行政院國家科學委員會專題研究計畫　成果報告

球體與平面之吸引及彈性接觸之數值分析

計畫類別：個別型計畫
計畫編號：NSC91-2212-E-034-001-
執行期間：91 年 08 月 01 日至 92 年 07 月 31 日
執行單位：中國文化大學機械工程學系

計畫主持人：吳俊仲

計畫參與人員：張曉芬

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中　華　民　國 92 年 10 月 21 日

摘要

本研究提出在直角座標系求解吸引接觸力的方法。使用 FFT 可計算矩陣相乘，然後使用 preconditioned inexact Newton-Bi-CGSTAB (bi-conjugate stabilized) method 與 path following method 等方法，可以在直角座標系上求解球體與平面之彈性吸引接觸力。結果發現，在 Tabor parameter μ 小於 1 時，不必使用 preconditioner，且個人電腦可以求解；在 μ 大於等於 1 時，必須使用 preconditioner，且需使用大型電腦。在未來此項結果可推廣至其他形態表面之彈性吸引接觸力。

關鍵詞： 吸引力、接觸力

Abstract

A numerical method for adhesive contact in rectangular coordinate is proposed. By using Fast Fourier Transform (FFT), the matrix multiplication can be performed. Then, using preconditioned inexact Newton-Bi-CGSTAG (bi-conjugate stabilized) method and the path following method, the adhesive contact for the contact between a sphere and a plane can be solved. For Tabor parameter μ less than one, it is not necessary to use the preconditioner, ant this problem can be solved by a personal computer. For Tabor parameter μ greater than and equal to one, it is necessary to use the preconditioner and it is necessary to use a large computer. With this method, the adhesive contact for any arbitrary types of surfaces can be obtained.

Keywords: Adhesion, Contact force

球體與平面之吸引及彈性接觸之數值分析

吳俊仲
中國文化大學 機械工程學系

國科會計劃編號：NSC 91-2212-E034-001

1. Introduction

1.1 前言

微奈米接觸的研究有兩派作法。第一種採用連續力學的方法，加入奈米級的吸引力分析，第二種使用分子動力學的理論。兩種作法各有其適用的範圍。Miesbauer 等人[1]發現，5nm 以上的微奈米表面接觸，可以使用連續力學來作模擬；較小尺寸的接觸則必須使用分子動力學來分析。本研究係針對連續力學的方法來分析。

1.2 文獻探討

連續力學的吸引彈性力學分析，多限於球體的接觸分析。早期的學者在多以數學推導出解析解。例如：1970 年，Johnson 等人提出的 JKR model [2]，1975 年 Derjaguin 等人提出的 DMT model[3]。經過十餘年，在 1992 年，Maugis 使用 Dugdale model，找出整合兩種 model 的解析解[4]。但是解析解在數學上都作了某些方面的簡化，所以只是近似解。

在數值解方面，在 1992 年，Attard 等人[5]使用 Lennard Jones Law，提出數值方法分析。1997 年 Greenwood [6]有進一步的研究。Feng[7]於 2000 年提出更詳盡且較佳數值解。Johnson 等人更對彈塑性物體的吸引接觸力進行分析[8]。大體來說，國際上在這方面的研究，有相當的成果，但是由於是計算球與平面之力，為簡化計算，都採用軸對稱的公式來計算。因此，這方面的數值分析方法無法推廣至其他形狀。

1.3 研究目的

若要研究其他形狀之接觸，例如橢球、粗糙表面之接觸，無可避免地，一定要用於直角座標的分析。但在這方面，至今仍沒有任何研究成果。本研究就是要提出直角座標的方法，並以球體的彈性吸引接觸力作為驗證。一旦成功，未來就可推廣至其他形狀的吸引接觸力分析。

2. 數學模式

2.1 Displacement Due to Force

首先，我們先導出球體接觸的吸引接觸力的數學式。當一個點作用力加於無限之半平面，其位移如下式[9]：

$$u_z = \frac{1-\nu}{2\pi G}\frac{P}{r}$$

其中，P為作用力，r為水平距離，G為 modulus of elasticity in shear。因此，平面上所有的力，對(x, y)點所產生的位移如下式：

$$u_z(x, y) = \frac{1-\nu^2}{\pi E}\iint_{\Omega}\frac{p(x', y')dx'dy'}{\sqrt{(x-x')^2+(y-y')^2}}$$

