

基於微分再生核之無網格法

王永明

中華民國 台灣 台南市
國立成功大學
土木工程學系

摘要

本文主要探討以微分再生核應用於無網格法來建立一套便於解析各種力學問題之數值模擬法。文中首先以微分再生條件以及移動最小二乘法之觀念推導出微分再生核法，可以由各離散點資料簡便的計算任意點之各階導數。其次本文利用微分再生核配合置點法建立一套數值模擬方法可用來解析任意之線性偏微分方程組。因採用置點法，不需如一般有限元素法需要元素之分割或積分網格之建立，本文所建立之數值模擬方法為真實之無網格法。文中最後以一個一維邊界值問題及一個二維彈性體開孔附近應力分析為例說明此一方法之應用。

關鍵詞：無網格法、微分再生核、移動最小二乘法。

一、前言

在力學問題之數值模擬上，有限元素法經數十年的發展，因其可廣泛處理各種不同數值問題之計算，已成為計算力學領域之主流。然而隨著計算機計算能力的增進以及所處理問題複雜度的增加，有限元素法因需要將所處理物理區間以元素網格表示，而所得結果之精度又往往與網格之構形有關，相對於在實際數值計

算上所耗費之資源，其在資料之輸入、前處理、元素網格之產生以及一些需要調整元素網格之問題的處理上所需要大量人工及資源往往成為工作上之瓶頸。如何節省人工、簡化處理程序，成為近年來計算力學應用上受到相當關注之研究課題。無元素計算法為近年來在計算力學的領域漸受重視之一數值方法，此類方法係以節點為導向，在每一節點附近採用局部之加權函數以及連續之近似函數來模擬節點附近的函數。因其近似函數具有較高的平滑度且精度的調整較具彈性，所得結果之收斂性一般較同階數之有限元素法為高，且因僅需節點資料不需元素網格之劃分，在計算資料之處理上可節省相當多的人力。此類方法在節點之調整上更具彈性，因並無元素之觀念，不像有限元素法精度常受到元素構形之限制，因此的空間中可自由佈點，在一些大變形問題或變動邊界等相關問題之分析上，因不需重新產生元素網格，在應用上遠較傳統之有限元素法為佳。基於以上優點，無元素法在近年吸引許多學者的注意，其發展也相當快速，其中較具代表性的有平滑顆粒流體力學(smooth particle hydrodynamics SPH)[1, 2]，擴散元素(diffuse element)[3]，再生核顆粒法(reproducing kernel particle method RKPM)[4]，移動最小二乘法(moving least-square methods MLS)[5]，無元素蓋勒金法(element free Galerkin EFG)[6-7]等。

無元素法中近似函數的建構一般可分為兩大類方法，其一為由鄰近節點值之加權求值，例如 SPH, RKPM, EFG 等，另一為利用最小二乘法，例如 MLS。實際上此兩類方法常是相關而且可以互相解釋的，其中最好的例子當為再生核法

(reproducing kernel approximation)[8]。再生核法為在局部區域以移動最小二乘法產生一具全域高階導數連續之近似函數，其優點為所得函數可完全再生所要求階數之多項式函數，因此較易掌握分析所需之精度，且在區域中可自由選取節點因此可處理複雜幾何形狀之區域。但其缺點為計算較為繁複，因此較為耗時，尤其是其微分牽涉到反矩陣函數之微分因此計算高階導數更是費時。由於以上因素，一般的無元素法仍然使用 Galerkin 之弱積分式來處理微分方程式以降低所需微分次數。基於弱積分式需對區域積分之需要一般的無元素法仍然需建立一積分網格，無法達到真正"無網格"之境界，而且處理數值積分仍需耗費大量之計算時間。另一可行的無元素法為置點法(point collocation)直接在節點上採用再生核近似函數來滿足局部的微分方程[9]。置點法為真正的無網格法，應用上甚為簡便，節點之佈點以及增減亦非常自由，但其缺點為需要較高階之導數的計算。由以上所述可知，近似函數之微分計算為無元素法應用中之一關鍵因素，本文利用微分再生之觀念，配合移動最小二乘法建立一微分再生核計算法(differential reproducing kernel method)，既保有再生核法之自由佈點以及高精度近似函數的特性，又能夠快速的計算函數之各階導數。利用微分再生核配合置點法，本文建立了一套簡便的數值模擬程序，可用來分析任意之線性偏微分方程組邊界值問題。以下第二節將簡單介紹再生核近似函數之推導以及在函數微分上所遭遇之困難。第三節為利用微分再生條件推導微分再生核計算法並說明如何利用此一算法配合置點法建立微分方程式之數值分析程序。第四節以一個一維邊界值問題及一

