

Iterative Lösungsverfahren für die Randelementemethode am Beispiel der akustischen Helmholtzgleichung

Christopher Jelich, Steffen Marburg

*Lehrstuhl für Akustik mobiler Systeme, Technische Universität München
Boltzmannstr. 15, 85748 Garching, Deutschland, Email: c.jelich@tum.de*

Einleitung

Lineare zeit-harmonische akustische Problemstellungen lassen sich effizient mit der Randelementmethode (BEM) lösen. Für Außenraumprobleme erweist sich die BEM als besonders vorteilhaft gegenüber der Finiten Elemente Methode, da lediglich der Rand des Gebiets modelliert werden muss. Allerdings ergibt sich infolge der räumlichen Diskretisierung der Integralgleichungen eine vollbesetzte Systemmatrix, wodurch iterative Lösungsverfahren eine quadratische Komplexität bezüglich der Anzahl an Freiheitsgraden besitzen. Die Entwicklung der letzten Jahrzehnte hat viele leistungsstarke Methoden hervorgebracht, welche eine quasi-lineare oder sogar lineare Aufwandsabhängigkeit bieten. Hierbei sind vor allem Methoden zu nennen, welche zur Gruppe der hierarchischen Matrizen zählen. Diese nutzen aus, dass einzelne Bereiche der vollbesetzten Systemmatrix, d.h. Interaktionen zwischen bestimmten Freiheitsgraden, hinreichend genau durch eine Approximation niedrigeren Rangs beschrieben werden können. Hierfür wird die Systemmatrix abhängig von der geometrischen Position der Freiheitsgrade in eine Baumstruktur unterteilt. Mithilfe eines bestimmten Zulässigkeitskriteriums werden dann die zu approximierenden Matrixblöcke identifiziert. Für die anschließende Approximation können sowohl algebraische als auch analytische Verfahren verwendet werden. Die zugrunde liegende Baumstruktur, das verwendete Kriterium zur Identifikation der zu approximierenden Matrixblöcke und das angewendete Approximationsverfahren sind wesentliche Unterscheidungsmerkmale der verschiedenen Methoden. Ungeachtet ihrer individuellen Unterschiede vereinen alle Methoden die Vorteile des reduzierten Speicherbedarfs und der Aufwandsreduzierung von Matrix-Vektor Multiplikationen. Eine effiziente Lösung zeit-harmonischer akustischer Problemstellungen kann somit unter Verwendung klassischer iterativer Lösungsverfahren wie bspw. der Generalized Minimum Residual Method (GMRES) erzielt werden [7].

Auf Basis der besonderen hierarchischen Struktur der approximierten Systemmatrix wurden in jüngster Vergangenheit direkte Lösungsverfahren vorgestellt. Ihre Genauigkeit hängt zum einen von der Approximationsgüte der zugrunde liegenden hierarchischen Methoden und zum anderen von Parametern der Lösungsverfahren selbst ab. Die einstellbare Genauigkeit erlaubt zum einen die direkte Berechnung hinreichend genauer Lösungen als auch die Beschleunigung iterativer Lösungsverfahren durch den Einsatz von weniger genaueren Varianten als Vorkonditionierer.

Im Rahmen dieser Veröffentlichung wird mit der Inverse Fast Multipole Method (IFMM) ein Vertreter der genannten direkten Lösungsverfahren vorgestellt. Dieses Verfahren lässt sich sowohl für \mathcal{H}^2 -Matrizen als auch für die mit diesen eng verwandten Fast Multipole Methode (FMM) kombinieren. Die vorliegende Abhandlung beschränkt sich allerdings auf die FMM, dessen Grundlagen im nächsten Abschnitt eingeführt werden. Anschließend wird die IFMM vorgestellt und ein Ausblick auf zukünftige Anwendungsfelder und mögliche Forschungsrichtungen gegeben. Aufgrund der Allgemeingültigkeit der IFMM wird sich nicht auf eine bestimmte Variante der FMM beschränkt. Stattdessen wird eine Notation gewählt die sowohl \mathcal{H}^2 -Matrizen als auch unterschiedliche FMM Varianten gemein haben.