2.2 Displacement due to Adhesive Contact

兩球體接觸，在剛接觸時，兩球面的距離，用極座標表示，如下式：

$$h_0 = \frac{r^2}{2R_1} + \frac{r^2}{2R_2} = \frac{r^2}{2R}$$

其中 $\frac{1}{R} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}$

R_1，R_2 為兩球體的半徑。

r 為與對稱中心的距離。

因此，我們可把兩球接觸假設為一半徑為R之球體與一平面接觸。

球體與平面接近或接觸時，用直角座標表示，需滿足下式：

$$h = -\alpha + \varepsilon + \frac{x^2+y^2}{2R} + \frac{1}{\pi E^*}\iint\frac{p(h)dx'dy'}{\sqrt{(x-x')^2+(y-y')^2}} \qquad (1)$$

其中，

α 平面與球最低點的距離，零點為$h=\varepsilon$.

ε 原子間的距離

h 球體與平面中線之距離

E^* 楊氏係數，$\frac{1}{E^*} = \frac{1-\nu_1^2}{E_1} + \frac{1-\nu_2^2}{E_2}$

在微奈米接觸時，需考慮原子之間的作用力。根據 Lennard-Jones Law，原子間的作用力如下式[5]：

$$p(h) = \frac{\mathbf{8}\Delta\gamma}{\mathbf{3}\varepsilon}\left[\left(\frac{\varepsilon}{h}\right)^{\mathbf{3}} - \left(\frac{\varepsilon}{h}\right)^{\mathbf{9}}\right] \qquad (2)$$

對(1)與(2)式作無因次化，

$$H = \frac{h}{\varepsilon} - \mathbf{1} \qquad A = \frac{\alpha}{\varepsilon}$$

$$\mu = \left(\frac{R\Delta\gamma^2}{E^{*2}\varepsilon^3} \right)^{1/3} \qquad X = \frac{x}{\sqrt{\varepsilon R}} \qquad Y = \frac{y}{\sqrt{\varepsilon R}}$$

則方程式(1)(2)可寫成

$$\begin{cases} H(X,Y) + A - \dfrac{X^2 + Y^2}{2} \\ \quad + \dfrac{32\mu^{3/2}}{3\pi} \displaystyle\iint \dfrac{P(X',Y')dX'dY'}{\sqrt{(X-X')^2 + (Y-Y')^2}} = 0 \\ P(X,Y) = \left[\dfrac{1}{(H+1)^3} - \dfrac{1}{(H+1)^9} \right] \end{cases} \quad (3)$$

另外，定義無因次合力為

$$W = \iint PdXdY = \Delta\gamma R \iint p(x,y)dxdy$$

2.3 Rectangular Analysis

在直角座標中，格點化後，假設每一方格中，力量均相同，則某點的位移可寫成

$$\begin{aligned} (\bar{u}_z)_l &= \frac{1-\nu^2}{\pi E} \sum_{k=1}^{M} \left\{ \iint_{\Omega} \frac{p(x',y')dx'dy'}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2}} \right\} p_x \\ &= \sum_{k=1}^{M} C_{kl} p_k \end{aligned}$$

位移常數為[11]

$$\begin{aligned} C_{kl} = \frac{1}{\pi E^*} \Bigg\{ & (x+a)\ln\left[\frac{(y+b) + \sqrt{(y+b)^2 + (x+a)^2}}{(y-b) + \sqrt{(y-b)^2 + (x+a)^2}} \right] \\ & + (y+b)\ln\left[\frac{(x+a) + \sqrt{(y+b)^2 + (x+a)^2}}{(x-a) + \sqrt{(y+b)^2 + (x-a)^2}} \right] \\ & + (x-a)\ln\left[\frac{(y-b) + \sqrt{(y-b)^2 + (x-a)^2}}{(y+b) + \sqrt{(y+b)^2 + (x-a)^2}} \right] \\ & + (y-b)\ln\left[\frac{(x-a) + \sqrt{(y-b)^2 + (x-a)^2}}{(x+a) + \sqrt{(y-b)^2 + (x+a)^2}} \right] \Bigg\} \end{aligned} \quad (4)$$

所以方程式(3)可寫成

$$\begin{cases} F(H_i) = H_i + A - \dfrac{(X_i^2 + Y_j^2)}{2} \\ \quad + \dfrac{32\mu^{3/2}}{3\pi} \sum C_{ij} P_j \\ P_j = \left[\dfrac{1}{(H_j+1)^3} - \dfrac{1}{(H_j+1)^9} \right] \end{cases} \quad (5)$$