為無元素數值分析中之一重要方法。

在數值分析應用上常需計算函數之微分，一般論文中均採用對形狀函數直接微分的方式來計算其各階導數。由(6)式知再生核近似函數之微分為

$$\frac{\partial u^h(x)}{\partial x} = \frac{\partial N(x)}{\partial x} u = \left(p^T(0) \frac{\partial M^{-1}(x)}{\partial x} B(x) + p^T(0) M^{-1}(x) \frac{\partial B(x)}{\partial x} \right) u \quad (16)$$

而其中反矩陣之微分

$$\frac{\partial M^{-1}(x)}{\partial x} = -M^{-1}(x) \frac{\partial M(x)}{\partial x} M^{-1}(x) \quad (17)$$

(16)式顯示再生核函數之微分計算相當繁雜，高階微分之計算牽涉項次更以等比級數增加，因此在數值計算上，微分之運算耗費大量計算時間成為此類近似法之主要缺點。如何建構一快速有效之微分計算法以替代直接微分法成為許多學者研究之重點[9]。本文在下一節即提出以微分再生之條件來建立一微分計算法，無論任何階數之微分計算，所需計算項次與近似函數之計算一樣，而精度與直接微分相同。

三、 微分再生核法

為計算再生核函數之微分，首先觀察再生核形狀函數之直接微分所具有的特性，由對函數再生條件(11)式微分可知 $N_l(x)$ 滿足下式

$$\sum_{l=1}^N \frac{\partial N_l(x)}{\partial x} x_l^k = kx^{k-1}, \quad k = 0, 1, \dots, M-1 \quad (18)$$

由上式可知對於任意 $M-1$ 階以下多項式以 $\frac{\partial N_l(x)}{\partial x}$ 為核函數可由節點值求得其正確微分函數。

於此仿照再生核函數之推導令近似函數之微分為

$$\frac{\partial u^h(x)}{\partial x} = \sum_{l=1}^N \Phi'_a(x; x-x_l) u_l = \sum_{l=1}^N N'_l(x) u_l \quad (19)$$

其中 $N'_l(x) = \Phi'_a(x; x-x_l) = w_a(x-x_l)C'(x; x-x_l)$ 為微分再生核函數(differential reproducing kernel function) , $C'(x; x-x_l)$ 為修正函數。

$$C(x; x-x_l) = \mathbf{p}^T(x-x_l)\mathbf{b}'(x) \quad (20)$$

$\mathbf{b}'(x)$ 為待定係數使 $N'_l(x)$ 滿足與(18)式相同之微分再生條件(differential reproducing conditions)

$$\sum_{l=1}^N N'_l(x) x_l^k = kx^{k-1}, \quad k = 0, 1, \dots, M-1 \quad (21)$$

(21)式重新整理為

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^N N'_l(x) &= 0 \\ \sum_{l=1}^N (x-x_l)N'_l(x) &= x \sum_{l=1}^N N'_l(x) - \sum_{l=1}^N N'_l(x)x_l = 0 - 1 = -1 \\ &\vdots \\ \sum_{l=1}^N (x-x_l)^{M-1} N'_l(x) &= 0 \end{aligned} \quad (22)$$

亦即

$$\sum_{l=1}^N \mathbf{p}(x-x_l) w_a(x-x_l) \mathbf{p}^T(x-x_l) \mathbf{b}'(x) = \mathbf{p}'(0) \quad (23)$$

