

무요소 계산법의 발전과 전개

숙명여자대학교 수학과 수학과 이진호
jhlee@sookmyung.ac.kr

유한요소법(Finite Element Methods)은 지난 수십 년 동안 다양한 공학문제를 해석하는 주요 수치해석기법으로서, 지속적으로 연구·개발되어 오늘에 이르고 있다. 그러나, 유한요소법은 계산을 위하여 요소망을 구성해야 하고 일부의 문제에 대하여서는 요소망을 재구성 하는 등 특별한 처리기법과 계산의 소요가 필요하다. 이와 같은 단점을 극복하기 위하여 무요소법(Meshfree Methods)이라 불리는 일단의 수치해석 기법들이 고안되었다. 무요소법은 요소를 사용하지 않고 절점(node)만을 이용하여 함수를 근사하는 수치해석기법이다.

본 논문에서는 무요소법이 고안된 배경과 그 연산구조를 소개하고 무요소법의 대표적인 방법들인 Smoothed Particle Hydrodynamics(SPH)방법, 무요소 갤러킨 방법(Meshfree Galerkin Methods) 그리고 무요소 선점법(Meshfree Point Collocation Methods)의 기본 개념과 이들 수치해석기법의 방법론을 알아본다. 그리고 이들 방법의 장단점과 그 적용 예를 통하여 무요소 계산법의 유효함을 보인다.

주제어 : 무요소, 유체역학, 갤러킨 방법, 최소제곱법, 선점법, 형상함수

0. 서론

컴퓨터 하드웨어의 빠른 발전과 함께 다양한 수치해석의 기법들도 꾸준히 연구 개발되어 왔다. 이들은 공학 및 물리학의 여러 가지 문제들에 대한 모의실험과 이에 관련된 편미분방정식의 수치 해를 구하는데 효과적인 방법으로 사용되어지고 있다.

유한요소법(Finite Element Methods : FEM)은 지난 수십 년 간 다양한 공학문제를 해석하는 수치해석기법으로서 꾸준히 연구, 개발되어 오늘에 이르고 있다. 현재 가장 널리 사용되고 있는 수치해석 방법의 하나인 유한요소법은 수학의 이론적 배경을 바탕으로 과학과 공학의 여러 가지 문제에 적용되어 왔다.

유한요소법의 특징 중 하나는 다루고자 하는 영역의 연속인 면을 겹치지 않는 각각의 부분으로 나누어야 한다는 것이다. 이와 같은 유한요소법의 이산화(discretization) 과정은 유한요소법에 의한 근사계산에 있어 중요한 부분 중의 하나로 적절한 이산화 과정은 유한요소법에 의한 근사값(approximation)의 정당성을 보장한다.

그러나, 유한요소법과 같이 요소(element)를 해석의 근간으로 하는 수치해석기법으로는 해석대상의 형상(geometry)이 크게 변하는 대변형 문제, 불연속면이 계속적으로 이동하는 균열전파문제, 그리고 해의 정확도를 높이기 위하여 특정부위에 자유도를 증가시켜야 하는 h-adaptivity 문제와 같이 요소망을 재구성해야하는 문제에 있어서는 상당한 노력과 특별한 처리기법들이 요구된다. 유한요소법의 이러한 단점들을 극복하려는 노력으로 1990년 초반에 들어서면서 이 분야에 중요한 진전이 일어났다. 이것은 무요소법(Meshless or Meshfree Methods)이라 불리는 일단(一團)의 수치해석기법들로([3], [10], [17],...) 요소를 사용하지 않고 절점만을 이용하므로 앞서 언급한 유한요소법의 단점을 극복할 수 있었다. 1990년대 중반 이후 다양한 무요소법이 개발되었으며 이들 방법은 과학과 공학의 여러 분야에서 수치해석 방법론으로 사용되고 있다.

본 논문에서는 무요소법이 개발된 배경과 그 연산구조를 알아보고 무요소법의 대표적인 방법들인 Smoothed Particle Hydrodynamics(SPH)방법, 무요소 Galerkin 방법(Meshfree Galerkin Methods), 무요소 선점법(Meshfree Point Collocation Methods)의 기본 개념 과 이들 수치해석기법의 방법론을 알아본다. 또한 이들 방법의 장단점과 그 적용 예를 통하여 무요소 계산법의 유효함을 보이고자 한다.

1. 무요소법(Meshfree Particle Methods)

무요소법은 요소를 사용하지 않고 절점(node)만을 이용하여 함수를 근사하는 수치해석기법이기 때문에 복잡한 구조로 요소망의 구성에 어려움이 있는 영역에서의 해석문제나 시간에 따른 형상의 변화 등으로 요소망을 재구성(remeshing)해야 하는 등의 유한요소법의 단점을 쉽게 극복할 수 있다. 이런 장점으로 인하여 고체의 균열전파해석문제, 비점성 압축유체, 점성 비압축 유체, 장애물이 있는 유체의 흐름 등 다양한 공학문제에 우수한 적용성을 보이고 있다([4], [6], [9]).

무요소방법의 원형은 Lucy[20], Gingold[10] 등에 의하여 1970년대에 고안 되었으나 1990년대 이후 널리 알려져 사용되기 시작한 Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)라고 할 수 있다. 1990년대 중반 이후 Belytschko 등에 의해서 개발된 무요소 Galerkin 방법(Element Free Galerkin Method : EFGM)[3]과 Liu 등에 의해서 개발된 Reproducing Kernel Particle Method (RKPM)([14], [15])는 SPH방법이 가지는 단점을 보완한 방법들로 개발되었다. 하지만 새로 만들어진 기법들이 그러하듯 무요소법 또한 몇 가지 해결해야 할 문제점들을 내재하고 있다. 필수경계조건(essential boundary condition)을 만족시키기 위한 처리방법들이 요구되며, 형상함수와 그 도함수의 계산에 있어서 계산비용이 높고, 수치적분을 수행하는데 있어서 적분셀(integration cell)을 사용함으로써 순수한 무요소법의 사용이 제한됨과 동시에 유한요

소법과 같은 해석강건성(robustness)의 확보가 아직까지는 미흡하다는 것 등이 그것이다. 이러한 무요소법의 단점을 개선하고자하는 연구가 다방면에 걸쳐 진행되고 있다 ([1], [11], [13], [21]).

2. Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)

Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 방법은 1977년 Lucy[20], Gingold[10]에 의하여 별이나 은하의 진화와 같은 천체물리학의 문제를 해결하기 위한 방법으로 고안되었다. 거대한 규모에서의 천체물리학의 입자들의 집단적인 움직임은 액체나 기체와 같은 유체의 움직임과 흡사하며 이것이 고전 뉴턴유체의 방정식으로 결정되는 준유체(quasi-fluid)로 SPH방법의 모델이 되었다.

SPH방법은 1991년에 들어 강체의 동역학을 다루는 방법으로도 사용되기 시작하였으며 많은 새로운 응용과 이에 적합한 방법들도 개발되었다. 90년대 이후 SPH방법은 널리 알려져 많은 연구가 이루어져 이 방법이 갖는 장점과 단점 및 단점을 극복하기 위한 방법에 대한 많은 결과가 발표되었으며 지금도 많은 연구가 이루어지고 있다 ([11], [22], [24]).

SPH방법은 보간법(interpolation theory)에 그 기본을 두고 있다. 미분방정식으로 나타나는 연속역학에서의 보존법칙은 보간함수를 이용하여 적분 방정식으로 나타낼 수 있으며 적분계산에 필요한 정보가 이산분포된 절점에 제한되므로 적분은 주변 절점에서의 계산의 합으로 표시된다. 이 방법은 함수에 대한 계산이 이산분포된 절점의 근방에 포함된 점들과 보간함수에 의하여 결정되므로 격자(grid)를 구성할 필요가 없다는 장점을 갖는다. 또한 부분적분법을 이용하여 물리적 변수에 대한 미분을 보간함수에 대한 미분으로 대치하여 계산하게 된다.

SPH 보간법은 디랙-델타함수(Dirac delta function) $\delta(x)$ 를 이용하여 함수 $f(x)$ 를 다음의 식과 같이 나타낼 수 있다는 데에 근거하고 있다.

$$(1) \quad f(x) = \int f(x') \delta(x' - x) dx',$$

주지하고 있는 바와 같이 디랙-델타함수는 다음과 같은 성질을 갖고 있다.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = \int_{-\varepsilon/2}^{\varepsilon/2} \frac{1}{\varepsilon} dx = 1,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\zeta - x) f(\zeta) d\zeta = f(x)$$

그러나 디락-델타함수는 엄밀한 의미로 함수는 아니며 연속성이나 미분가능성과 같이 수학적으로 다루기 좋은 성질도 갖고 있지 못하므로 위와 같이 디락-델타함수의 유용성을 가지면서 그 단점을 보완하기 위하여 다음과 같은 성질을 가지는 창 함수(window function 또는 smooth kernel function) $\Phi(x, h)$ 를 보간법(interpolation), 또는 선점법(collocation method)에 사용한다.

- ① $\int \Phi(x, h) dx = 1$
- ② $\Phi(x, h) \rightarrow \delta(x), \quad h \rightarrow 0$
- ③ $\Phi(x, h) \in C_0^k, \quad k \geq 1$

$\Phi(x, h)$ 는 디락-델타함수의 성질을 갖고 있으며 한번이상 미분가능한 함수임을 알 수 있다. 여기에서 h 는 창함수 $\Phi(x, h)$ 가 컴팩트 받침(compact support)을 갖는 경우 받침의 반경을 나타내며 'smoothing length'라고 부른다.

창함수 $\Phi(x, h)$ 를 사용하여 (1)의 식을 다시 표현하여 보면

$$(2) \quad \langle f(x) \rangle = \int f(x') \Phi\left(\frac{|x' - x|}{h}\right) dx'$$

가 되며 이 식에서 $h \rightarrow 0$ 이면 $\langle f(x) \rangle \rightarrow f(x)$ 임을 알 수 있다.

일반적으로 SPH 창함수로는 컴팩트 받침(compact support)을 갖거나 물리적으로 ③의 성질을 가지는 exponential decay property를 가지는 함수가 사용된다. 주로 사용되는 창함수의 예를 들 면 다음과 같다.

1) 가우시안 함수(The Gaussian function)

$$\Phi(x, h) = \frac{1}{(\pi h^2)^{n/2}} \exp\left[-\frac{x^2}{h^2}\right], \quad n \text{ 은 공간의 차원.}$$

가우시안 함수는 컴팩트 받침을 갖지는 않지만 exponential decay property를 가진다.

2) 삼차 스플라인 함수(The cubic spline function)

$$\Phi(x, h) = \frac{C}{h^n} \begin{cases} 1 - \frac{3}{2} q^2 + \frac{3}{4} q^3 ; & 0 \leq q \leq 1 \\ \frac{1}{4} (2 - q)^3 ; & 1 \leq q \leq 2 \\ 0 ; & \text{otherwise} \end{cases}$$

여기서 $q = \frac{x}{h}$ 이며 C 는 정규화요소(normalization factor)로 다음과 같다

$$C = \begin{cases} \frac{2}{3} & ; 1d \\ \frac{10}{7\pi} & ; 2d \text{ (circular)} \\ \frac{1}{\pi} & ; 3d \text{ (spherica)} \end{cases}$$

3) 사차 스플라인 함수(The quartic spline function)

$$\Phi(x, h) = \frac{C}{h^n} \begin{cases} 1 - 6q^2 + 8q^3 - 3q^4 & ; 0 < q < 1 \\ 0 & ; q \geq 1 \end{cases}$$

여기서 C 는 정규화 요소로 성질 ①을 만족하는 값으로 결정된다.

연속체에 대한 식 (2)를 NP 개의 절점에 각 질량 m_i , ($i=1, \dots, NP$)와 밀도 (density) ρ_i , ($i=1, \dots, NP$)인 체적소(volume element)를 갖는 절점에서의 이산식으로 바꾸면 식(2)는 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$(3) \quad \langle f(x) \rangle \cong \sum_{i=1}^N f(x_i) \Phi\left(\frac{|x' - x_i|}{h}\right) \frac{m_i}{\rho_i}$$

창함수의 받침반경 h 는 창함수의 영역을 결정하며 이 유효 지지반경 내에 들어오는 절점의 수는 보간법의 정확도와 밀접한 연관을 갖는다. smoothing length h 의 길이는 상수로 주어질 필요는 없으며 공간 또는 시간의 함수로 주어질 수 있다.