本研究就是用疊代法解方程式(5)。

3. 研究方法

3.1 FFT and Convolution

前述式(5)中矩陣 $\sum C_{ij}$ 的太大，無法計算其乘積 $\sum C_{ij} P_j$。舉例而言，$\mathbf{256} \times \mathbf{256}$ 點之平面，$\sum C_{ij}$ 有 $\mathbf{256^4} = \mathbf{42{,}994{,}967{,}296}$ 個元素，太大了。但因為這是接觸力，Liu[12]發現，可用 convolution 及 FFT 來解決。

假設 z 為 x 與 y 之 convolution，

$$z_i = \sum_{j=1}^{N} x_{i-j+1} y_j$$

則其 FFT 滿足下式

$$Z_n = X_n Y_n$$

舉例而言，If $N = 4$

$$z_1 = x_1 y_1 + x_4 y_2 + x_3 y_3 + x_2 y_4$$
$$z_2 = x_2 y_1 + x_1 y_2 + x_4 y_3 + x_3 y_4$$
$$z_3 = x_3 y_1 + x_2 y_2 + x_1 y_3 + x_4 y_4$$
$$z_4 = x_4 y_1 + x_3 y_2 + x_2 y_3 + x_1 y_4$$

則

$Z_1 = X_1 Y_1 \quad Z_2 = X_2 Y_2 \quad Z_3 = X_3 Y_3 \quad Z_4 = X_4 Y_4$ 在接觸的問題中，

$$\begin{aligned} u_1 &= C_0 p_1 + C_1 p_2 + C_2 p_3 + C_3 p_4 \\ u_2 &= C_1 p_1 + C_0 p_2 + C_1 p_3 + C_2 p_4 \\ u_3 &= C_2 p_1 + C_1 p_2 + C_0 p_3 + C_1 p_4 \\ u_4 &= C_3 p_1 + C_2 p_2 + C_1 p_3 + C_0 p_4 \end{aligned} \qquad (6)$$

我們可以加上一些 0 的數值，假設出一新的數列

$$\begin{aligned} R &= \{p_1, p_2, p_3, p_4, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}\} \\ S &= \{C_0, C_1, C_2, C_4, \mathbf{0}, C_3, C_2, C_1\} \\ T &= \{u_1, u_2, u_3, u_4, u_5, u_6, u_7, u_8\} \end{aligned} \qquad (7)$$

則 T 是 R 與 S 兩矩陣的 convolution，因此，使用 FFT，(6)式便直接可以計算出來。

$$FFT(\mathbf{T}) = FFT(\mathbf{R}) \cdot FFT(\mathbf{T})$$

由文獻中知[13]，convolution 僅需 $N \log N$ 次計算，記憶體不必增加，計算數減少。因此矩陣相乘變得可以計算。

上述結果，可以推廣到二維的計算當中。若

$$u_i = \sum C_{ij} P_j$$

則

$$\mathbf{U} = IFFT\{FFT(\mathbf{C}) \cdot FFT(\mathbf{P})\}$$

其中**C**，**P**為類似(7)式之二維數列。由此式，(5)中矩陣乘積$\sum C_{ij}P_j$便可算出。

3.2 Inexact Newton-Bi-CGSTAB Method

3.2.1 Inexact Newton Method

一般而言，一非線性方程式，

$$F_i(h_1,h_2,\Lambda\ ,h_N)=0 \qquad i=1,2,\Lambda\ ,N$$

則

$$\mathbf{F}(\mathbf{h}+\partial\mathbf{h})=\mathbf{F}(\mathbf{h})+\mathbf{J}\cdot\partial\mathrm{h}+O(\partial\mathbf{h}^2)$$

其中，**J**為 Jacobian，$J_{ij}\equiv\dfrac{\partial F_i}{\partial h_j}$

牛頓法就是依上述的性質導出，如下：

start: initial guess H_0

do while $|F(H_n)|>\varepsilon$

solve $dH=-J^{-1}(H_n)F(H_n)$

$H_{n+1}=H_n+dH$

end do

然而(5)式中，不可能求出 Jacobian，因此，需用 inexact Newton method 來求解。

Inexact Newton method[14]與 Newton Raphson method 非常類似。但是使用這個方法不必求 Jacobian。所以若 Jacobian 無法求得，或其反矩陣無法求得時，可以用這個方法。方法如下：