其中

$$\mathbf{p}'(0) = \left. \frac{\partial \mathbf{p}(x-x_l)}{\partial x_l} \right|_{x=x_l} \quad (24)$$

整理為矩陣形式即為

$$\mathbf{M}(x)\mathbf{b}'(x) = \mathbf{p}'(0) \quad (25)$$

解得 $\mathbf{b}'(x)$ 後代入 $N_l'(x)$ 得

$$N_l'(x) = w_a(x - x_l) \mathbf{p}^T(x - x_l) \mathbf{M}^{-1}(x) \mathbf{p}'(0) \quad (26)$$

因 $N_l'(x)$ 與 $\frac{\partial N_l(x)}{\partial x}$ 均滿足微分再生條件(21)式與(18)式，以(26)式之 $N_l'(x)$ 為核函

數由(19)式所求得近似函數之微分與(16)式對近似函數直接微分所得結果具有相同的精度，而在計算上(26)式則大為簡化。

利用相同推導方式可推得近似函數之 k 階導數為

$$\frac{\partial^k u^h(x)}{\partial x^k} = \sum_{l=1}^N \Phi_a^{(k)}(x; x - x_l) u_l = \sum_{l=1}^N N_l^{(k)}(x) u_l \quad (27)$$

其中

$$N_l^{(k)}(x) = w_a(x - x_l) \mathbf{p}^T(x - x_l) \mathbf{M}^{-1}(x) \mathbf{p}^{(k)}(0) \quad (28)$$

$$\mathbf{p}^{(k)}(0) = \left. \frac{\partial^k \mathbf{p}(x - x_l)}{\partial x_l^k} \right|_{x=x_l} \quad (29)$$

由以上結果可知，以微分再生核算法對近似函數之各階導數計算，計算方法完全一樣，唯一之差別僅在於微分核函數中之 $\mathbf{p}^{(k)}(0)$ 項次。因此，以微分再生核法計算近似函數之高階導數可節省大量之計算時間。

正如再生核法可由移動最小二乘法加以解釋，微分再生核法也可由移動最小二乘法解釋。移動最小二乘法所建構再生核形狀函數(7)式係由(5)式中令 $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}$ 而得，因此式中 $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ 與 $\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{x})$ 原為 $\mathbf{B}(\mathbf{x}^*)$ 與 $\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{x}^*)$ 對形狀函數之微分不應該如一般論文中直接將 $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ 與 $\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{x})$ 對 \mathbf{x} 微分。由(5)式可知應先求出

$$\frac{\partial^k \mathbf{N}^T(\mathbf{x}; \mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}^k} = \frac{\partial^k \mathbf{p}^T(\mathbf{x}^* - \mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}^k} \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{x}^*) \mathbf{B}(\mathbf{x}^*) \quad (30)$$

而後再令 $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}$ 以求得全域連續之近似函數的微分，故

(36)式中方程式數大於未知數數目，可用最小二乘法求得最適解。採用以上解析法主要的優點為僅需要節點資料，不需要建立任何網格。其次為可善用微分再生核微分計算法之優點，使計算微分方程式大為簡化，解省計算時間。

四、 數值範例

為驗證微分再生核法之實用性，本文首先以一常微分邊界值問題驗證其在一維邊界值問題上之應用，最後以一二維彈性力學開孔問題應力分析驗證其在二維邊界值問題上之應用。

第一個例子為其解一個一維邊界值問題

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + w^2 u = 0 \quad (37)$$

邊界條件為

$$u(0) = 0, \quad u(1) = 1$$

其正確解為

$$u(x) = \sin(x)/\sin(w) \quad (38)$$

於此取 $w = 5\pi/2$ ，微分再生核法取節點總數為 16 點，基底函數為多項式， $M = 4$ ，局部有效點數 $N = 8$ ，所得結果示於圖一至三。圖一為所求得之 $u(x)$ ，圖二、三則為由所求得 $u(x)$ 再利用微分再生核法進行微分求得 $u'(x)$ 及 $u''(x)$ 。各圖中實線為正確解，虛線為微分再生核法數值解。由結果可知，微分再生核法不但在求取函數本身上精度相當高，在函數的各階導數的求取精度也非常好。一般有限元素法因採用局部元素內插分，因此由其數值結果再求取高階導數精度通常不佳，需

