

## 고속 최소 자승법을 이용한 점별 계산법

### The Fast Moving Least Square Reproducing Kernel Approximation and Point Collocation Method

김 용 식\*                      김 도 완\*\*  
Kim, Yongsik                 Kim, Do-Wan

---

#### ABSTRACT

새로운 자유격자 근사를 이용한 점별 계산법을 제안한다. 이동 최소 자승법을 이용한 기저의 생성과 기저의 근사적 미분을 동시에 구해내는 자유격자 근사를 유도하여, 직접 점별 계산법을 고안하였다. 기존의 자유 격자 법에서는 기저의 직접 미분을 사용하므로 높은 계산 비용이 필요하지만, 이 논문에서 제안된 방법은 기저의 생성과 동시에 기저의 근사적 미분을 구하게 된다. 또한 기존의 방법에서 필요하였던, 창 함수(window function)의 미분가능성을 연속성으로 대체할 수 있으므로, 주어진 문제에 따라 다양한 창 함수를 이용할 수 있다. 기저의 재생성과 interpolation의 수렴성을 소개하고, 수치 예제로서, Poisson 문제를 통해 이 방법의 유효함을 보인다.

---

#### 1. 서 론

최근 10여 년을 통하여, 다양한 자유 격자법이 제안되었다. 대표적인 것들로서, Gingold와 Monaghan(1977)[1]의 Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH), Nayrole et al.(1992)[2]의 diffuse element method (DEM), Belytschko et al.(1994)[3]의 element free Galerkin method (EFG), Liu et al.(1995)[4, 5]의 reproducing kernel particle method (RKPM), Babuska와 Melenk(1996)[6]의 partition of unity finite element method (PUFEM), Duarte 와 Oden (1996)[7]의 h-p Clouds, Liu et al.(1996)[8]의 moving least square reproducing kernel method (MLSRK), Zhu et al.(1998)[9]의 meshless local boundary integral equation method (LBIE), Atluri et al.(1999)[10]의 meshless local Petrov-Galerkin method (MLPG), Aluru(2000)[11]의 meshless point collocation methods 등이 있다.

수년전까지, 자유격자법의 주류는 Galerkin 방법을 이용한 것이었고, 고체의 균열 전파해석, 비점성 압축성 유체 [12, 13], 점성 압축성 유체[14], 점성 비압축성 유체[15] 등의 해석에 성공적이었다. 그러나, 경계조건(essential boundary condition) 구현의 복잡성과, 지배방정식의 적분 형식화에서 피할 수 없는 적분요소(background-cell) 구성등과 같은 개선을 필요로 하는 부분이 지적되어 왔다.

한편, 자유 격자법의 특별한 성질 중 하나인, 초기 다항 함수의 재생성은 자유 격자법이 점별 계산법과 잘 조화될 수 있음을 짐작하게 한다. 최근의 연구 결과들[11, 17, 18, 19]을 통하여, 자유격자 점별 계산법(meshfree point collocation methods : MPCM)은 그 효용성을 입증해 오고 있다. 이 방법의 장점은 Galerkin 방법을 이용하는 자유격자법과 비교하여, 적분 요소생성이 전혀 필요 없다는 점이라 할 수 있고, 그런 점에서, 엄밀한 의미의 자유 격자법이라 할 수 있다. 자유격자 점별 계산법을 구현하기 위해서는 형상함수의 고차미분이 필요하다. 그리고 MLSRK 방법은 고차미분에 대한 근사의 수렴성이 수학적으로 이미 입증되어 있다[8, 15]. 기존의 자유격자 점별 계산법이 MLSRK 근사를 이용한 이유도 여기에 있다 할 수 있다.