start: initial guess H_0

find $F(H_0)$

Outer iteration: do while $|F(H_n)|>\varepsilon$

inner iteration: find dH which satisfies

$F'(H_n)dH=-F(H_n)+R_k$ where $\|R_k\|/\|F(H_n)\|\le\eta_k$

end of inner iteration

$H_{n+1}=H_n+dH$

find $F(H_{n+1})$

end do

其中，inner iteration 不限定何種方法。目前有很多種方法發展出來，下一小節所說的 Bi-CGSTAB，是其中之一。

3.2.3 Bi-CGSTAB Method

解$AX=B$時，若矩陣A過大，無法直接求解時，可用 Krylov space method

來求解，這類的方法是使用疊代法求解，不必求任何反矩陣，也不必用高斯消去法，所以在僅能算出矩陣乘法時特別有用，在本研究中正好適用。其中若矩陣A是 non-symmetric，則可用 Bi-CGSTAB 法[15]。Bi-CGSTAB 源自 Optimization 中的 conjugate gradient。在 Inexact Newton method 中的 inner iteration，解$F'(H_n)dH = -F(H_n)$時，正好可以使用。

Bi-CGSTAB 解$AX = B$方法如下：

Initial guess $X_{\mathbf{0}}$，$R_{\mathbf{0}} = B - AX_{\mathbf{0}}$

set $\hat{R}_{\mathbf{0}} = R_{\mathbf{0}}$

$\rho_{\mathbf{0}} = \alpha = \omega_{\mathbf{0}} = \mathbf{1}$

$V_{\mathbf{0}} = P_{\mathbf{0}} = \mathbf{0}$

for $i = \mathbf{1},\mathbf{2},\mathbf{3},\Lambda$

$\rho_i = \left(\hat{R}_{\mathbf{0}}, R_{\mathbf{0}}\right)$, $\beta = (\rho_i / \rho_{i-\mathbf{1}})(\alpha / \omega_{i-\mathbf{1}})$

$P_i = R_{i-\mathbf{1}} + \beta(P_{i-\mathbf{1}} - \omega_{i-\mathbf{1}} V_{i-\mathbf{1}})$

$V_i = AP_i$

$\alpha = \rho_i / (\hat{R}_{\mathbf{0}}, V)$

$S = R_{i-\mathbf{1}} - \alpha V_i$

$T = AS$

$\omega_i = (T, S)/(T, T)$

$X_i = X_{i-\mathbf{1}} + \alpha P_i + \omega_i S$

if X_i small enough, the quit.

$R_i = s - \omega_i T$

end

在每一個 inexact Newton method 的 inner iteration 中，假設$A = F'(H_n)$，$B = -F(H_n)$，$X = dH$，則使用 Bi-CGSTAB 所求出的解正好是dH。而求解的過程中，AX與B均須用 FFT 來計算，可參閱 Appendix A。

3.2.4 Preconditioner

Bi-CGSTAB 雖可以解出上述的問題，但當矩陣並非 diagonally dominant 時，非常不容易收斂。這個時候，必須使用 preconditioner 來加速收斂[16]。

Precondition 的概念就是，當$AX = B$當中的A，不是 diagonally dominant 時，找出$M^{-1} \approx A$則$MA \approx I$，因此$MAX = MB$會比較容易求出解答。在本研究的求解過程中，$A = F'(H_n)$這個矩陣很大，而且並非 diagonally dominant，因此需要找出 approximate inverse。

求 preconditioner 的方法很多，在本研究中，我們使用 Frobenius norm minization method。這個方法是求出下式的最小值。

$$\min_{M \in S} \| I - AM \|_F \quad (8)$$

因為

$$\| I - AM \|_F^2 = \sum_{j=1}^{n} \| e_j - Am_j \|_2^2$$

其中 e_j 為單位矩陣的第 j 欄，因此，上述計算可簡化為 n 個 least-squares 的問題。

但在本研究中，因為 $A = F'(H_n)$ 這個矩陣過大，不可能找出其其近似反矩陣。因此，我們作若干簡化。因為 A 矩陣是來自接觸力對應變的影響，而每一點對該點與週遭四點的影響最大。因此，我們只取這五點的影響參數，矩陣的其它元素取為零，如此可形成一 five-diagonal 新矩陣(見 Appendix B)，對這新矩陣求其近似反矩陣 M 即可。為簡化計算，我們再假設 M 矩陣亦為 five-diagonal 的矩陣，經由(8)式的方法，可求出其近似反矩陣。此近似反矩陣可使 MA 變得比較 diagonally dominant，可加速求解。

由本研究發現，運用 preconditioner 可加速收斂達四倍以上，而且，在 $\mu \geq 1$ 時，必須使用 preconditioner 方能收斂。

3.2.4 Keller's Path Following Method

前述的方法 preconditioned inexact Bi-CGSTAB method 可以解一般非線性問題時，但是如果所得之解有 bifurcation 的現象，見圖一，上述方法就不可行。這時可加入 Keller 的 path following method[7、17]來求解。這個方法的精神，是有已知之點來沿著解的線，去求下一點。