再利用其他方法如加權平均等才能得到可靠的結果。這是微分再生核法的一大優點。

第二個應用例子為分析一個二維彈性體中有一圓形開孔在無窮遠處受 x 方向均勻張力 $\sigma_x = 100$ 。由於對稱取四分之一象限分析，開孔為單位圓，分析區間取至 10 倍半徑。微分再生核法以 x, y 之多項式為基底函數，取至 3 次多項式， $M = 10$ ，節點佈點如圖四，總點數為 289 點，局部有效點數 $N = 21$ ，所求得開孔邊緣環向應力示於圖五。圖五中實線為正確解，虛線為微分再生核法數值解，結果顯示微分再生核法應用於線性彈性之應力分析可得精確之結果。

五、 結論

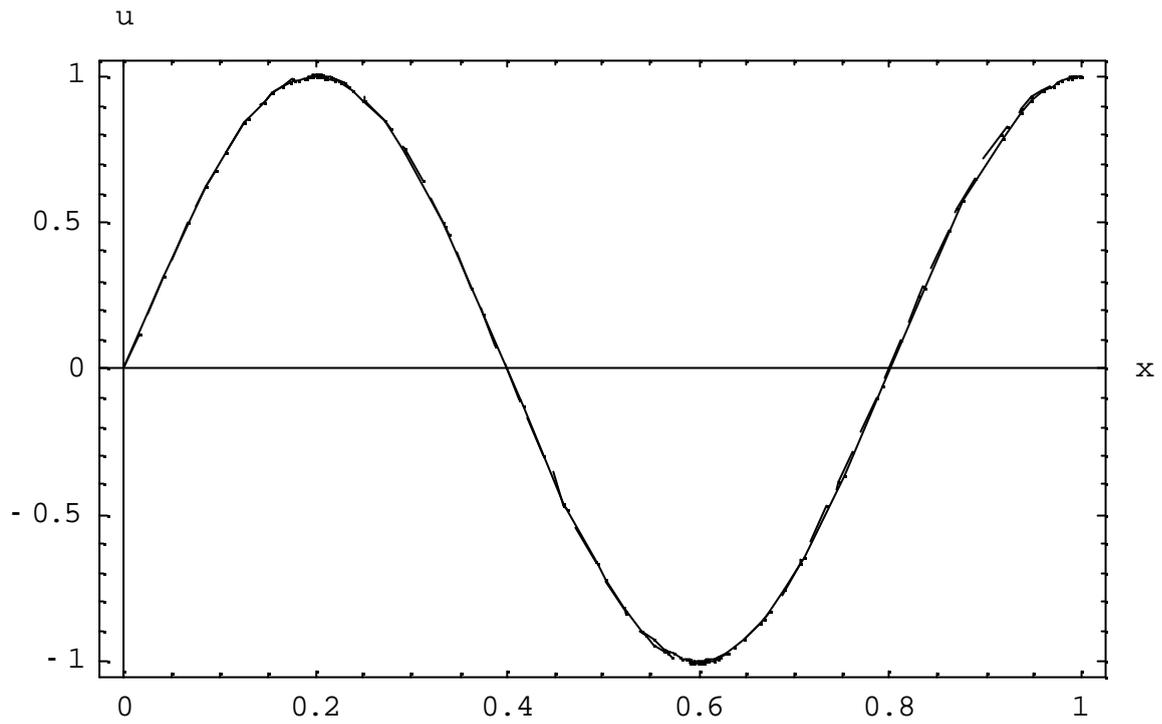
本文由移動最小二乘法以及微分再生兩種方式推導出微分再生核函數，例用微分再生核函數可以快速的計算函數的各階導數。由微分再生核函數配合置點法可建構一適用於任意線性微分方程邊界值問題之數值方法，由本文中之例子可看出此一方法具有計算方法簡潔、不需建立網格、節點可彈性分布、函數各階導數精度可掌控等優點。將此一方法應用於動力問題、應力集中問題、大變形問題、非線性問題、破壞力學問題等均為進一步研究之重點。

