第貳章
數值技巧

2.1 引言

第一章已介紹過積分方程的相關數學理論，知其為一種數學表示式。就工程實際應用的觀點而言，當問題的定義域與邊界狀況相當複雜時，若欲以解析方式來求解的話，有其困難。因此，訴諸數值處理實不可免。本章即針對積分方程的數值解法作一介紹。而所謂數值技巧乃指將積分方程離散化，其中包括邊界元素分割、未知密度函數的內插表示法，奇異核函數的奇異積分、奇異核函數於非奇異積分區間的正規積分、影響係數矩陣的計算、線性代數方程式之反算與求解等，將於下面章節予以介紹。

2.2 積分方程之離散化

傳統的有限元素分析係針對問題的定義域作離散化處理。而邊界元素法則是將邊界上欲求的未知密度函數以節點未知量和內插函數的乘積和來表示，此乃是有限元素的觀念，只是邊界元素對邊界作離散，而有限元素則對整個問題的定義域區間作離散。於實際積分計算時，當積分區間 $dB(s)$ 不含配置點 x 時，此正規積分可由黎曼和的積分觀念離散之。當積分區間 $dB(s)$ 含配置點 x 時，由於核函數的奇異特性，此奇異積分需由 Cauchy 或 Hadamard 的主值觀念求得。求得以上之影響係數後，即可建立邊界未知節點量的代數方程式，即可求解之。

為說明積分方程的離散化過程，特以一維積分式表示如下

$$\phi(x) = \int_a^b K(s,x)\phi(s)ds + p(x), \quad a < x < b \tag{2.1}$$

此積分方程的離散表示式為

$$\phi(x) = \sum_{i=1}^{n} K(s_i, x)\phi(s_i)\Delta s_i + p(x) \tag{2.2}$$

其中， $s_1 = a$ ， $s_n = b$ ， Δs_i 表示第 i 個元素長度， $\phi(s_i)$ 表示未知密度函數於節點 s_i 之物理量， n 表示元素總數，如下圖 2.1 所示，

圖 2.1　未知函數 $\phi(s)$ 離散示意圖

若欲求得 $\phi(s_i)$ ， $i = 1 \sim n$ ，可將離散式之 $x = s_j (j = 1 \sim n)$ 代入 (2.2) 式，這個過程即是選點 (collocation) ，經由 (2.2) 式離散後，即可得到 n 個方程式，來求解 n 個未知量，以矩陣式表示如下:

$$\begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} & \cdots & K_{1n} \\ K_{21} & \cdots & \cdots & \vdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ K_{n1} & K_{n2} & \cdots & K_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi(s_1) \\ . \\ . \\ \phi(s_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p(s_1) \\ . \\ . \\ p(s_n) \end{bmatrix}$$

其中， K 矩陣稱為特性矩陣或影響係數矩陣， K_{ij} 稱為影響係數。同理，針對問題所給定義域之不同，前述方法可推廣應用到二維積分式的離散化。

2.3　邊界元素分割

前一節已提及積分方程離散過程中，需先將邊界元素及邊界上的未知密度函數作離散，本節將討論如何依問題的維度選取適當的邊界元素，並作分割的處理，至於邊界上的未知密度函數則於下一節說明。

若依問題積分區間的幾何維度來分的話，邊界元素可分為以下三類:

(1) 一維問題的點元素，參見圖 2.2 。

(2) 二維問題的一維線元素，參見圖 2.3 。

圖2.2　一維問題的點元素

..

..

..

..

..

圖2.3　二維問題的一維線元素

(3) 三維問題的二維面元素，參見圖2.4 。

(4) 三維問題的三維固體元素，參見圖2.4 。若無分佈轍體源或轍體力，則無需要。但如域內有分佈力、動態或非線性等問題，邊界元素法是會用到固體元素，也稱細胞(Cell)。

圖2.4　三維問題的二維面元素與固體元素

所謂邊界元素之離散，其實就是邊界幾何條件的模擬，亦即邊界嵌合，可以如下之數學式表示

$$x = \sum N_i x_i$$

$$y = \sum N_i y_i$$

其中， N_i 表示幾何內插函數， x_i, y_i 為節點座標值。上述之內插函數 N 的階數，可有以下之選擇:

(1) 當內插函數 N 的階數為 0 時，稱為常數元素。

(2) 當內插函數 N 的階數為 1 時，稱為線性元素。

(3) 當內插函數 N 的階數為 2 時，稱為二次元素。

2.4 未知密度函數的內插表示法

求解積分方程就是要解積分方程內的未知函數，因此於數值處理時，需以未知節點量 (ϕ_i) 與內插函數 (N_i') 來離散未知函數，可以如下之數學式表示

$$\phi(x) = \sum N_i'\phi_i$$

其中， N' 表示物理量內插函數， ϕ_i 表示節點物理量。同理，若依內插函數 N' 的階數來區分的話，可分為以下三種:

(1) 當內插函數 N' 的階數為 0 時，稱為常數元素。

(2) 當內插函數 N' 的階數為 1 時，稱為線性元素。

(3) 當內插函數 N' 的階數為 2 時，稱為二次元素。

以一維積分式為例，說明如下圖 2.5 ～ 2.8 :

(1) 常數元素　$N'(x) =$ 常數

圖 2.5　常數元素

(2) 線性元素　$N'(x) = ax + b$

圖 2.6　線性元素

(3) 二次元素　$N'(x) = ax^2 + bx + c$

圖 2.7　二次元素

..

..

..

..

..

..

..

圖 2.8　邊界元素

綜合以上兩節，可看出內插函數分成兩部份:

(1) 幾何內插函數 N —— 模擬邊界幾何形狀。

(2) 物理量內插函數 N' —— 模擬物理量分佈。

依內插函數的特性，於有限元素法與邊界元素法中，均定義如下:

(a). 當 $O(N) = O(N')$ 時，稱等參數元素，如 Q8 元素。

(b). 當 $O(N) > O(N')$ 時，稱超參數元素，如常數元素。

(c). 當 $O(N) < O(N')$ 時，稱次參數元素，如梁元素。

，上式中 $O(N)$ 表示內插函數的階數，參見圖 2.9 。 ..

..

..

..

..

..

..

..

..

..

..

..

..

圖 2.9 次、等、超參數元素示意圖

2.5 奇異函數於非奇異區間的正規積分

一般積分方程所使用的核函數，均為源點 s 到場點 x 之距離 r 的函數。當 x 逼近 s 時 $(x \to s)$ ，會出現 $ln(r)$, $1/r$, 或 $1/r^2$ 的奇異行為。於 $r = 0$ 時，會有奇異性產生，即核函數值會趨近於無限大。因此在作積分式之邊界元素離散時，會有兩種情況發生 (i). 若 x 並不在積分區間 $dB(s)$ 內時，該積分為正規積分， (ii). 若 x 座落在積分區間內時，該積分為奇異函數的奇異積分，如下圖 2.10 ∼ 2.11 所示。

圖 2.10 正規積分區間 圖 2.11 奇異積分區間

前者 (正規積分) 將於本節說明，後者 (奇異積分) 則於下節說明。

求奇異核函數的正規積分有下列幾種方法，

(1) 解析式 — 可由數學手冊查得或以符號運算程式執行，如 MACSYMA, REDUCE 或 Mathematica 等符號運算程式。

(2) 數值法

當解析式不易求得時，可利用數值法，常用方法如下

(a). 梯形法則 — 直接由梯形公式算面積來近似積分值。

(b). Simpson 法 — 由權數 1/6, 4/6, 1/6 配合樣品點上之函數值相乘總和可得積分值。

(c). Romberg 法 — 此法精確度高但較費時，請參閱林聰悟教授之“工程基本程式”一書。

(d). Gaussian Quadrature Formula — 由高斯點之函數值與高斯權值相乘積之和，即為積分值。

以上可參考數值方法的書，將有較詳細的介紹。

2.6　奇異核函數於奇異區間的奇異積分

奇異函數的奇異積分亦有多種方法，分述於下

(1) 解析式 —— 可由數學手冊查得或以符號運算程式執行，如 MACSYMA,REDUCE 或 Mathematica 等符號運算程式。

(2) 數值積分法 —— 直接由類似高斯積分的特別點與權值乘積相加可得積分值。

(3) 剛體測試補助法 —— 直接由特性矩陣需滿足剛體運動解求得奇異積分的係數。

2.6.1　解析式

邊界元素法中核函數的奇異特性，於第一章 § 1.8.1 章節已提過，而其奇異積分值則存在於各種主值觀念之下，如 Riemann 主值、 Cauchy 主值與 Hadamard (Mangler) 主值等。因此，若以解析方法計算時，當然需根據其值存在的數學定義來求解。這些定義，可參閱 § 1.10 章節的主值觀念。