這個方法下，Keller 定義一個新的函數

$$\begin{aligned} N = {} & H_s(s_0) \cdot [H(s) - H(s_0)] \\ & + A_s(s_0) \cdot [A(s) - A_s(s_0)] - (s - s_0) \end{aligned} \quad (9)$$

則解下列方程式

$$\begin{bmatrix} F_H & F_A \\ N_H & N_A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta H \\ \delta A \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} F \\ N \end{bmatrix} \quad (10)$$

則沿曲線的每一小步，及其解可求得。

其步驟如下，先求

$$\frac{\partial F}{\partial A} = F_A = 1$$

再解 H_A

$$F'(H) H_A = -F_A(s_0) = -1$$

則

$$N_A = A_s(s_0) = \pm [1 + H_A \cdot H_A]^{-1/2} \quad (11)$$

$$N_H = H_s = A_s H_A = N_A H_A \quad (12)$$

開始時，給一($s-s_0$)值，再求(9)式中之N，然後解(10)式。

如 Feng[7]所述，對每個 inexact Newton iteration，可以解

$F'(H)Y = F_A(s_0)$

$F'(H)Z = -F(s_0)$

則

$$dA = \frac{N_H \cdot Z + N}{N_H \cdot Y - N_A}$$

$$dH = Z - dAY$$

3.2.5 Numerical Scheme

由上述各節的方法，綜合言之，本研究的方法如下：

1. 由(4)式，算出C_{ij}。
2. 起始A，起始$\underline{\mathbf{H}}_0 = \underline{\mathbf{U}} - A$，到 3。
3. 已知A，用 Inexact Newton method 求解。

   (1)起始值 $H_0, A_\mathbf{0}$

   由 eq(5)算出$F(H_\mathbf{0}, A_\mathbf{0})$

   由 eq(8)找出$M \approx F'(X_0)^{-1}$

   (2) 疊代直到H_n收斂

   用 Bi-CGSTAB 與 precontitioner 解

   a. 求 $MF'(H_n)dH = MF_A(s_0)$

   b. 代入 $H_{n+1} = H_n + dH$

   (3) 到 5。
4. 已知A，用 path following method 及 Inexact Newton method 求解。

   (1)起始值 $H_0, A_\mathbf{0}$

   由 eq(5)算出$F(H_\mathbf{0}, A_\mathbf{0})$

   由 eq(9)算出$N(H_\mathbf{0}, A_\mathbf{0})$

   由 eq(11、12)算出 N_A，N_H

   由 eq(8)找出$M \approx F'(X_0)^{-1}$

   (2) 疊代直到H_n，A_n收斂

   用 Bi-CGSTAB 與 precontitioner 解

   a. 求 $\begin{cases} MF'(H_n)Y = MF_A(s_0) \\ MF'(H_n)Z = -MF(s_0) \end{cases}$

   b. 代入 $\begin{cases} dA = \dfrac{N_H \cdot Z + N}{N_H \cdot Y - N_A} \\ dH = Z - dAY \end{cases}$

c. 求得 $\begin{cases} H_{n+1} = H_n + dH \\ A_{n+1} = A_n + dA \end{cases}$

d. 求 $F(X_{n+1}, A_{n+1})$，$N(X_{n+1}, A_{n+1})$

(3) 到 5。

5. 如果遠離 turning point，到 3。否則，到 4。

4. 結果與討論

本研究使用 512×512 的格點，面積取 20×20。並與 Feng 的方法使用 1000 個格點，面積為半徑 20 之圓作比較。兩者都使用均勻間距的格點。而 μ 取 0.1、1 與 3。outer iteration 與 inner iteration 之收斂條件均設 $\max|\delta H_i|/\max|H_i|$ 設 10^{-6}。

在 $\mu = 0.1$ 的條件時，我們從 $\alpha = -6$ 開始求解，下一點則設 α 增加 0.05，直到 $\alpha = 2$。在 $\mu = 1$ 與 3 的條件時，我們從 $\alpha = -6$，下一點設 α 增加 0.2，當發散時，設 α 的增加量變小，當接近 turning points 時，使用 path following method，當遠離 turning points 時，繼續使用 inexact Newton-Bi-CGSTAB method，直到 $\alpha = 2$。在我們的計算中發現，$\mu = 0.1$ 時，矩陣是 diagonally dominant，因此並非必要使用 preconditioner。但在 $\mu \ge 1$ 時，preconditioner 是必須的，否則不能收斂。