---

\* 연세대학교 수학과 연구교수, yskim67@yonsei.ac.kr

\*\* 선문대학교 수학과 부교수, dwkim@sunmoon.ac.kr

점별 계산법의 개발에 있어서, Galerkin 방법에서 필요하지 않았던, 지배 방정식의 미분차수에 이르는 형상함수의 고차 미분은 필수적이다. 자유격자법의 형상함수와 그 미분의 생성 비용이 FEM, FDM의 그것들과 비교하여 높다는 것을 고려해 볼 때, 지배방정식의 미분차수까지의 형상함수 고차 미분을 모두 구해내는 비용은 어느 정도 일까라는 의문이 생기게 된다. 기존의 Galerkin 혹은 점별 계산 자유 격자법에서는, 형상함수와 형상함수의 미분을 따로 계산해 왔다. 즉, 형상함수의 직접 미분을 통해 형상함수 미분을 구한다. 그리고, 점별 계산법의 정확성을 위해서는 높은 차수의 초기 다항 함수가 필요하다. 초기 다항 함수의 차수는 형상함수를 구하는데 필요한 Moment 행렬의 크기를 결정한다. 즉, 필요로 하는 고차 미분의 차수, 고차 미분을 구하는 방법, 그리고, 초기 다항 함수의 차수를 고려해 보면, 점별 계산법을 구현하는데 필요한 형상함수와 형상함수 미분을 구하는 비용은 매우 비싸질 가능성이 있다. 필요한 형상 함수의 고차 미분 차수는 지배 방정식에 의해 결정되고, Moment 행렬의 크기는 전체 scheme의 정확도를 결정하는 초기 다항 함수에 의해 정해진다. 따라서, 고차미분 차수와 초기 다항 함수의 차수는 희생될 수 없다.

이러한 이유로, 우리는 형상함수의 미분을 근사적으로 구하는 새로운 방법을 제안하게 된다. 자유격자 형상함수는 이동 최소 자승법에 의해 구해 질 수 있고, 형상 함수의 모든 근사적 미분 또한 이동최소 자승법에 의해 구해 질 수 있다. 그러나, 이 근사적 미분은, 형상함수를 구해내는 과정에서 버려지는 양들을 이용하여 구해지므로, 형상 함수 미분을 구하는데 필요한 더 이상의 비용은 없다. 즉, 기존의 형상함수를 구하는 비용으로, 형상함수와 형상함수의 모든 고차미분(초기 다항 함수의 차수까지) 동시에 구할 수 있다. 또한, 직접미분에 의한 형상 함수 미분을 구하는 것이 아니므로, 창 함수(window function)의 선택이 자유롭다. 기존의 방법에서 미분가능한 창 함수가 필요했으나, 이 방법은 연속인 창 함수만을 필요로 한다. 이 논문에서 제안된 자유격자 근사는 점별 계산법과 Galerkin 방법에 모두 쓰일 수 있다. 차후로 이 방법을 고속 최소 자승법(fast moving least square reproducing kernel method : FMLSrk )이라 부르기로 한다.

대수적 관점에서 보았을 때, MLSrk 형상함수는 Moment 행렬의 역 행렬과 초기 다항 함수, 창 함수의 곱으로 구성되는데, 그 중에서도, 역 행렬의 첫 번째 행이 형상함수를 결정한다. 그렇다면, 그 역 행렬의 나머지 행들은 어떤 역할을 할 수 있는지에 대한 자연스런 의문이 생기게 된다. 이러한 방향으로 기존에 연구되어진 결과들은 [20, 21, 22] 등이 있다. 그들의 결과는 Moment 행렬의 역 행렬을 이용한 계층적 기저를 만들 수 있고, 이러한 계층적 기저는 high frequency error를 줄이는데 매우 효과적임을 보여준다. 그러나, 그러한 계층적 기저와 형상함수와의 관계에 대한 고찰은 연구되지 않았다.

본문에서, FMLSrk를 이용한 직접 점별 계산법, 이 방법에 의한 초기 다항 함수의 재생성, interpolation의 수렴성을 소개한다. 수치 예제로서, Poisson 문제가 고려되었다. Poisson 문제에 대하여, 고른 절점 분포와 임의의 절점 분포에 대한 수치해의 수렴성을 보였다. 구체적인 예로서, 원형의 장애물이 있는 이차원 파이프에서의 Potential 유동을 구현하였다.

## 2. 고속 최소 자승법(The Fast Moving Least Square Reproducing Kernel Approximation)

이 장에서는 고속 최소 자승법에 의해 생성되는 형상함수의 형태를 개략적으로 설명한다. FMLSrk 근사와 다른 자유격자법의 가장 큰 차이점은 형상 함수의 미분을 구하는 방법이다. FMLSrk 형상함수의 미분은 형상함수 자체를 구하는 과정에서 더 이상의 비용 없이 구해진다. 형상함수의 자세한 유도과정은 참고문헌[23]을 참조한다.