參考資料

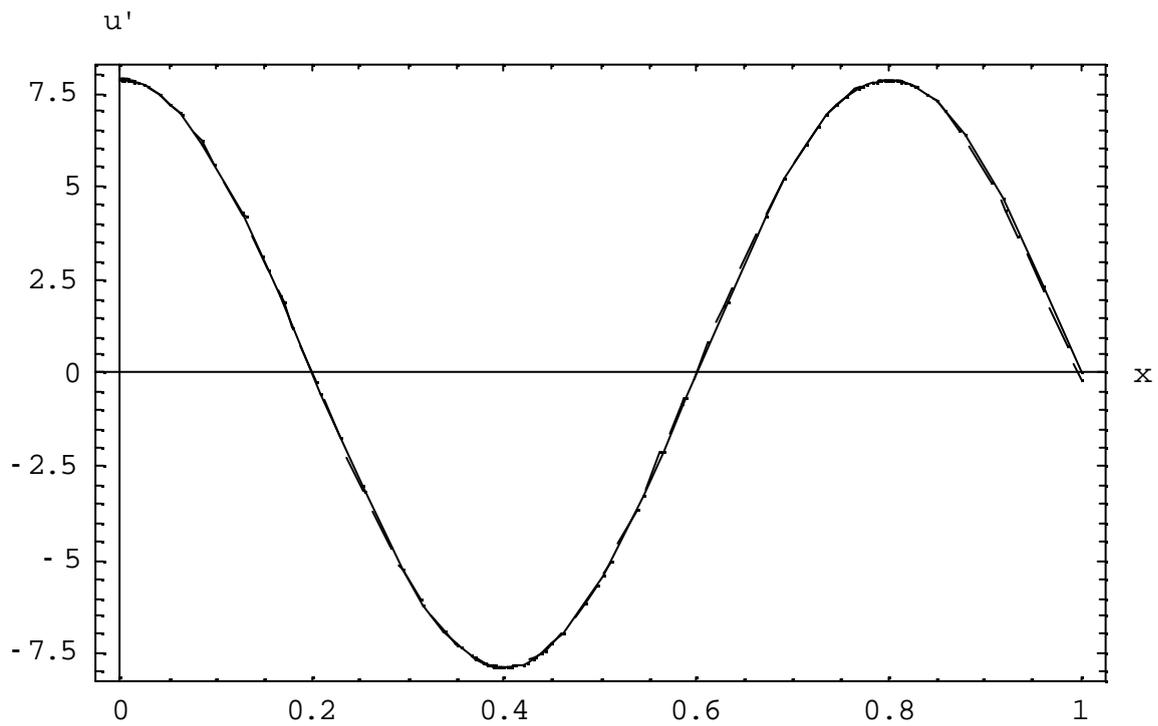
1. R.A. Gingold and J.J. Monaghan, Smooth particle hydrodynamics: Theory and application to non-spherical stars, Mon. Not Roy. Astron. Soc. 181 (1977)

375-389.