2.6.2　數值積分法

目前 $ln(r), Cauchy(1/r)$ 與 $Hadamard(1/r^2)$ 等型式核函數之積分均已分別發展出一套數值方法，係利用類似高斯積分點的函數值與權值相乘後相加的精神而求得其值。參見下表 2.1 ～ 2.3 :

$ln(r)$ 核的積分:

$$\int_0^1 ln(1/x)\ f(x)\ dx \doteq A_i f(x_i)$$

正規函數的高斯積分:

$$\int_{-1}^1 f(x)\ dx \doteq A_i f(x_i)$$

柯西核的積分:

$$I' = FP\int_a^s \frac{f(x)}{x-s}\ dx \doteq -\sum_{i=1}^n f[(a-s)x_i+s]w_i - f(s)ln \mid a-s \mid$$

$$I'' = FP\int_s^b \frac{f(x)}{x-s}\ dx \doteq \sum_{i=1}^n f[(b-s)x_i+s]w_i + f(s)ln \mid b-s \mid$$

其中，FP 表示有限部份 (Finite part)。

$Hadamard$ 核的積分:

$$HFP\int_s^r \frac{g(x)}{(x-s)^k}dx \doteq (r-s)^{1-k}\sum_{i=1}^{n} g(x_i)[w_i^{(k)}+c_i^{(k)}ln \mid r-s \mid /(k-1)!], k>1$$

其中，HFP 表示 Hadamard 有限部份 (Hadamard finite part)。

表 2.1 $ln(r)$ 核函數之奇異積分點值與權值

表 2.2 正規積分之高斯積分點值與權值

表 2.3 Cauchy 核函數之奇異積分點值與權值

表 2.4 Hadamard 核函數之超奇異積分點值與權值 (Kutt, 1975)

2.6.3 剛體測試補助法—正規邊界

當所考慮的問題的特性矩陣之代數方程需滿足某個特性解時，則可將此解代入特性矩陣之代數方程，可求得矩陣對角線的奇異積分值，不過前提是其他非奇異積分的係數須先求出。這個觀念在彈性力學上的應用，稱為剛體運動解測試。以 Laplace 方程式為例，說明於下:

由本書第一章所定義的對偶邊界積分式，可算出如下特性矩陣的代數方程式

$$[U]\{t\} = [\bar{T}]\{u\} \tag{2.3}$$

$$[\bar{L}]\{t\} = [M]\{u\} \tag{2.4}$$

其中， $\bar{T}_{ij}\,(i \neq j)$ 可由奇異函數的正規積分段的正規積分求得; $M_{ij}\,(i \neq j)$ 可由奇異函數的正規積分段的正規積分求得。

而當 $i = j$ 時，可用下述簡化的方法求得: 特性矩陣的代數方程式 (2.3) 與 (2.4) 式，需滿足剛體運動解或補解如下，參見下圖

$$u(x) \equiv 1,\ \ x \in D$$

$$t(x) \equiv 0,\ \ x \in D$$

.

圖 2.12　正規邊界之輔助解

將以上二式，代入 (2.3) 與 (2.4) 式後，即可求得 T 與 M 矩陣的對角項係數如下

$$\bar{T}_{ii} = -\sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{n} \bar{T}_{ij} \quad \text{(i no sum)} \tag{2.5}$$

$$M_{ii} = -\sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{n} M_{ij} \quad \text{(i no sum)} \tag{2.6}$$

由以上可知，求特性矩陣的係數有很多種方法 (直接或間接)。此點在程式發展與設計階段時，可作為檢核用。若有錯誤，則直接印出錯誤訊息，以利除錯 (Debugging) 之參考。