정확도를 유지하기 위해서는 공간에 분포하는 절점의 농도(density)가 변화함에 따라 창함수의 유효 받침반경에 들어오는 절점의 수가 일정하도록 smooth length h 의 길이도 함께 변화하여야 한다. 일반적으로 동역학 모의실험에서는 절점이 움직이고 시간의 진행에 따라 절점의 농도도 변하므로 계산의 정확도와 효율을 위하여 smoothing length h 도 따라서 변화해야한다.

SPH방법은 편미분 방정식의 근사해(approximate solution)를 구하는 방법으로 사용되므로 미분의 근사식을 구하는 것이 중요한 요소 중의 하나이다.

창함수의 받침반경이 유한함을 이용하여 부분적분법을 사용하면 다음과 같은 그래디언트(gradient)의 이산 방정식을 얻는다

$$(4) \quad \langle \nabla f(x) \rangle_{x=x_i} \cong - \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(x_j) \nabla \Phi\left(\frac{|x_i - x_j|}{h}\right) \Big|_{x=x_i}$$

(3), (4)의 이산 방정식을 이용하여 속도, 가속도, 에너지 등과 관련된 근사식을 얻을 수 있다. 연속역학(continuum mechanics)에서 사용되는 몇 가지 중요한 보존 법칙(conservation law)들과 그들의 이산방정식들은 여러 가지의 다양한 형태로 표현되지만 일반적으로 많이 사용되는 식을 표현하면 다음과 같다.

■ 연속방정식(continuity equation) :

$$(5) \quad \frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot U = 0$$

여기에서 ρ 는 밀도, U 는 속도장(velocity field $U = \frac{dx}{dt}$)을 나타낸다.

이 연속방정식은 SPH의 절점에 대한 이산방정식

$$(6) \quad \frac{d\rho_i}{dt} = \rho_i \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} (U_j - U_i) \cdot \nabla \Phi_{ij} \text{ 으로 나타내어진다.}$$

(여기서 $\nabla \Phi_{ij} = \nabla \Phi(|x - x_j|/h_j)|_{x=x_i}$)

■ 선형 운동량방정식(Linear momentum equation) :

$$(7) \quad \frac{dU}{dt} = - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \sigma$$

여기에서 σ 는 응력텐서(stress tensor)를 나타낸다. 선형 운동량방정식은 SPH의 절점에 대한 이산방정식

$$(8) \quad \frac{dU_i}{dt} = - \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\sigma_i}{\rho_i^2} + \frac{\sigma_j}{\rho_j^2} \right) \cdot \nabla \Phi_{ij} \text{ 또는 계산의 안정성을 위하여 인위적}$$

인 점성압력(viscous pressure) 이 추가된 형태의

$$(8') \quad \frac{dU_i}{dt} = - \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\sigma_i}{\rho_i^2} + \frac{\sigma_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} I \right) \cdot \nabla \Phi_{ij} \text{ 으로 나타내어진다[10].}$$

■ 에너지방정식(Energy equation) :

$$(9) \quad \frac{dE}{dt} = - \frac{1}{\rho} \sigma : \nabla U$$

여기에서 E 는 특정 내부에너지를, $\sigma : \nabla U$ 는 double inner product 를 나타낸다. 에너지 방정식(Energy equation)은 SPH의 절점에 대한 이산방정식

$$(10) \quad \frac{dE_i}{dt} = - \sum_{j=1}^N m_j (U_j - U_i) \cdot \left(\frac{\sigma_i}{\rho_i^2} \right) \cdot \nabla \Phi_{ij} \text{ 또는 선형 운동방정식과 마찬가지로 계산의 안정성을 위하여 인공의 점성압력이 추가된 형태의}$$

$$(10') \quad \frac{dE_i}{dt} = - \sum_{j=1}^N m_j (U_j - U_i) \cdot \left(\frac{\sigma_i}{\rho_i^2} + \Pi_{ij} J \right) \cdot \nabla \Phi_{ij} \text{ 으로 나타내어진다[10].}$$

SPH방법은 그 구조의 간단함이나 프로그래밍의 수월성, 그리고 대변형(large deformation) 문제에 대한 적합성 등의 장점을 가지고 있으나 반면 몇 가지 취약점도 가지고 있다. 그 내용을 요약하면 첫째가 경계조건 구현의 어려움 이다. 앞에서 알아본 바와 같이 초기 SPH 방법이 사용된 것은 천체물리와 같이 경계조건이 필요하지 않은 경우이었으나 SPH방법의 적용범위가 경계조건을 갖는 다양한 문제로 확장되었다. 그러나 SPH방법은 이산분포된 절점에서의 보간법으로 경계나 영역의 테두리가 잘 정의되지 않는 단점을 갖고 있다. 이 단점을 보완하기 위하여 경계조건의 구현을 위해 영역의 외부에 가상의 절점(ghost particle)을 포함하는 방법과 이를 응용한 여러 방법이 고안되었다, 둘째 장력 불안정성(tensile instability)을 들 수 있다. 장력불안정성이란 장력이 주어진 상태에서 절점에서의 미세한 진동이 지수적(exponential)으로 증가하여 절점의 집적이나 진동(oscillation)과 같은 결과를 가져오게 된다. 이런 현상에 대한 원인과 해결방법에 대하여 Morris[24] Guenther[11] 등이 이중의 절점(double set of particle)을 사용하는 방법, 안정화 항(stabilizing dissipation term)을 추가하는 방법등을 연구하였다. 세 번째로 SPH 보간법의 불완전성(lack of consistency)을 들 수 있다. SPH방법을 통한 근사에는 평활오차(smoothing error) ϵ_S 와 절단오차(truncation error) ϵ_T 와 같은 보간법 오차(interpolation error) ϵ_I 가 발생한다. 평활오차 ϵ_S 와 절단오차 ϵ_T 는 연속함수 $f(x)$ 에 대하여

$$\begin{aligned} \epsilon_S &= f(x) - \langle f(x) \rangle \\ \epsilon_T &= \langle f(x) \rangle - \sum_{i=1}^N f(x_i) \Phi(|x - x_i|/h) \frac{m_i}{\rho_i} \end{aligned}$$

으로 주어지며 보간법 오차 ϵ_I 는 $\epsilon_I = \epsilon_S + \epsilon_T$ 이다.