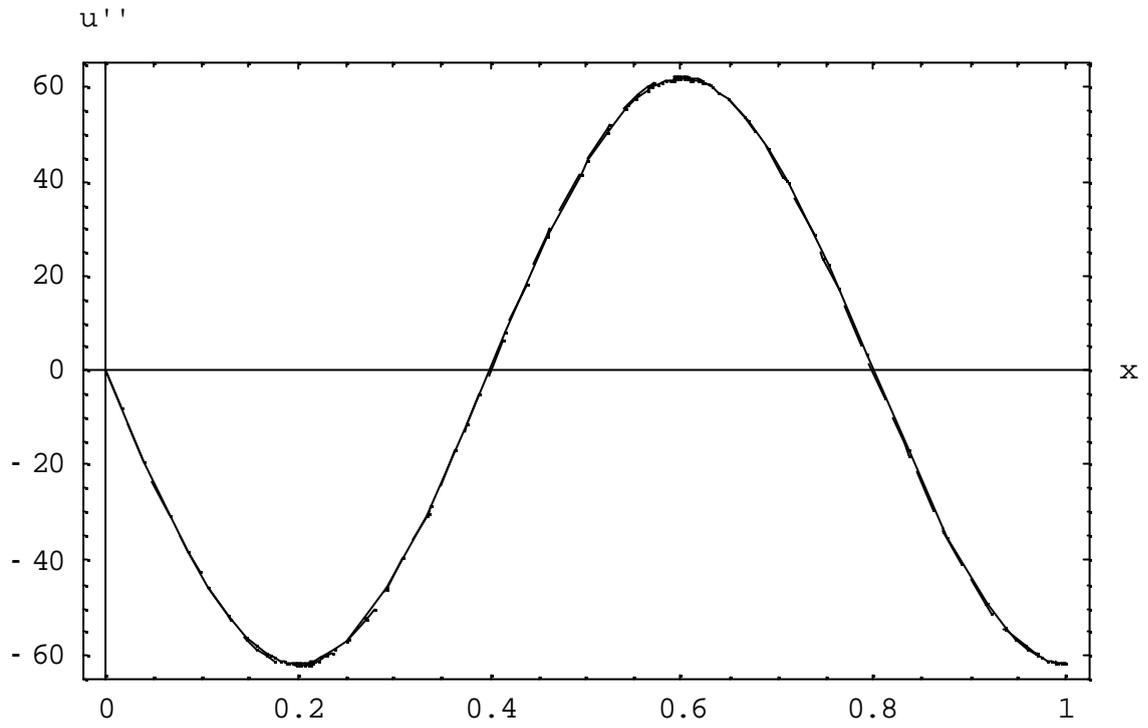
2. J.J. Monaghan, An introduction to smooth particle hydrodynamics, *Comput. Phys. Communicat.* 48 (1988) 89-96.
3. B. Nayroles, G. Touzot and P. Villon, Diffuse approximation and diffuse elements, *Comput. Mech.* 10 (1992) 307-318.
4. W.K. Liu, S. Jun and Y.F. Zhang, Reproducing kernel particle methods. *Int. J. Numer. Methods Fluids* 20 (1995) 1081-1106.
5. P. Lancaster and K. Salkauskas, Surfaces generated by moving least-squares methods, *Math. Comput.* 37 (1981) 141-158.
6. T. Belytschko, Y.Y. Lu and L. Gu, Element free Galerkin methods, *Inter. J. Numer. Methods Engrg.* 37 (1994) 229-256.
7. P. Krksl and T. Belytschko, Element-free Galerkin method: Convergence of the continuous and discontinuous shape functions, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 148 (1997) 257-277.
8. T. Belytschko, Y. Krongauz, D. Organ, M. Fleming and P. Krysl, Meshless methods: An overview and recent developments, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 139 (1996) 3-47.
9. N.R. Aluru, A point collocation method based on reproducing kernel approximations, *Int. J. Numer. Meth. Engrg.* 47 (2000) 1083-1121.