2.6.4 補解測試補助法—退化邊界

在前一小節已就補解測試法在正規邊界如何求 T_{ii} 及 M_{ii} 的對角線項作一說明，但對退化邊界而言，此剛體測試法失效。因其密度函數已不在是正規邊界的 u 了。而對 $T(s,x)$ 與 $M(s,x)$ 兩個核函數而言，其對應的密度函數已是退化邊界兩邊物理量之差 Δu 。因此，剛體補助解在此情況就變成 $\Delta u = 0$ 和 $\sum t = 0$ 。此為無聊解，故對求解 T_{ii} 及 M_{ii} 項而言，也就無濟於事了! 可由下兩式看出

$$[U]\{\Sigma t\} = [\bar{T}]\{\Delta u\} \tag{2.7}$$

$$[\bar{L}]\{\Sigma t\} = [M]\{\Delta u\} \tag{2.8}$$

為了解決這個問題，尋找可以反應退化情況的補助解是必要的，此解如下

$$\Delta u = \sqrt{r_1 r_2}\ \ sin(\frac{\theta_1 + \theta_2}{2})$$

$$\Sigma u = 0$$

$$\Sigma t = 0$$

$$\Delta t = -2$$

其中 r_1 與 r_2 為場點與退化邊界兩端點的距離，參見下圖 2.13 。 .

圖 2.13 退化邊界之補助解

利用已知 $M_{ij}(i \neq j)$ 的非奇異項，將上述補助解代入，即可算得 M_{ii} 項。綜整上述如下:

(1). § 2.6.3 節與 § 2.6.4 節所提的方法，均可做為檢核對角線奇異項之用。

(2). § 2.6.3 節所使用的的補解適合邊界為正規且封閉的，但 § 2.6.4 節的方法則適合於退化邊界之應用。

(3). 若堅持用 § 2.6.3 節所述方法算 M_{ii} 或 $\bar{T}_{ii}$ 項時，需引入人工邊界使其封閉，如下圖示，並得先算得所有的非奇異積分值，再反算奇異積分值 (此點陳宗杰君的博士論文即採用我們的觀點) ; 但 § 2.6.4 節的方法，則不需要。

.

圖2.14　人工邊界

2.7 線性代數方程式之反算求解

前節導得特性矩陣後，套入已知的邊界條件後，可得下式

$$A\{p\} = \{q\}$$

其中，$\{p\}$ 為邊界未知量向量，$\{q\}$ 為已知量向量。$\{p\}$ 之求解可用高斯消去法，由於邊界元素法所得的代數方程式矩陣為不對稱滿矩陣，因此本書程式係採用台大林聰悟教授的 LUPPDC, LUPPSB 程式 (參考附錄所附 BEPO2D 程式) 進行分解及反算。求得 $\{p\}$ 後，所有邊界資料都已知，即可求得場內任一點的未知函數值。

2.8　數值誤差之介紹

邊界元素模擬時，積分方程式本身為無誤差式。然因離散化後，會產生誤差，而其誤差主要來源有三:

(1) 幾何邊界之模擬誤差，參考圖 2.15 。

(2) 邊界上未知物理量之內插函數模擬誤差。

(3) 數值積分誤差。

圖 2.15　幾何邊界之模擬誤差

文獻上，衡量誤差的方式有以下幾種:

(1).　Taylor's 展開式之誤差表示式

$$f(x) = f(c) + \frac{f'(c)}{1!}(x-c) + \frac{f''(c)}{2!}(x-c)^2 + ... + R_n(x)$$

其中，誤差 $R_n(x)$ 可表示為

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(c)}{(n+1)!}(x-c)^{n+1}$$

(2). 高斯數值積分誤差表示式

高斯數值積分表示式如下:

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \doteq \sum_{i=1}^{m} w_i f(x_i)$$

誤差可表示為

$$\mid \int_{-1}^{1} f(x)dx - \sum_{i=1}^{m} w_i f(x_i) \mid \leq E$$

其中

$$E = C_m \mid \frac{d^{2m} f}{dx^{2m}} \mid, \quad -1 < x < 1$$

$$C_m = \frac{2^{2m+1}(m!)^4}{(2m+1)((2m)!)^3}$$

(3). 數值逼近函數與正解函數之誤差表示式

令數值逼近函數與正解函數分別為 $u(x)$ 與 $v(x)$ ，定義三種量度空間之誤差表示式如下

(a). $d_\infty(u,v) = max \mid u(x) - v(x) \mid ,\ a < x < b$

(b). $d_1(u,v) = \int_a^b \mid u(x) - v(x) \mid dx$

(c). $d_2(u,v) = \int_a^b \mid u(x) - v(x) \mid^2 dx$

根據上述誤差大小的範圍，即可在容許誤差下，決定數值積分之階數、邊界元素網目之多寡與元素型態之選取參考。目前發展的自適性網格切割技術 (Adaptive mesh generation) 與後誤差評估 (Posterior error estimate) 即在誤差度量基礎上出發的。