Fast Multipole Method für die akustische Randelementemethode

In der linearen zeit-harmonischen Akustik lässt sich die Wellenausbreitung innerhalb eines Gebiets Ω mit stückweise glattem Rand Γ über die Helmholtz Gleichung beschreiben:

$$\Delta p(\mathbf{x}) + k^2 p(\mathbf{x}) = 0 \quad \mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^3. \quad (1)$$

Hierbei bezeichnet $k = 2\pi f/c$ die Wellenzahl in Abhängigkeit der Frequenz f und der Schallgeschwindigkeit c . Geeignete Randbedingungen für den Druck p und die zugehörigen Flussgröße sowie die Sommerfeldsche Abstrahlbedingung im Falle eines Außenraumproblems vervollständigen Gleichung 1 zu einem Randwertproblem. Unter Verwendung der Methode der gewichteten Residuen und der Einführung der Fundamentallösung lässt sich die Kirchhoff-Helmholtz Integralgleichung herleiten. Die anschließende räumliche Diskretisierung führt auf ein lineares Gleichungssystem in der Form

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}. \quad (2)$$

Auf Basis der zugrundeliegenden Integralgleichung ist die Systemmatrix \mathbf{A} vollbesetzt. Die damit verbundenen Nachteile lassen sich durch die Anwendung geeigneter Approximationsverfahren umgehen. Die Fast Multipole Methode ist eines dieser Verfahren. Seit der Erstveröffentlichung in [5] wurde die FMM u.a. im Kontext verschiedener Integralgleichungen angewandt und stetig weiterentwickelt. Sie ermöglicht die Berechnung von Matrix-Vektor Produkten in linearer Aufwandsabhängigkeit zur Anzahl der Freiheitsgrade. Dies wird u.a. durch eine geeignete analytische Approximation der Fundamentallösung, z.B. basierend auf Ku-

gelflächenfunktionen, und einer hierarchischen Gebietsunterteilung ermöglicht. Die Verwendung unterschiedlicher Approximationsverfahren hat in der Vergangenheit verschiedenste FMM hervorgebracht. Eine umfangreiche Einführung und Beschreibung der FMM findet sich in [6].

Zu Beginn wird das Lösungsgebiet hierarchisch in eine Baumstruktur unterteilt bis ein vorgegebenes Abbruchkriterium, bspw. die Unterschreitung einer gewissen Anzahl an Freiheitsgraden pro Baumknoten, erfüllt ist. Eine solche Unterteilung ist exemplarisch für ein ein-dimensionales Gebiet in Abbildung 1 gezeigt. Der zugehörige Baum besitzt vier Ebenen. Unter Verwendung eines starken Zulassungskriteriums („strong admissibility criteria“) werden die Interaktionen zwischen benachbarten Knoten, d.h. Knoten die den selbe Elternknoten besitzen, als Interaktionen vollen Rangs angenommen und exakt repräsentiert. Im Gegenzug können die verbleibenden Interaktionen zwischen nicht benachbarte Knoten durch Approximationen niedrigeren Rangs beschrieben werden.

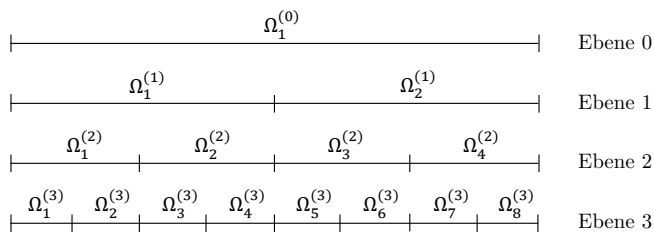


Abbildung 1: Gleichförmige Unterteilung eines eindimensionalen Gebiets in die Teilgebiete $\Omega_i^{(l)}$ [2].