근사해의 수렴은 이들 오차에 의하여 영향을 받게 되는데 평활오차 ϵ_S 는 SPH 창함수의 선택에 따라 조정 가능하며 절단오차 ϵ_T 는 절점에서의 적분 정밀도(accuracy)에 의하여 조절될 수 있다. 따라서 절점 분포의 균일한 정도가 근사해의

수렴에 영향을 주게 된다. 절점이 무작위로 밀집되게 분포되었을 때 Monte Carlo 추정의 절단오차는 \sqrt{h} 임이 알려져 있으며 Neiderreiter[26]는 절점의 분포가 불규칙하더라도 고르게 분포되어 있을 경우 절단오차는 $h|\log h|^{n-1}$ 의 차수(order)를 가짐을 보였다.

SHP 보간법의 완전성을 보완하기 위하여 교정함수(corrective function)을 구하여 원래의 창함수에 곱하여 새로운 창함수를 만드는 Reproducing Kernel Particle Method(RKPM), 계산의 정밀도를 높이기 위하여 이동최소제곱법(Moving Least Squares Interpolant : MLS)을 사용하여 수정된 창함수를 사용하는 등의 방법이 제안되었다([7], [8]). SPH방법은 동역학계의 모의실험이나 공학분야의 수치해를 구하는 분야에서 좋은 결과들을 보이고 있으나 수치해의 수렴성에 대하여 이론적인 정립이 미흡하며 아직 일반적인 편미분방정식의 근사해를 구하는 문제들에 대하여서는 미해결인 상태이다.

3. 무요소 Galerkin 방법(Meshfree Galerkin Methods)

공학이나 물리학의 여러 분야에서 나타나는 다양한 형태의 편미분 방정식의 해결을 위하여 일반적인 무요소법의 개발을 연구 중에 분산된 자료에 대한 보간법이 용이하고 보다 엄밀한 수학적 근사이론이 정립되어 있는 무요소 Galerkin 방법이 주목받게 되었다. 1992년 Nayroles, Touzot, Villon[25]은 Moving Least Squares 방법의 수치계산에 확산된(diffused) 형상함수(shape function)을 사용하는 Diffuse Element Method (DEM)를 제안하였다. 1994년 Belytschko[4] 등은 선형 탄성체의 균열전파 모의실험에 MLS 방법을 보완한 Galerkin weak formulation을 제안하였으며 이후로 무요소 Galerkin 방법에 속하는 여러 가지 수치계산법들이 개발되었다.

Galerkin weak formulation을 구하는 과정을 디리클레(Dirichlet) 경계조건을 갖는 문제를 통하여 보자.

Hilbert 공간 H 의 볼록(convex)부분공간 U 에 대해 다음 식을 만족하는 $u \in U$ 를 구하자.

$$(11) \quad -\nabla^2 u + u = f, \quad x \in \Omega$$

$$(12) \quad u = 0, \quad x \in \Gamma$$

Ω 는 n 차원 공간의 열린 유계인 집합이고 Γ 는 Ω 의 경계로 Lipschitz condition을 만족한다.

$V = H_0^1(\Omega)$ 에 대하여 임의의 $v \in V$ 를 식 (11)에 곱하고 Ω 위에서 적분하면

$$(13) \quad \int_{\Omega} (-\nabla^2 u + u)v \, d\Omega = \int_{\Omega} f v \, d\Omega$$

를 얻는다.

이 식을 u 의 경계조건 (12)를 사용하여 부분적분을 시행하면

$$(14) \quad \int_{\Omega} (\nabla u \nabla v + uv) \, d\Omega = \int_{\Omega} f v \, d\Omega$$

를 얻는다.

식 (14)를 만족하는 u 를 문제 (11), (12)의 약해(weak solution)라고 한다.

구하고자 하는 해는 무한차원에 속하지만 수치적으로 근사해를 구하기 위하여 U 와 V 의 유한차원 부분공간 $U^h \subset U$ 와 $V^h \subset V$ 를 생각하자. 이들 부분공간은 이산분포된 절점에서의 형상함수(shape function)들로 생성되는 공간으로 $U^h = \text{span}\{\Psi_I\}$, $V^h = \text{span}\{\Phi_J\}$ 이고 $u^h = \sum_I \Psi_I(x) u_I$, $v^h = \sum_J \Phi_J(x) v_J$ 로 표현된다.

$\int_{\Omega} (\nabla u \nabla v + uv) \, d\Omega = A(u, v)$, $\int_{\Omega} f v \, d\Omega = \langle f, v \rangle$ 로 쓰면 구하고자 하는 수치해는 임의의 $v^h \in V^h$ 에 대해 $A(u^h, v^h) = \langle f, v^h \rangle$ 를 만족하는 $u^h \in U^h$ 이다.

이를 이용하여 식 (14)를 다시 쓰면

$$\sum_I \sum_J A(\Psi_I \Phi_J) u_I v_J = \sum_J \langle f, \Phi_J \rangle v_J, \quad \text{즉}$$

$$\sum_J v_J (\sum_I A(\Psi_I \Phi_J) u_I - \langle f, \Phi_J \rangle) v_J = 0 \quad \text{을 얻는다.}$$

이 식은 임의의 v_J 에 대해 성립해야 하므로 $[A(\Psi_I \Phi_J)][u_I] = [\langle f, \Phi_J \rangle]$ 형태의 연립 방정식을 얻게 된다.

$U^h \equiv V^h$ 일 때 이 Galerkin 방법을 Ritz-Galerkin 방법, 또는 Bubnov-Galerkin 방법이라 하고 $U^h \neq V^h$ 이면 Petrov-Galerkin 방법이라 한다. 다양한 형태의 Galerkin 방법에서 Moving Least Square(MLS) 방법을 근간으로 사용하고 있다.

3. 1. 이동최소제곱법

이동최소제곱법(Moving Least Squares Reproducing Kernel interpolant, MLSRK)은 보간오차를 최적화(optimize)하는 과정과 국소적으로 구해진 근사식을 해석영역 전체로 확산(moving)하는 과정으로 이루어져 있다.