$X \in R^n$  일 때  $P_m(X)$ 를  $m$ 차 이하의 모든 다항식으로 구성되는 벡터라 하자. 예를 들면,  $n=2, m=2$ 일 경우  $P_m(X) = (1, x, y, x^2, xy, y^2)^T$  이다. 절점 분포  $A = \{ X_I \in Q \mid I=1, 2, \dots, NP \}$ 가  $Q \subset R^n$ 에서 주어졌다고 가정하고, 연속이고, 유한한 영역에서 정의되는(compactly supported) 창 함수  $\phi$ 가 주어지면, FMLSrk 형상함수는 다음과 같이 정해진다.

$$\psi_I^{[a]}(X) \equiv \frac{a!}{\rho^{1+a}} e_a^T M^{-1}(X) P_m \left( \frac{X_I - X}{\rho} \right) \phi_\rho(X_I - X)$$

여기에서,  $\phi_\rho(\mathbf{X}_I - \mathbf{X}) = \frac{1}{\rho^n} \phi\left(\frac{\mathbf{X}_I - \mathbf{X}}{\rho}\right)$ ,  $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ 는 멀티 인덱스,  $\mathbf{e}_\alpha$ 는  $\mathbf{R}^{\frac{(n+m)!}{n!m!}}$  상의

$\alpha$ -th unit normal 벡터를 나타낸다. 그리고,  $\mathbf{M}$ 은 다음과 같은 moment 행렬이다.

$$\mathbf{M}(\mathbf{X}) \equiv \sum_{l=1}^{NP} P_m\left(\frac{\mathbf{X}_I - \mathbf{X}}{\rho}\right) P_m^T\left(\frac{\mathbf{X}_I - \mathbf{X}}{\rho}\right) \phi_\rho(\mathbf{X}_I - \mathbf{X})$$

예를 들어,  $n=2, m=2$ ,  $\mathbf{X}_I = (x_I, y_I)$ ,  $\mathbf{X} = (x, y)$  일 때, 구체적인 형상함수는 다음과 같다.

$$\begin{pmatrix} \psi_I^{[0,0]}(\mathbf{X}) \\ \rho \psi_I^{[1,0]}(\mathbf{X}) \\ \rho \psi_I^{[0,1]}(\mathbf{X}) \\ \frac{\rho^2}{2} \psi_I^{[2,0]}(\mathbf{X}) \\ \rho^2 \psi_I^{[1,1]}(\mathbf{X}) \\ \frac{\rho^2}{2} \psi_I^{[0,2]}(\mathbf{X}) \end{pmatrix} = \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{X}) \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{x_I - x}{\rho} \\ \frac{y_I - y}{\rho} \\ \frac{(x_I - x)^2}{\rho} \\ \frac{\rho}{(x_I - x)(y_I - y)} \\ \frac{(y_I - y)^2}{\rho} \end{pmatrix} \phi_\rho(\mathbf{X}_I - \mathbf{X})$$

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

위에서 기술된 FMLSrk 형상함수에 의하여 초기 다항 함수와 초기 다항 함수의 모든 미분은 정확하게 재생산(reproducing)되는 성질이 있고, 절점의 증가에 따른 interpolation의 수렴성 또한 보장된다.[23]

### 3. 고속 최소 자승법을 이용한 점별 계산법

수치 예에서 쓰여진 창 함수는 다음과 같다.  $j=4$  일 경우의 형상함수를 그림 1에 보였다.

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

유한한 영역  $\Omega \subset \mathbf{R}^n$ ,  $\partial\Omega = \Gamma$ 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  $\Gamma_D$ 는 Dirichlet 경계,  $\Gamma_N$ 은 노이만 경계이고  $\Gamma_D \cup \Gamma_N = \Gamma$ ,  $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$ 이다. 이 문제에 대한, FMLSrk 점별 계산은 다음 식을 따른다. 이산 해를  $U(\mathbf{X}) = \sum_{\mathbf{X}_I \in \Lambda} u_j \psi_j^{[0,0]}(\mathbf{X})$ 라 할 때, 이산 해는 다음을 만족한다.