Im Anschluss an die hierarchische Gebietsunterteilung können die FMM Operatoren bestimmt werden. Hierfür werden für jeden Knoten der Ebene $l \geq 2$ lokale Koeffizienten $\mathbf{z}^{(l)}$ und Multipoloeffizienten $\mathbf{y}^{(l)}$ eingeführt. Aufgrund der Allgemeingültigkeit des nachfolgend vorgestellten Konzepts der IFMM wird auf eine explizite Beschreibung dieser Operatoren verzichtet. Analog zu [2] werden stattdessen die FMM Operatoren am Beispiel der Gebietsunterteilung aus Abbildung 1 in ihrer Matrixform eingeführt. Mit diesen kann die Systemmatrix \mathbf{A} wie folgt approximiert werden:

$$\mathbf{A} \approx \mathbf{S}^{(3)} + \mathbf{U}^{(3)} \left(\mathbf{S}^{(2)} + \mathbf{U}^{(2)} \mathbf{K}^{(2)} \mathbf{V}^{(2)\text{H}} \right) \mathbf{V}^{(3)\text{H}}. \quad (3)$$

Der erste Term in Gleichung 3 repräsentiert die Interaktionen im Nahfeld, d.h. Interaktionen zwischen benachbarten Knoten und von Knoten mit sich selbst. Dieser Term enthält die assemblierten P2P-Operatoren. Im Gegenzug repräsentiert der zweite Term die Interaktionen im Fernfeld, d.h. Interaktionen von nicht benachbarten Knoten. Dieser besteht aus dem L2P-Operator $\mathbf{U}^{(3)}$, dem P2M-Operator $\mathbf{V}^{(3)\text{H}}$ sowie den M2L-Operatoren $\mathbf{S}^{(2)}$ und $\mathbf{K}^{(2)}$ welche auf der dritten bzw. zweiten Baumebene definiert sind. Darüber hinaus bezeichnen $\mathbf{U}^{(2)}$ und $\mathbf{V}^{(2)\text{H}}$ die L2L- bzw. M2M-Operatoren auf der zweiten Baumebene. Explizite Definitionen dieser Operatoren können für die jeweilige FMM Variante aus der Literatur entnommen werden.

Bei der Multiplikation der Systemmatrix \mathbf{A} mit einem beliebigen Vektor \mathbf{x} wird der generellen FMM Prozedur gefolgt. Diese besteht aus einem Aufwärtsschritt und einem Abwärtsschritt. Beginnend mit dem Aufwärtsschritt werden die Multipoloeffizienten auf der untersten Baumebene berechnet und zu den höheren Baumebenen bis zur Ebene $l = 2$ transferiert:

$$\mathbf{y}^{(3)} = \mathbf{V}^{(3)\text{H}} \mathbf{x}, \quad \mathbf{y}^{(2)} = \mathbf{V}^{(2)\text{H}} \mathbf{y}^{(3)}. \quad (4)$$

Anschließend werden im Abwärtsschritt anhand der Multipoloeffizienten die lokalen Koeffizienten auf der gleichen Ebene bestimmt und zu den unteren Ebenen transferiert:

$$\mathbf{z}^{(2)} = \mathbf{K}^{(2)} \mathbf{y}^{(2)}, \quad \mathbf{z}^{(3)} = \mathbf{S}^{(2)} \mathbf{y}^{(3)} + \mathbf{U}^{(2)} \mathbf{z}^{(2)}. \quad (5)$$

Auf der untersten Baumebene wird das Ergebnis \mathbf{b} der Matrix-Vektor Multiplikation durch die Auswertung der Nahfeld- und Fernfeldinteraktionen bestimmt:

$$\mathbf{b} = \mathbf{S}^{(3)} \mathbf{x} + \mathbf{U}^{(3)} \mathbf{z}^{(3)}. \quad (6)$$