단순연결된(simply connected) 영역위에서 정의된 연속함수 $u(x)$ 의 고정된 절점 \bar{x} 근방에서의 국소함수(local function)를 다음과 같이 정의하자.

$$u^h(x, \bar{x}) := \begin{cases} u(x), & \text{if } x \in B_\rho(\bar{x}) \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

여기서 $B_\rho(\bar{x})$ 는 ρ 를 반경으로 갖는 구이다. (ρ 는 SPH방법에서 사용된 smoothing length h 와 같은 역할을 한다)

Stone-Weierstrass 정리에 의하면 연속함수 $u(x)$ 는 국소적으로 다항함수로 근사시킬 수 있음을 알고 있으므로 이를 이용하여 $u^h(x, \bar{x})$ 를 다음과 같이 국소적 근사함수로 나타낼 수 있다.

$$(15) \quad u^h(x, \bar{x}) \cong \sum_{i=0}^m P_i\left(\frac{x-\bar{x}}{\rho}\right) a_i(\bar{x}, \rho) = P^T\left(\frac{x-\bar{x}}{\rho}\right) A(\bar{x}, \rho)$$

여기서 $A(\bar{x}, \rho) := \{a_1(\bar{x}, \rho), a_2(\bar{x}, \rho), \dots, a_m(\bar{x}, \rho)\}^T$ 는 미지계수를 나타내는 벡터이고 $P(x) := \{P_1(x), P_2(x), \dots, P_m(x)\}^T$ 는 $P_i(x) \in C^m$ 인 다항함수의 기저가 되는 서로 독립인 다항식이다

예를 들어 공간의 차수가 2이고 $m=2$ 이면 $P_m(x) = (1, x, y, x^2, xy, y^2)^T$ 이다.

근사식 (15)로 부터 국소 보간 오차(interpolation residual) $r(x_I, \bar{x})$ 는

$r(x_I, \bar{x}) := P^T\left(\frac{x-\bar{x}}{\rho}\right) A(\bar{x}) - u(x_I)$ 가 되며 가중함수 w_I 와 창함수 $\Phi_\rho(\bar{x} - x_I)$ 를 이용하여 나타낸 보간 오차는

$$\sum_I^m \Phi_\rho(\bar{x} - x_I) \left[P^T\left(\frac{x-\bar{x}}{\rho}\right) A(\bar{x}) - u(x_I) \right]^2 w_I \text{ 이다.}$$

이 오차를 최소화 하는 미지계수 $A(\bar{x}, \rho)$ 는

$$(16) \quad A(\bar{x}, \rho) = M^{-1}(\bar{x}) \sum_I^m P\left(\frac{x-\bar{x}}{\rho}\right) u(x_I) \Phi_\rho(\bar{x} - x_I) w_I$$

로 구해진다. 여기에서 $M(x) = \sum_I^m P\left(\frac{x-\bar{x}}{\rho}\right) P^T\left(\frac{x-\bar{x}}{\rho}\right) \Phi_\rho(\bar{x} - x_I) w_I$ 를 모멘트(Moment) 행렬이라 한다. 모멘트 행렬에서 창함수 $\Phi_\rho(\bar{x} - x_I)$ 는 대칭이므로 모

멘트 행렬 $M(x)$ 도 대칭이 되고 양의 정부호(positive definite)임을 알 수 있으므로 모멘트 행렬 $M(x)$ 은 가역(invertible)이다.

이렇게 구하여진 계수 $A(\bar{x}, \rho)$ 를 식(15)에 대입하면 근사식

$$\begin{aligned} u^h(x, \bar{x}) &\cong P^T \left(\frac{x - \bar{x}}{\rho} \right) A(\bar{x}, \rho) \\ &= P^T \left(\frac{x - \bar{x}}{\rho} \right) M^{-1}(\bar{x}) \sum_i^m P \left(\frac{x - x_I}{\rho} \right) u(x_I) \Phi_\rho(\bar{x} - x_I) w_I \end{aligned}$$

를 얻는다.

고정된 절점 \bar{x} 에 대한 국소적 근사를 'moving' 과정을 통하여 해석영역 전체에서의 근사식 $u(x) \approx P^T(0)M^{-1}(x) \sum_i^m P \left(\frac{x - x_I}{\rho} \right) u(x_I) \Phi_\rho(x - x_I) w_I$ 을 얻는다.

이로부터 형상함수는 다음과 같이 결정됨을 알 수 있다.

$$\Psi_i(x) = P^T(0)M^{-1}(x) P \left(\frac{x - x_I}{\rho} \right) \Phi_\rho(x - x_I) w_I$$

무요소 Galerkin 방법은 고체의 균열전파해석, 비점성 압축성 유체, 점성 압축성 유체, 점성 비압축성 유체 등의 해석에 성공적이었다. 그러나, 경계조건(boundary condition)구현의 복잡성과, 지배방정식의 적분 형식화에서 적분요소(background-cell)를 구성해야하는 점은 개선되어야할 부분으로 지적되어 왔다.

4. 무요소 선점법(Meshfree point collocation method)

앞서 언급된 무요소법의 단점을 보완, 극복하기 위하여 여러 가지 방법들이 제안되었다. Atluru[2] 등은 Petrov-Galerkin 방법을 이용하여 국소적으로 적분을 수행하는 방법을 제안하였으며, Breikopf[5] 등은 선점법에서 안정성을 향상시키기 위하여 이중 격자(double grid)의 사용을 제안하였다. Kim and Kim[13]은 형상함수의 도함수를 직접 미분에 의하여 구하지 않고 근사화 하는 방법에 의한 선점법을 제안하여 유체문제의 해석에 적용하였다. 그밖에도 절점적분, 안정화(stability)문제의 해결을 위하여 안정화항 사용 등의 방법이 개발되었다[10].

무요소법의 특별한 성질 중 하나인, 초기 다항 함수의 재생성(reproducing)과정은 무요소법이 선점법에 잘 적용됨을 알 수 있다. 무요소 선점법의 개발에 있어서, 지배방정식의 미분차수에 이르는 형상함수의 고차 미분은 필수적이다. 기존의 Galerkin 혹은 무요소 선점법에서는, 형상함수를 구하고 형상함수의 직접 미분을 통해 형상함수

