res. Lett.* 23, 2729-2732.

- 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.
- Robertsson, J. O. A., K. Holliger 1997. Modeling of seismic wave propagation near the earth's surface. *Phys. Earth Planet. Int.* 104, 193-211.
- Tarras, I., L. Giraud, P. Thore 2011. New curvilinear scheme for elastic wave propagation in presence of curved topography. *Geophys. Prosp.* 59, 889-906.
- Zhang, W., X. Chen 2006. Traction image method for irregular free surface boundaries in finite difference seismic wave simulation. *Geophys. J. Int.* 167, 337-353.
- Zhang, W., X. Chen, Z. Zhang 2012. Three-dimensional elastic wave numerical modelling in the presence of surface topography by a collocated-grid finite-difference method on curvilinear grid. *Geophys. J. Int.* 190, 358-378.