Inverse Fast Multipole Method

Im Gegensatz zur FMM, welche die effiziente und näherungsweise Berechnung von Multiplikationen der Systemmatrix mit beliebigen Vektoren ermöglicht, erlaubt es die IFMM die näherungsweise Lösung des Gleichungssystems $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ in linearer Aufwandsabhängigkeit zu berechnen. Die zwei grundlegenden Ideen die dies ermöglichen sind: (i) Die approximierte Systemmatrix Gleichung 3 kann durch die Einführung der lokalen Koeffizienten und der Multipoloeffizienten als erweiterte dünnbesetzte Matrix beschrieben werden. (ii) Beim Lösen des dazugehörigen erweiterten Gleichungssystems können aufkommende Einträge welche der Interaktion zwischen nicht benachbarten Knoten entsprechen approximiert und hierarchisch umgeleitet werden [1, 2]. Im Folgenden werden beide Ideen am vorliegenden Beispiel erläutert und der Lösungsprozess beschrieben.

Basierend auf der Gebietsunterteilung aus Abbildung 1 und den FMM Operatoren in den Gleichungen 4–6 kann das Gleichungssystem 2 in ein erweitertes Gleichungssystem mit dünnbesetzter Systemmatrix überführt werden. Dieses lautet

$$\begin{bmatrix} \mathbf{S}^{(3)} & \mathbf{U}^{(3)} \\ \mathbf{V}^{(3)\text{H}} & -\mathbf{I} & \mathbf{S}^{(2)} & \mathbf{U}^{(2)} \\ & -\mathbf{I} & \mathbf{V}^{(2)\text{H}} & -\mathbf{I} \\ & & & -\mathbf{I} & \mathbf{K}^{(2)} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{z}^{(3)} \\ \mathbf{y}^{(3)} \\ \mathbf{z}^{(2)} \\ \mathbf{y}^{(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{b} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (7)$$

wobei \mathbf{I} eine Einheitsmatrix passender Dimension bezeichnet. Wird ein klassischer direkter Lösungsalgorithmus auf das Gleichungssystem 7 angewendet, so kann die angesprochene lineare Aufwandsabhängigkeit nicht erreicht werden. Dies liegt an den zusätzlichen von Null verschiedenen Matrixeinträgen die während des Lösens eingebracht werden und die Besetzungsstruktur der erweiterten Systemmatrix degradieren. Folgt man beim Lösungsprozess der

Idee (ii), so werden die zusätzlichen Matrixeinträge, welche Interaktionen zwischen nicht benachbarten Knoten entsprechen hierarchisch komprimiert. Hierdurch bleibt die Besetzungsstruktur der erweiterten Systemmatrix weitestgehend erhalten. Dies führt zu einem Lösungsalgorithmus mit linearer Komplexität, vgl. [2]. Im Allgemeinen gilt dies nicht im Kontext von Integralgleichungen, die eine oszillierende Fundamentallösung besitzen. Folglich ist mit einer geringeren Effizienz des Lösungsalgorithmus für Helmholtzprobleme im höheren Frequenzbereich zu rechnen [1].