미분을 구한다. 필요로 하는 고차 미분의 차수, 고차 미분을 구하는 방법, 그리고, 초기 다항 함수의 차수를 고려해 보면, 선점법을 구현하는데 필요한 형상함수와 형상함수 미분을 구하기 위해서는 많은 양의 계산이 필요하다. 그러나 MLSRK 방법을 이용한 무요소 선점법에서의 형상함수는 이동최소제공법에 의해 구해질 수 있고, 형상함수의 모든 근사적 미분 또한 이동최소제공법에 의해 구해 질 수 있다. 그러나, 이 근사적 미분은, 형상함수를 구해내는 과정에서 구해지므로, 형상함수 미분을 구하는데 더 이상의 계산이 필요 없다. 또한, 직접미분에 의한 형상 함수 미분을 구하는 것이 아니므로, 기존의 방법에서 미분가능한 창 함수가 필요했으나 이 방법은 연속인 창 함수만을 필요로 한다. 또한 이 방법은 선점법과 Galerkin 방법에 모두 쓰일 수 있다. 최근의 연구 결과들([1], [21], [29])을 통하여, 무요소 선점법(meshfree point collocation Methods : MPCM)은 그 효용성을 입증해 오고 있다. 이 방법은 Galerkin 방법을 이용하는 무요소법과 비교하여, 적분 요소생성이 전혀 필요 없다는 점에서 무요소법이란 용어에 보다 충실하다고 할 수 있다. 무요소 선점법을 구현하기 위해서는 형상함수와 고차미분이 필요하다. 그리고 MLSRK 방법은 고차미분에 대한 근사의 수렴성이 수학적으로 입증되었다[13].

이 과정에 의하여 생성되는 형상함수의 형태를 구하여 보자.

$X \in R^n$ 일 때 $P_m(X)$ 를 m 차 이하의 모든 다항식으로 구성되는 벡터라 하자. 절점 분포 $\Lambda = \{ X_I \in \Omega \mid I=1, 2, \dots, NP \}$ 가 $\Omega \subset R^n$ 에서 주어진다고 가정하고 창 함수 Φ 가 주어지면, 형상함수는 다음과 같이 정해진다.

$$\Psi_I^{[a]}(X) \equiv \frac{\alpha!}{\rho^{|\alpha|}} e_a^T M^{-1}(X) P_m \left(\frac{X_I - X}{\rho} \right) \Phi_\rho(dX_I - X)$$

여기에서, $\Phi_\rho(X_I - X) = \frac{1}{\rho^n} \Phi \left(\frac{X_I - X}{\rho} \right)$, $a = (a_1, a_2, \dots, a_n)$ 는 멀티 인덱스,

e_a 는 $R^{\frac{(n+m)!}{n!m!}}$ 상의 a -th unit normal 벡터를 나타낸다. 그리고, M 은 다음과 같은 모멘트 행렬이다.

$$M(X) \equiv \sum_{I=1}^{NP} P_m \left(\frac{X_I - X}{\rho} \right) P_m^T \left(\frac{X_I - X}{\rho} \right) \Phi_\rho(X_I - X)$$

$\alpha = 0$ 인 경우, $\Psi_I^{[a]}$ 는 일반적인 무요소법에서의 형상함수이다. 그러나, $\alpha \neq 0$ 인 경우, $\Psi_I^{[a]}$ 는 $\frac{\partial^\alpha \Psi_I^{[0]}}{\partial X^\alpha}$ 에 해당된다. 그러므로, 형상함수의 생성과 형상함수의 미분을 동시에 구한다.

위에서 기술된 형상함수에 의하여 초기 다항 함수와 초기 다항 함수의 모든 미분은 정확하게 재생산(reproducing)되는 성질이 있고, 절점의 증가에 따른 interpolation의

수렴성 또한 보장된다[13].

예를 들어, $n=2, m=2$, $X_I = (x_I, y_I)$, $X = (x, y)$ 일 때, 구체적인 형상함수는 다음과 같다.

$$\begin{pmatrix} \Psi_I^{[0,0]}(X) \\ \rho \Psi_I^{[1,0]}(X) \\ \rho \Psi_I^{[0,1]}(X) \\ \frac{\rho^2}{2} \Psi_I^{[2,0]}(X) \\ \rho^2 \Psi_I^{[1,1]}(X) \\ \frac{\rho^2}{2} \Psi_I^{[0,2]}(X) \end{pmatrix} = M^{-1}(X) \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{x_I - x}{\rho} \\ \frac{y_I - y}{\rho} \\ \frac{(x_I - x)^2}{\rho} \\ \frac{\rho}{(x_I - x)(y_I - y)} \\ \frac{\rho}{(y_I - y)^2} \end{pmatrix} \Phi_\rho(X_I - X)$$

이 방법을 이용한 무요소 선점법으로 다음 문제를 구해보자.

유한한 영역 $\Omega \subset R^n$, $\partial\Omega = \Gamma$ 에 대한 Poisson equation은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f & \text{in } \Omega \\ u &= g & \text{on } \Gamma_D \\ \frac{\partial u}{\partial n} &= h & \text{on } \Gamma_N \end{aligned}$$

여기서 Γ_D 는 디리클레경계, Γ_N 은 노이만 경계이고 $\Gamma_D \cup \Gamma_N = \Gamma$, $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$ 이다. 이산 해를 $U(X) = \sum_{X_j \in \Lambda} u_j \Psi_j^{[0,0]}(X)$ 라 할 때, 다음을 만족하는 이산 해를 구한다.

$$\begin{aligned} - \sum_{X_j \in \Lambda} u_j (\Psi_j^{[2,0]}(X_I) + \Psi_j^{[0,2]}(X_I)) &= f(X_I), \text{ for all } X_I \in \Lambda_i, \\ \sum_{X_j \in \Lambda} u_j (\Psi_j^{[1,0]}(X_I), \Psi_j^{[0,1]}(X_I)) \cdot n(X_I) &= h(X_I), \text{ for all } X_I \in \Lambda_n, \\ \sum_{X_j \in \Lambda} u_j \Psi_j^{[0,0]}(X_I) &= g(X_I), \text{ for all } X_I \in \Lambda_d. \end{aligned}$$

이때, Λ_i 는 영역내부의 절점이고, Λ_D 는 Dirichlet 경계 위의 절점, Λ_N 은 노이만 경계 위의 절점이라 하자. 그리고 $n(X)$ 는 Γ 위에서 정의된 외향 수직 단위 벡터이다.

무요소 선점법의 수치 예로서, 원형 장애물이 있는 이차원 파이프내의 potential 유동을 알아보자.