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

이때,  $\Lambda_i$  는 영역내부의 절점이고,  $\Lambda_D$  는 Dirichlet 경계 위의 절점,  $\Lambda_N$  은 노이만 경계 위의 절점이라 하자. 그리고  $\mathbf{n}(X)$  는  $\Gamma$  위에서 정의된 외향 수직 단위 벡터이다.

수치 해의 수렴성에 대한 예로서 다음 방정식을 생각한다.

$$\begin{aligned} -\Delta u &= -2e^{x-y} \text{ in } \Omega = [0,1] \times [0,1] \\ u &= e^{x-y} \text{ on } \partial\Omega \end{aligned}$$

이 경우 해는  $u(x,y) = e^{x-y}$  이다. 격자계 절점의 수를 121, 441, 1681로 변화시킬 경우 수치 해와 실험의 상대오차를 그림 2에서 볼 수 있다. 임의로 주어진 절점(그림3)에 대한 상대오차(그림4)와 차이를 보이지 않음을 알 수 있다. 그림 5, 6을 통하여, 창 함수의 선택이  $j=4$  일 때 유리함을 알 수 있다.

구체적인 수치 예로서, 원형 장애물이 있는 이차원 파이프내의 potential 유동을 구현하였다. 절점의 분포는 그림 7를 따른다.  $\Omega = \{-3 < x < 3, -1 < y < 1\}$ ,  $\Omega_0 = \{x^2 + y^2 < (\frac{1}{2})^2\}$  일 때, 이 유동의 지배 방정식은 다음과 같다.

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

상수  $C$  는 potential 유동의 circulation을 의미한다. 그림 8에서 potential 유동의 stream plot을 볼 수 있다.

### 3. 결 론

FMLSRK를 이용한 점별 계산법이 제안되었다. FMLSRK는 국소 근사 operator로부터 유도되어진 형상함수의 근사 미분을 이용한다. 형상 함수의 직접 미분을 구하는 기존의 자유 격자법에 비하여, 획기적으로 계산비용을 줄일 수 있고, 수치 해의 고도 정밀성을 보장한다.

### 참고 문헌

1. Gingold RA, Monaghan JJ. "Smoothed Particle Hydrodynamics : theory and application to non-spherical stars", *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Vol.181, 1977, pp.275--389.
2. Nayroles B, Touzot G, Villon P. "Generalizing the Finite Element Method : Diffuse Approximation and Diffuse Elements", *Comput. Mech.*, Vol.10, 1992, pp.307--318.
3. Lu YY, Belytschko T, Gu L. "A New Implementation of the Element Free Galerkin Method.", *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, Vol.113, No.3-4, 1994, pp.397--414.
4. Liu WK, Jun S, Zhang YF. "Reproducing kernel particle methods.", *Int. J. Numer. Methods Fluids.*, Vol.20, No.8-9, 1995, pp.1081--1106.
5. 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, 1995, pp.1655--1679.
6. Melenk JM, Babuska I. "The Partition of Unity Finite Element Method : basic theory and applications." *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.* Vol.139, No.1-4, 1996, pp.289--314.