Nachdem Aufstellen des erweiterten Gleichungssystems lässt sich ein zweigeteilter Lösungsprozess durchführen: In einem Aufwärtsschritt werden nacheinander alle Knoten $\Omega_i^{(l_{\max})}$ der untersten Bauebene l_{\max} eliminiert. Dabei werden die Unbekannten der Knoten eliminiert und die zugehörigen Matrixeinträge aktualisiert. Hierbei entstehen Einträge, welche Interaktionen zwischen nicht benachbarten Knoten entsprechen. Diese werden gemäß der Idee (ii) durch eine Approximation niedrigeren Rangs beschrieben und über bereits existierende Matrixeinträge umgeleitet. Über die Genauigkeit ε der Approximation lässt sich dabei die Genauigkeit der Lösung einstellen. Neben den Matrixeinträgen erfolgt auch eine Aktualisierung der rechten Seite. Sind alle Knoten der untersten Bauebene eliminiert werden nacheinander die Knoten der darüberliegenden Ebenen eliminiert. Mit dem Erreichen der Ebene $l = 2$ verbleibt ein kleines vollbesetztes Gleichungssystem mit dem Vektor $\mathbf{y}^{(2)}$ als Unbekannte. Dieses System kann mit vergleichsweise wenig Aufwand gelöst werden und die Lösung wird im anschließenden Abwärtsschritt in umgekehrter Reihenfolge der Elimination substituiert. Am Ende des Abwärtsschrittes erhält man den gesuchten Lösungsvektor \mathbf{x} . Da im Eliminierungsprozess die Matrixeinträge unabhängig von der rechten Seite aktualisiert werden, ist der beschriebene Algorithmus sehr gut für Anwendungen geeignet, bei denen Gleichungssysteme in der Form $\mathbf{A}\mathbf{x}_i = \mathbf{b}_i$ gelöst werden müssen.

Ursprünglich wurde die IFMM in [1] als direktes Lösungsverfahren für N -Körperprobleme vorgestellt. Anwendungen auf die Randintegralgleichungen dreidimensionaler Laplace [2] und Helmholtz Probleme [10] sowie zweidimensionaler Stokes-Strömungen [9] folgten. Hierbei wurde jeweils die kollokationsbasierte Randelementemethode angewendet und entweder die black-box FMM [4] oder eine low-frequency FMM [10] zur Erstellung der FMM Operatoren verwendet. Beim Einsatz der IFMM als Vorkonditionierer wurde jeweils ein Vergleich mit einem Vorkonditionierer basierend auf den diagonalen Blöcken der Nahfeldmatrix (BD-Vorkonditionierer) angestellt.

Mit dem Fokus auf die akustische Helmholtzgleichung werden nachfolgend die wesentlichen Ergebnisse aus [10] zusammengefasst. Die Autoren lösen akustische Außenraumprobleme unter der Annahme schallharter Ränder sowohl mit Neumann Randbedingungen als auch mit gemischten Randbedingungen. Den Berechnungen liegt die Burton-Miller Formulierung zugrunde, d.h. die addi-

tive Kombination der Kirchhoff-Helmholtz Integralgleichung mit dessen Ableitung in Normalenrichtung. Als Kopplungsfaktor wird i/k mit der imaginären Einheit i gewählt. Die geometrischen Modelle beinhalten eine einfache Kugel und komplexere Körper wie ein vereinfachtes Modell eines Hauses mit bis zu 10^6 Freiheitsgraden. Bei der Anwendung der IFMM als direktes Lösungsverfahren werden relative l_2 -Fehler in der Größenordnung von 10^{-2} mit vertretbarer Rechenzeit erzielt. Im Vergleich dazu kann die Rechenzeit um eine Zehnerpotenz verringert werden, wenn die IFMM mit reduzierter Genauigkeit als Vorkonditionierer in einem iterativen Lösungsprozess eingebettet wird. Folglich ist im Falle von akustischen Außenraumproblemen mit nur einer einzigen rechten Seite oder nur wenigen unterschiedlichen rechten Seiten der Einsatz der IFMM als Vorkonditionierer dem Einsatz als direktes Lösungsverfahren vorzuziehen. Diese Schlussfolgerung ist allerdings nur für die derzeitige Implementierung gültig. Erweiterungen wie die Parallelisierung des Algorithmus könnten die Effizienz weiter verbessern. Wird die IFMM als linker Vorkonditionierer innerhalb des GMRES-Verfahrens verwendet, so übertreffen die Konvergenzraten jene, die mit einem BD-Vorkonditionierer erreicht werden, sobald die geometrische Dimension der betrachteten Modelle ungefähr fünf Wellenlängen übersteigt. In diesen Fällen können die Rechenzeit durch den Einsatz der IFMM anstelle eines BD-Vorkonditionierers um den Faktor 1.2 bis 10.8 reduziert werden. Bezüglich des Speicherbedarfs zeigt die IFMM eine quasi-lineare Abhängigkeit zu den Freiheitsgraden. Für die höchste Wellenzahl von $k = 64$ liegt der Speicherbedarf der IFMM etwa eine Größenordnung über dem Bedarf des BD-Vorkonditionierers.