本研究使用 IBM P690 平行電腦。序列程式與平行程式在本研究中均使用。在計算時發現，最耗時的計算步驟是 FFT 與 preconditioning。寫 precondition 的平行副程式並不困難，但是寫 FFT 的平行副程式就不容易了。一般而言，要作 FFT 的平行計算，可以使用商業軟體，如 IMSL parallel library 或 NAG parallel library。但是在本研究中，並未得到上述軟體，因此由網路中向 Dr. Takahashi 得到 FFTE 副程式。計算時間列於 table 1。其中，$\mu = 0.1$ 沒有 preconditioner 的情形，計算時間較短，因此這個例子也使用 1.8GHz cpu、512M RAM 的個人電腦作測試。結果也列在 table 1 中。

圖一為合力 W 對 α 的結果，圖中包括本研究的結果與 Feng 的方法，結果發現兩條線幾乎重合。圖二則是 $\mu = 1$ 與 $\alpha = 0$ 時，球體的形狀。圖三是 $\mu = 1$ 與 $\alpha = 0$ 時的力量分佈。結果發現本研究的結果與 Feng 的方法的結果幾乎一模一樣，細微的差別是因兩者的格點不同所致。這些結果顯示，直角座標的數值分析為可行。

4.2 Discussion

事實上，本研究曾對 $\mu = 5$ 作研究，發現不易求解。首先，計算時間太長，在 IBM P690 電腦作序列計算 48 小時後，仍無法完成。其次，所算出的結果，在合力 W 對 α 的圖上，線條在接近轉折點處有輕微抖動的現象。這是因為格點數不夠多所致。因此，$\mu = 5$ 應該是直角座標求解的極限。

未來對本研究的數值方法，有可能的改進之道為：使用不同的 preconditioning 技巧，更有效律的平行 FFT 軟體，或其他的 Krylov space method。

5. 結論

本研究使用 FFT、inexact Newton method 與 Bi-CGSTAB、preconditioner、path following method 等方法，在直角座標系上求解球體接觸的彈性吸引力。結果發現，與 Feng 的結果相似，為來可推廣至其他形狀的表面接觸。

在研究中發現，在μ很小時，不一定要使用 preconditioner，但在$\mu \geq 1$時，precondtioner 是必需的，$\mu = 5$是本研究的極限。

Acknowledgements

本研究感謝高速網陸計算中心提供 IBM P690 電腦設備，並感謝 Dr. Daisuke Takahashi 提供 FFT 的副程式。

Appendix A

在吸引接觸力分析時，我們求解下列方程式。

$$F_i(H) = H_i + A - \frac{X_i^2 + Y_i^2}{2} + \frac{32\mu^{3/2}}{3\pi}\sum C_{ij}\left[\frac{1}{(H_j+1)^3} - \frac{1}{(H_j+1)^9}\right] \quad \text{(A.1)}$$

在本研究中，我們使用 inexact Newton Bi-CGSTAB method 求解。在 inner iteration 中，用 Bi-CGSTAB 解下式：

$$\underline{\underline{\mathbf{J}}}(\underline{\mathbf{H}}_n)\delta\underline{\mathbf{H}} = -\underline{\mathbf{F}}(\underline{\mathbf{H}}_n) + \underline{\mathbf{R}}_n \quad \text{(A.2)}$$

其中，

$$\underline{\underline{\mathbf{J}}}(\underline{\mathbf{H}}) = \frac{F_i(H)}{\partial H_j} = \delta_{ij} + \frac{32\mu^{3/2}}{\pi}\sum C_{ij}\left[-\frac{1}{(H_j+1)^4} + \frac{3}{(H_j+1)^{10}}\right]$$

也就是說，

$$\frac{\partial F_i}{\partial H_j} = \begin{cases} 1 + \dfrac{32\mu^{3/2}}{3\pi}\sum C_{ij}\left[-\dfrac{1}{(H_j+1)^4} + \dfrac{3}{(H_j+1)^{10}}\right] & i = j \\ \dfrac{32\mu^{3/2}}{3\pi}\sum C_{ij}\left[-\dfrac{1}{(H_j+1)^4} + \dfrac{3}{(H_j+1)^{10}}\right] & i \neq j \end{cases}$$

在(A.2)式中，$\underline{\underline{\mathbf{J}}}(\underline{\mathbf{H}}_n)\delta\underline{\mathbf{H}}$ 與 $\underline{\mathbf{F}}(\underline{\mathbf{H}}_n)$ 均須計算。$\underline{\mathbf{F}}(\underline{\mathbf{H}}_n)$ 式中的最後一項為