7. Duarte CA, J. T. Oden JT. "An h-p adaptive method using clouds." *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.* Vol.139, No.1-4, 1996, pp.237--262.
8. 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, 1997, pp.113--154.
9. Zhu T, Zhang J, Atluri SN. "A meshless local boundary integral equation(LBIE) method for solving nonlinear problems." *Comput. Mech.* Vol.22, No.2, 1998, pp.174--186.
10. Atluri SN, Kim HG, Cho JY. "A critical assessment of the truly Meshless Local Petrov-Galerkin(MLPG) methods." *Comput. Mech.* Vol.24, No.5, 1999, pp.348--372.
11. Aluru NR. "A point collocation method based on reproducing kernel approximations." *Int. J. Numer. Methods Engng.* Vol.47, No.6, 2000, pp.1083--1121.
12. Liu WK, Jun S, Sihling DT, Chen Y, Hao W. "Multiresolution Reproducing Kernel Particle Method for Computational Fluid Dynamics." *Int. J. Numer. Methods Engng.* Vol.24, 1997, pp.1391-1415.
13. Kim YS, Choe HJ, Ahn MY, Chang KS. "Analysis of a meshfree method for the compressible Euler equations." preprint.
14. 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, 2000, pp.279--303.
15. 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, 2001, pp.495--526.
16. Choe HJ, Kim DW, Kim HH, Kim YS. "Meshfree method for the non-stationary incompressible Navier-Stokes equations." preprint.
17. Furst J, Sonar T. "On Meshless Collocation Approximations of Conservation Laws : Preliminary Investigations on Positive Schemes and Dissipation Models." *Z. Angew. Math. Mech.* Vol.81, 2001, pp.403--415.
18. Zhang X, Liu X, Song K, Lu MW. "Least-square collocation meshless method." *Int. J. Numer. Methods Engng.* Vol.51, No.9, 2001, pp.1089--1100.
19. Luo Y, HVAussler-Combe U. "A generalized finite-difference method based on minimizing global residual." *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.* Vol.191, No.13-14, 2002, pp.1421--1438.
20. Li S, Liu WK. "Synchronized Reproducing Kernel Interpolation via Multiple Wavelet Expansion." *Comput. Mech.* Vol.21, No.1, 1998, pp.28--47.
21. Li S, Liu WK. "Reproducing Kernel Hierarchical Partition of Unity, Part I -- Formulation and Theory." *Int. J. Numer. Methods Engng.* Vol.45, No.3, 1999, pp.251--288.
22. Li S, Liu WK. "Reproducing Kernel Hierarchical Partition of Unity, Part II -- Applications." *Int. J. Numer. Methods Engng.* Vol.45, No.3, 1999, pp.289--317.
23. Kim DW, Kim YS. "Point collocation methods using the fast moving least square reproducing kernel approximation." *Int. J. Numer. Methods Engng.* 2002, to appear.
24. Kim DW, Kim YS. "Point collocation method with meshfree approximation using dilation function." submitted.
25. Kim YS, Kim DW. "Point Collocation Scheme for the Stationary Incompressible Navier-Stokes Equations by FMLSrk." submitted.