$\Omega = \{-3 < x < 3, -1 < y < 1\}$, $\Omega_0 = \{x^2 + y^2 < (\frac{1}{2})^2\}$ 일 때, 이 유동의 지배 방정식은 다음과 같다.

$$(17) \quad \begin{aligned} \Delta\psi &= 0, \text{ in } \Omega - \Omega_0 \\ \psi &= 0, \text{ on } \partial\Omega_0 \\ \psi &= y, \text{ on } \partial\Omega \end{aligned}$$

다음과 같은 창 함수를 사용하고 $j=4$ 일 경우의 형상함수는 그림 1과 같다.

$$\phi(X) = \begin{cases} (1-|X|)^j & \text{if } |X| < 1 \\ 0 & \text{else} \end{cases}$$

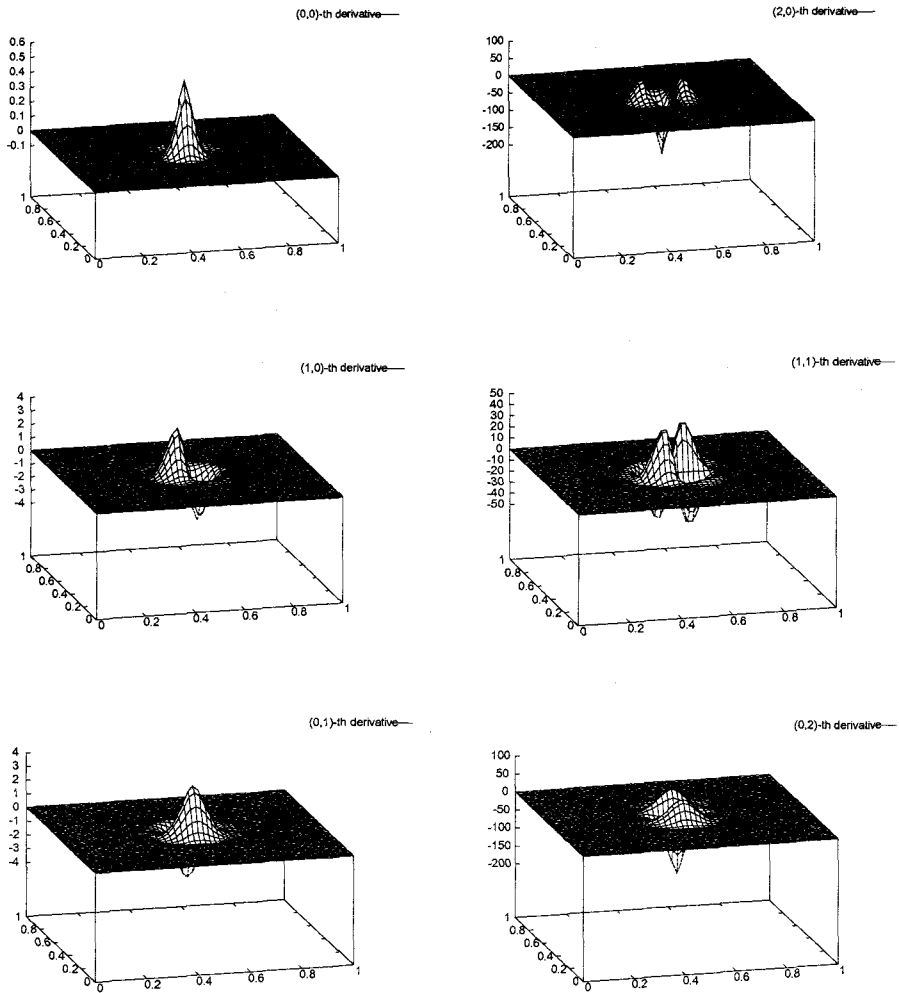


그림 1. α -th 형상 함수

식 (17)의 지배 방정식이 주어진 원형 장애물이 있는 이차원 파이프내의 potential 유동에 대해 <그림 2>와 같은 potential 유동의 stream plot을 볼 수 있다.

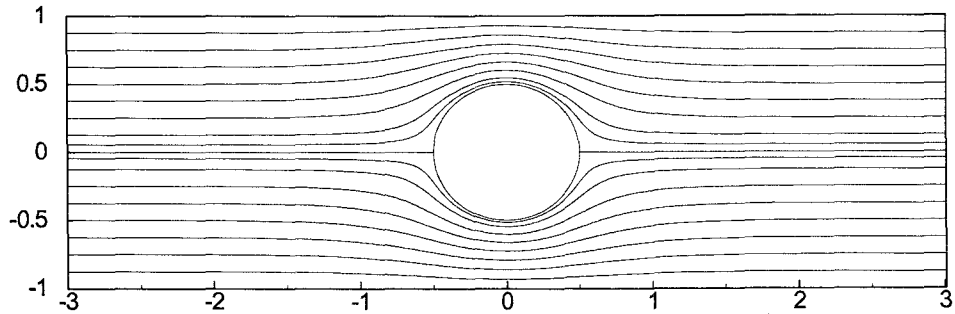


그림 2. 원형 장애물이 있는 duct 에서 potential 유동에 대한 stream-line plot

5. 결론

무요소법으로 널리 사용되고 있는 SPH방법, 무요소 Galerkin 방법 그리고 무요소 선점법의 기본 개념과 이들 수치해석기법의 방법론과 장단점을 알아보았다.

무요소법은 단순한 기본 개념에 기초하고 있으며, 복잡한 구조를 가지는 문제, 대변형 문제, 3차원 연속모델에 대한 모의실험 등에 적용의 용이함, 절점의 수를 조절함으로써 보다 정확한 형상을 나타낼 수 있고 계산의 정확도를 조절할 수 있는 편의성과 같은 장점을 가지고 있음을 알 수 있다. 무요소법은 수식화 과정의 이론개발이나 연산구조의 개선 등 아직 해결해야 할 문제들이 많이 있지만 무요소법이 갖고 있는 여러 장점들과 효율성으로 미루어 나노-역학, 생명공학, 물리학의 모의실험, 다양한 유체의 유동에 관한 해석 등 과학과 공학 분야의 수치해석에 유용한 방법론으로 사용될 것으로 기대된다.