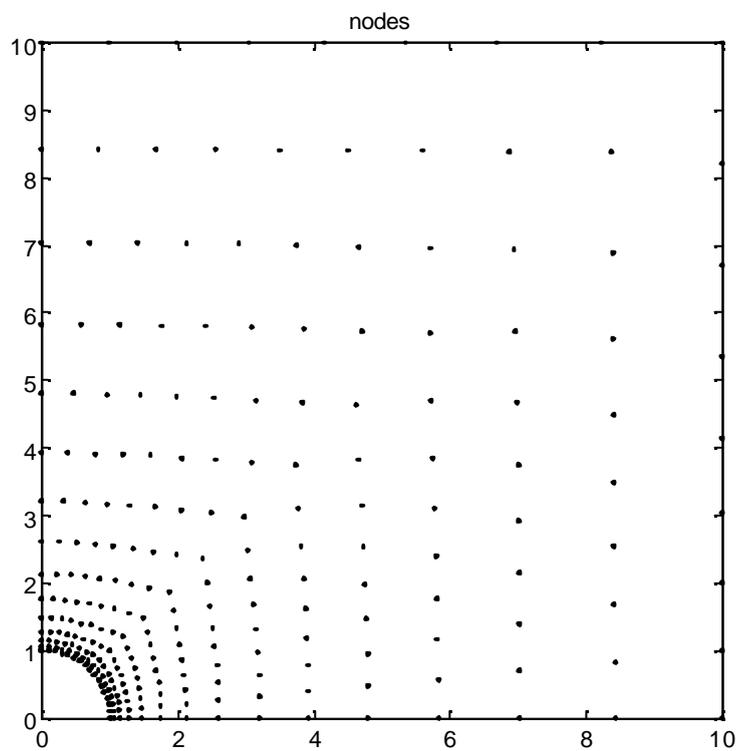
圖一、例一 $u(x)$ ，實線為正確解，虛線為微分再生核法數值解。



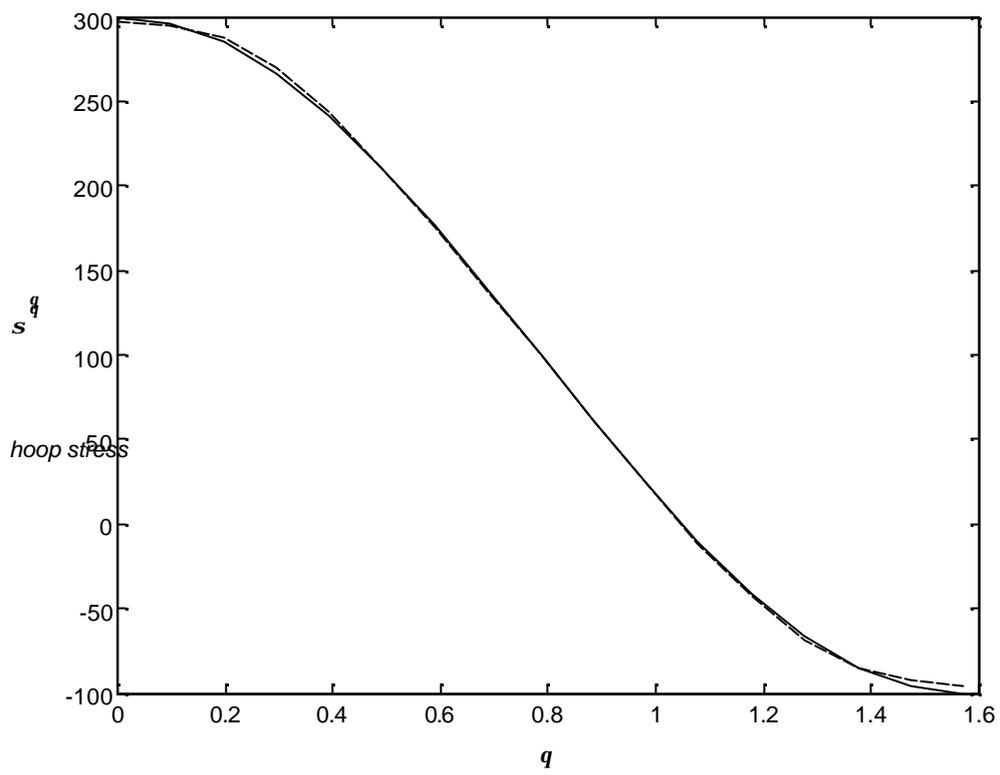
圖二、例一 $u'(x)$ ，實線為正確解，虛線為微分再生核法數值解。



圖三、例一 $u''(x)$ ，實線為正確解，虛線為微分再生核法數值解。



圖四、例二之節點分佈。



圖五、例二圓孔周圍環向應力，實線為正確解，虛線為微分再生核法數值解。