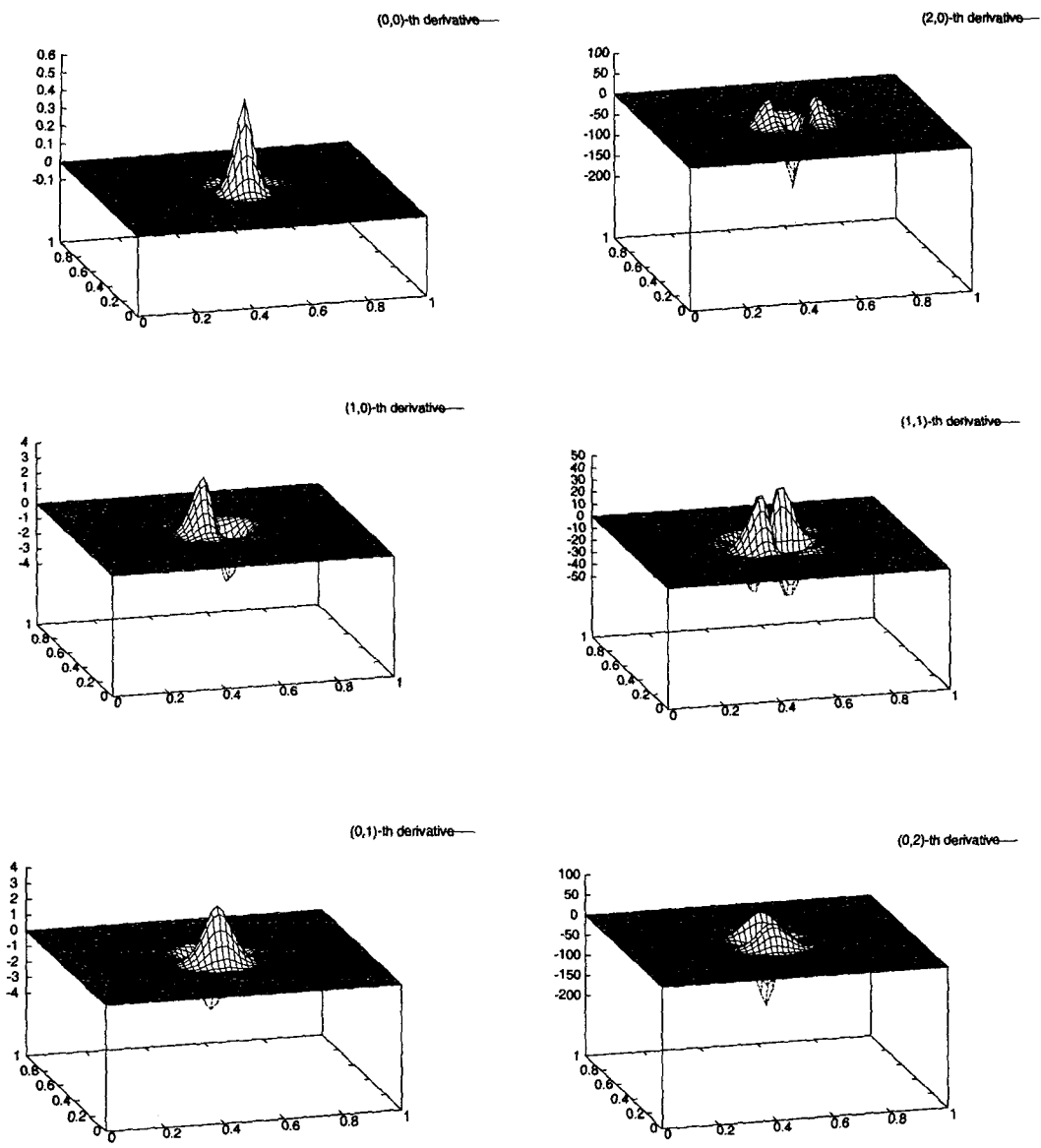


그림 1.  $\alpha$ -th 형상 함수

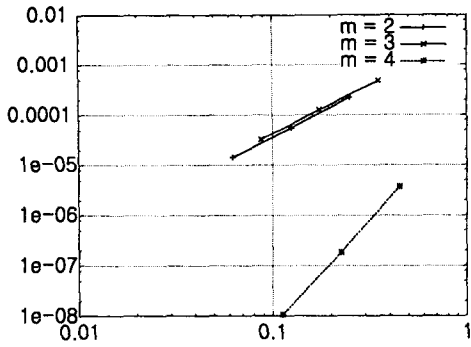


그림 2. 수렴비(격자계 절점)

x : dilation parameter, y : relative L2 error

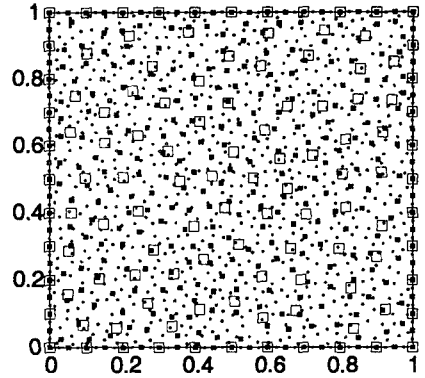


그림 3. random node sets

(114, 334, 998)

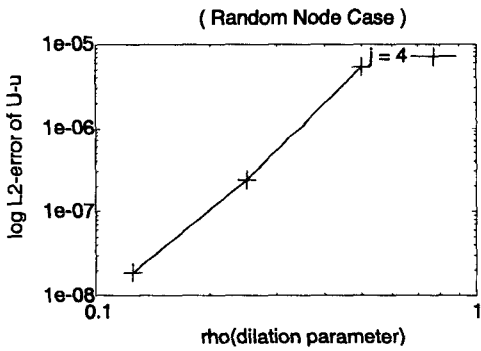


그림 4. 수렴비(임의의 절점, 그림 3 참조)

x : dilation parameter, y : relative L2 error

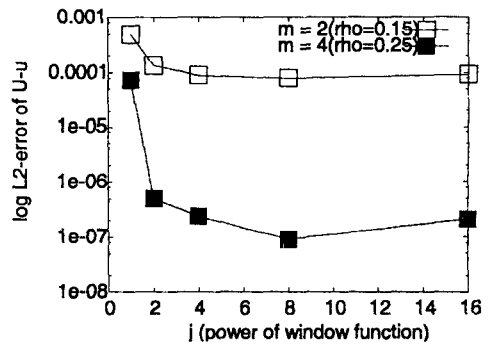


그림 5. 창 함수에 따른 상대 오차

(334 nodes)