참고 문헌

1. Aluru NR., "A point collocation method based on reproducing kernel approximations", Int. J. Numer. Methods Engng. Vol. 47, No. 6, pp. 1083-1121., 2000.
2. Atluri SN, Kim HG, Cho JY., "A critical assessment of the truly Meshless Local Petrov-Galerkin(MLPG) Methods." Comput. Mech. Vol. 24, No. 5, pp. 348-372., 1999.
3. Belytschko, T. Lu YY, Gu L., "A New Implementation of the Element Free Galerkin Method.", Comput. Methods Appl. Mech. Engng., Vol. 113, No. 3-4, pp.397-414., 1994
4. Belytschko, T. Tabbara, M., "Dynamic fracture using element free Galerkin Method.", J. Comput. Methods and Appl. Math.. Vol. 74, pp. 111-126, 1997.
5. Breitskopf P. Touzot G. Villon P., "Double grid diffuse collocation Methods", Computational Mechanics, Vol. 25, No. 2/3 pp. 180-198., 2000.
6. Choe HJ, Kim DW, Kim HH, Kim YS., "Meshless method for the stationary incompressible Navier-Stokes equations." *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. B* Vol. 1, No.4, pp. 495--526., 2001.
7. Dilts. G., "Moving-least-square- particle hydrodynamics I. consistency and stability", Int. J. Numer. Methods Engng. Vol. 44, pp. 1115-1155, 1999.
8. Dilts. G., "Moving-least-square- particle hydrodynamics II. conservation and boundaries", Int. J. Numer. Methods Engng. Vol. 48, pp. 1503-1524., 2000.
9. Duarte CA, J. T. Oden JT., "An h-p adaptive method using clouds". Comput. Methods Appl. Mech. Engng. Vol. 139, No. 1-4, pp. 237--262., 1996.
10. Gingold RA, Monaghan JJ., "Smoothed Particle Hydrodynamics : theory and application to non-spherical stars", Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, Vol. 181, pp. 275-389., 1977.
11. Gunther F, Liw WK, Diachin D., "Multi--Scale Meshfree Parallel Computations for Viscous, Compressible Flows." Comput. Methods Appl. Mech. Engng. Vol. 190, No.3-4, pp. 279--303., 2000.
12. Hao, S, Park, HS. and Liu, W. K., "Moving Particle Finite Element Method", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 53, pp. 1937-1958., 2002.
13. Kim DW, Kim YS., "Point collocation Methods using the fast moving least square reproducing kernel approximation", Int. J. Numer. Methods Engng. Vol. 56, 1445-1464., 2003.
14. Li S, Liu WK., "Reproducing Kernel Hierarchical Partition of Unity, Part I --

- Formulation and Theory*", Int. J. Numer. Methods Engng. Vol. 45, No. 3, pp. 251-288., 1999.
15. Li S, Liu WK., "*Reproducing Kernel Hierarchical Partition of Unity, Part II -- Applications.*" Int. J. Numer. Methods Engng. Vol. 45, No. 3, pp. 289-317., 1999
 16. Li S, Liu WK, *Meshfree particle Methods*, Springer., 2004.
 17. Liu WK, Jun S, Zhang YF., "*Reproducing kernel particle Methods*", Int. J. Numer. Methods Fluids., Vol. 20, No. 8-9, pp. 1081-1106., 1995
 18. Liu WK, Jun S, Li S., Adee J, Belytschko T. "*Reproducing Kernel Particle Methods for Structural Dynamics*", Int. J. Numer. Methods Engng. Vol. 38, No. 10, pp. 1655-1679., 1995.
 19. Liu WK, Li S, Belytschko T., "*Moving Least Square Reproducing Kernel Methods (I) Methodology and Convergence*", Comput. Methods Appl. Mech. Engng. Vol. 143, No. 1-2, pp. 113-154., 1997.
 20. Lucy, L. B., "*A numerical approach to the testing of the fission hypothesis*", The Astronomical Journal, Vol. 82, pp. 1013-1024., 1977.
 21. Luo Y., "*A generalized finite-difference method based on minimizing global residual.*" Comput. Methods Appl. Mech. Engng. Vol. 191, No. 13-14, pp. 1421-1438., 2002.
 22. Melenk JM, Babuska., "*The Partition of Unity Finite Element Method : basic theory and applications.*" Comput. Methods Appl. Mech. Engng. Vol. 139, No. 1-4, pp. 289-314., 1996.
 23. Michael Griebel, Marc Alexander Schweitzer, *Meshfree Methods for partial differential equations*, Springer, 2000.
 24. Morris, J. P., "*Stability properties of SPH*", Publ. Astron. Soc. Aust. Vol. 13 pp 97-25. Nayroles B, Touzot G, Villon P. (1992), "*Generalizing the Finite Element Method : Diffuse Approximation and Diffuse Elements*", Comput. Mech., Vol. 10, pp. 307-318., 1996.
 26. Neiderreiter H., "*Quasi-Monte Carlo Methods and pseudo-random numbers*", Bull. Amer. Math. Soc. Vol. 84, pp. 205-219. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 1., 1978.
 27. Onate, E., Idelson, S., Zienkiewicz, O. C., Taylor, R. I. and Sacco C., "*A Stabilized Finite Point Method of Analysis of Fluid Mechanics Problems*", 39: pp. 15-21., 1996.
 28. Zhu T, Zhang J, Atluri SN. "*A meshless local boundary integral equation (LBIE) method for solving nonlinear problems.*" Comput. Mech. Vol. 22, No. 2, pp. 174-186., 1998.

29. Zhang X, Liu X, Song K, Lu MW. "Least-square collocation meshless method." *Int. J. Numer. Methods Engng.* Vol. 51, No. 9, pp. 1089-1100., 2001.

Development of meshfree particle Methods

Division of mathematics and statistics, Sookmyung Women's Univ. **Jin Ho Lee**

Finite element Methods(FEM) have been the primary computational methodologies in science and engineering computations for more than half centuries. One of the main limitations of the finite element approximations is that they need mesh which is an artificial constraint, and they need remeshing to solve in some special problems. The advantages in meshfree Methods is to develop meshfree interpolant schemes that only depends on particles, so they relieve the burden of remeshing and successive mesh generation.

In this paper we describe the development of meshfree particle Methods and introduce the numerical schemes for Smoothed Particle hydrodynamics, meshfree Galerkin Methods and meshfree point collocation mehtods. We discusse the advantages and the shortcomings of these Methods, also we verify the applicability and efficiency of Meshfree Particle Methods.

Key words : Meshfree, Hydrodynamics, Galerkin Methods, least square methods, collocation, shape function

2000 Mathematics Subject Classifications : 65D, 65K10, 65N

논문 접수 : 2005년 9월 16일

심사 완료 : 2005년 11월