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \Lambda & C_{1N} \\ C_{21} & C_{22} & \Lambda & C_{2N} \\ \mathrm{M} & \mathrm{M} & \mathrm{O} & \mathrm{M} \\ C_{N1} & C_{N2} & \Lambda & C_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma(H_1) \\ \sigma(H_2) \\ \mathrm{M} \\ \sigma(H_n) \end{bmatrix}$$

其中，

$$\sigma(H_j)=\frac{\mathbf{1}}{(H_j+\mathbf{1})^{\mathbf{3}}}-\frac{\mathbf{1}}{(H_j+\mathbf{1})^{\mathbf{9}}}$$

如文中所式，此項可用 FFT 算出。

而 $\underline{\underline{\mathbf{J}}}(\underline{\mathbf{H}}_n)\delta\underline{\mathbf{H}}$ 式中的最後一項為 $\sum_i\sum_j\frac{F_i(H)}{\partial H_j}dH_i$ ，如下所示：

$$\begin{bmatrix}1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & 1 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}dH_1\\ dH_2\\ \vdots\\ dH_n\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}C_{11} & C_{12} & \cdots & C_{1N}\\ C_{21} & C_{22} & \cdots & C_{2N}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ C_{N1} & C_{N2} & \cdots & C_{NN}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sigma'(H_1)dH_1\\ \sigma'(H_2)dH_2\\ \vdots\\ \sigma'(H_n)dH_n\end{bmatrix}$$

其中 $\sigma'(H_j)=-\frac{\mathbf{1}}{(H_j+\mathbf{1})^{\mathbf{4}}}+\frac{\mathbf{3}}{(H_j+\mathbf{1})^{\mathbf{10}}}$

此項議可用 FFT 算出。

Appendix B Five Diagonal Matrix

如果只考慮 $C_{0,0}$、 $C_{1,0}$ 與 $C_{0,1}$，其他均設為 0，則原來的矩陣便成一個 five-diagonal 的矩陣。

例如，格點為 4×4，如下圖：

	0	1	2	3
0	×	×	×	×
1	×	×	×	×
2	×	×	×	×
3	×	×	×	×

則其矩陣為一 five-diagonal 矩陣，如下：

k	*i*	*j*	0	1	2	3	0	1	2	3	0	1	2	3	0	1	2	3
0	0	0	×	×			×											
		1	×	×	×			×										
		2		×	×	×			×									
		3			×	×				×								
4	1	0	×				×	×			×							
		1		×			×	×	×			×						
		2			×			×	×	×			×					
		3				×			×	×				×				
8	2	0					×				×	×			×			
		1						×			×	×	×			×		
		2							×			×	×	×			×	
		3								×			×	×				×
12	3	0									×				×	×		
		1										×			×	×	×	
		2											×			×	×	×
		3												×			×	×

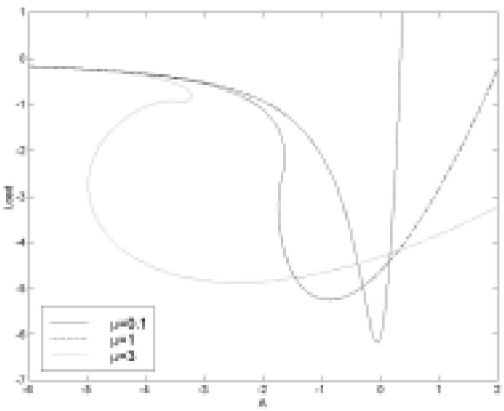
Reference:

1. Miesbauer, O., Götzinger, M. and Perukert, W., “Molecular dynamics simulations of the contact between two NaCl nano-crystals: adhesion, jump to contact and indentation”, Nanotechnology, Vol. 14, pp. 371-376, 2003.
2. Johnson, K.L., Kendal, K. and Roberts, A.D., “Surface energy and the contact of elastic solids”, Proc. R. Soc. London, A. 324, pp. 301-313, 1971.
3. Derjaguin, B.V., Muller, V.M. and Toporov, Yu.P., “Effect of contact deformations on the adhesion of particles”, Journal of Colloid and Interface Science, Vol. 53, No. 2, pp. 314-326, 1973.
4. Maugis, D., “Adhesion of spheres: the JKR-DMT transition using Dugdale model”, J. Coll. Interf. Sci., Vol. 150, pp.243-269, 1992.
5. Attard, P. and Parker, J.L., “Deformation and adhesion of elastic bodies in contact”, Phys. Rev. A, Vol. 46, No. 12, pp. 7975-7971, 1992.
6. Greenwood, J.A., “Adhesion of elastic spheres”, Proc. R. Soc. London, Vol. A 453, pp. 1277- 1297, 1997
7. Feng, J.Q., “Contact behavior of spherical elastic particles: a computational study of particle adhesion and deformations”, Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, Vol. 172, pp. 175-198, 2000.
8. Mesarovic, Sinisa Dj. and Johnson, K.L., “Adhesive contact of elastic-plastic spheres”, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, Vol. 48, No.10, pp. 2009-2033, 2000.
9. Johnson, K.L., Contact Mechanics, Cambridge University Press, Cambridge, 1985.
10. Mulvaney, D.J., Newland, D.E. and Gill, K.F., “A complete description of surface texture profiles”, Wear, Vol. 132, pp. 173-182, 1989.
11. Love, A.E.H., “The stress produced in a semi-infinite solid by pressure on part of the boundary”, Phil. Trans. Roy. Soc. (London) Series A, Vol. 228, pp.377-420, 1929.
12. Liu, S.B., Wang, Q. and Liu, G.., “A versatile method of discrete convolution and FFT (DC-FFT) for contact analyses”, Wear, Vol. 243, No. 1-2, pp. 101-110, 2000.
13. Cooley, J.W. and Tukey, J.W., “An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series”, Math. Computat., Vol. 19, pp. 297-301, 1965.
14. Dembo, R.S., Stanley, C.E., Eisenstat, C. and Steihaug, T., “Inexact Newton methods”, SIAM J. Numer. Anal., Vol. 19, No.2, pp. 400-408, 1982.
15. Van Der Vorst, H.A., “Bi-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems”, SIAM J. Sci. Stat. Comput., Vol. 13, No. 2, pp. 631-644, 1992.
16. Benzi, M., “Preconditioning techniques for large linear systems: a survey”, Journal of Computational Physics, Vol. 182, pp.418-477, 2002.
17. Keller, H.B. “Numerical solution of bifurcation and non-linear eigenvalue

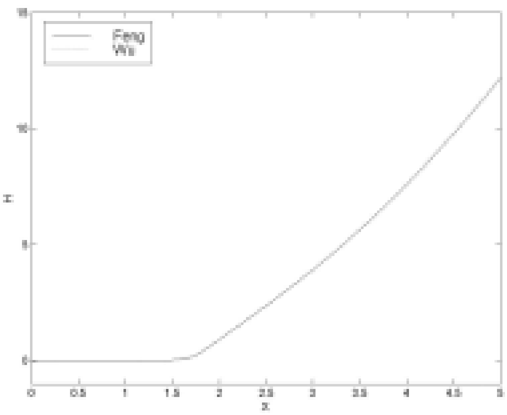
problems”, in: Rabinowitz, P. (ed.), Applications of Bifurcation Theory, pp. 359-384, Academic Press, New York, 1997.

Table 1. Computer time

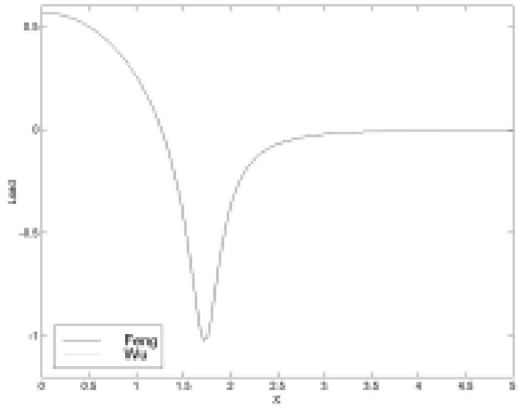
	condition	μ		
		3	1	0.1
PC	no precond	╳	╳	2h13m
IBM P690	no precond	(diverge)	4h41m	57m
	serial	19h53m	3h2m	1h23m
	parallel 4 cpu	14h42m	2h8m	1h5m
	parallel 8 cpu	12h	1h22m	43m
	number of pts	316pts	180pts	160pts



圖一， A vs. P for $\mu = \mathbf{1}$, $S = 3$



圖二， A vs. P for $\mu = \mathbf{1}$



圖三， A vs. P for $S=5$

計畫成果自評

本計畫如原先預期，完成直角座標上，球體接觸之吸引彈性力分析。在微機電與奈米系統上，均可應用。未來可推廣至其他形態，如橢球、粗糙表面之吸引接觸力分析。本研究結果，已投稿至國外 SCI 期刊，目前審稿中。