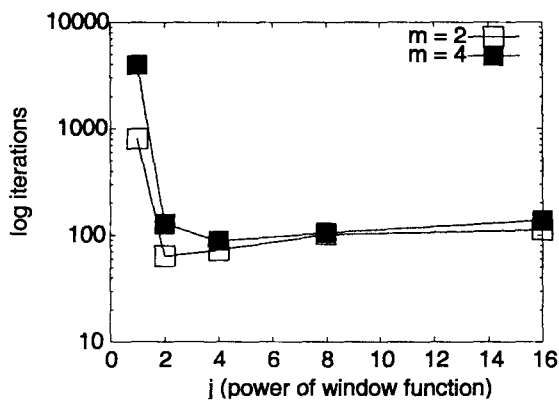


그림 6. Iteration in CGM, (334 nodes)

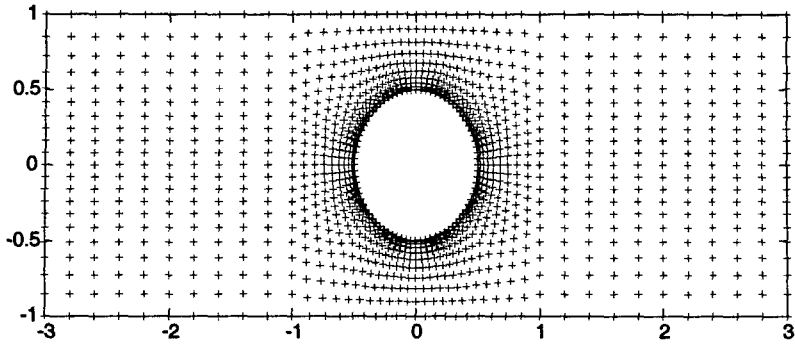
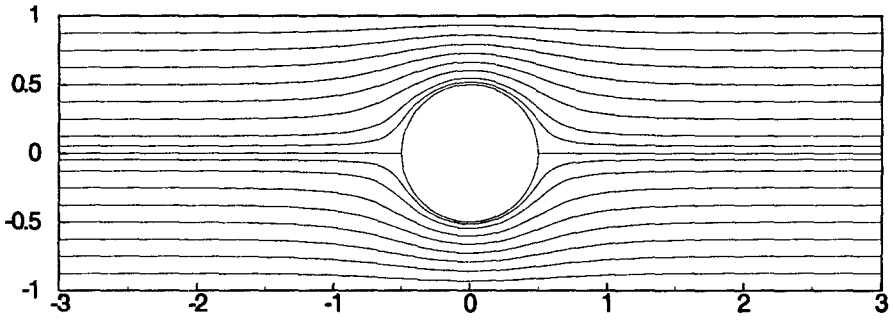
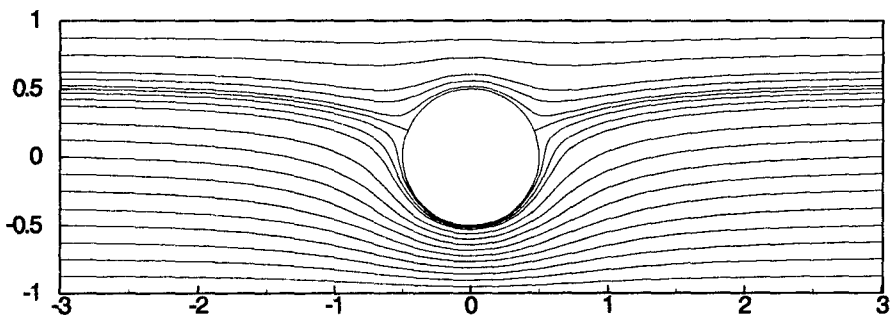


그림 7. potential 유동의 절점 분포



1)  $C = 0$



2)  $C = 0.5$

그림 8. 원형 장애물이 있는 duct 에서 potential 유동에 대한 stream-line plot