Abgesehen von den Ergebnissen in [10] fehlen allgemeingültige Aussagen der IFMM hinsichtlich der Anwendbarkeit als direktes Lösungsverfahren oder als Vorkonditionierer auf die BEM diskretisierte Kirchhoff-Helmholtz Integralgleichung. Im Bezug auf die Verwendung als Vorkonditionierer sind Vergleiche zu leistungsstärkeren Alternativen wie der unvollständige LU-Zerlegung auf Basis der Nahfeldmatrix oder neueren Entwicklungen wie einen analytischen Vorkonditionierer auf Basis der On-Surface Radiation Condition (OSRC) [3] wünschenswert. Zum derzeitigen Stand bietet sich die Anwendung der IFMM als direktes Lösungsverfahren für Problemstellungen mit vielen unterschiedlichen rechten Seiten an.

Zusammenfassung

In dieser Veröffentlichung wurde ein Überblick über die Inverse Fast Multipole Methode (IFMM) gegeben, deren Anwendung auf BEM diskretisierte Kirchhoff-Helmholtz Integralgleichungen gezeigt und zukünftige Entwicklungen abgeschätzt. Dabei wurden die zwei grundlegenden Ideen der IFMM vorgestellt: (i) die Überführung der approximierten Systemmatrix in eine erweiterte dünnbesetzte Matrix und (ii) die hierarchische Komprimierung der beim Lösen zusätzlich eingeführten Interaktionen zwischen nicht benachbarten Knoten der zugrun-

deliegenden Baumstruktur. Darüber hinaus wurden die Ergebnisse aus [10] zusammengefasst. Demnach sind genaue Versionen der IFMM als direktes Lösungsverfahren nur für Problemstellungen mit vielen rechten Seiten sinnvoll anwendbar. Weniger genaue Varianten lassen sich aber effizient als Vorkonditionierer in einen iterativen Lösungsprozess einbinden. Durch die lineare Aufwand-sabhängigkeit ist die IFMM insbesondere für große Gleichungssysteme vorteilhaft. Für die weitere Entwicklung sind zum einen die Parallelisierung des Algorithmus als auch aus die Einbindung unterschiedlicher FMM Varianten bzw. das Konzept der \mathcal{H}^2 -Matrizen denkbar.

Literatur

- [1] Ambikasaran, S.; Darve, E.: The inverse fast multipole method. arXiv preprint arXiv:1407.1572 (2014), 1–25.
- [2] Coulier, P.; Pouransari, H.; Darve, E.: The inverse fast multipole method: Using a fast approximate direct solver as a preconditioner for dense linear systems. *SIAM Journal of Scientific Computing* 39 (2017), A761–A796.
- [3] Darbas, M.; Darrigrand, E.; Lafranche, Y.: Combining analytic preconditioner and fast multipole method for the 3-D Helmholtz equation. *Journal of Computational Physics* 236 (2013), 289–316.
- [4] Fong, W.; Darve, E.: The black-box fast multipole method. *Journal of Computational Physics* 228 (2009), 8712–8725.
- [5] Greengard, L.; Rokhlin, V.: A fast algorithm for particle simulation. *Journal of Computational Physics* 73 (1987), 325–348.
- [6] Liu, Y.: *Fast multipole boundary element method: theory and applications in engineering*. Cambridge University Press, 2009.
- [7] Marburg, S.; Schneider, S.: Performance of iterative solvers for acoustic problems. Part I. Solvers and effect of diagonal preconditioning. *Engineering Analysis with Boundary Elements* 27 (2003), 727–750.
- [8] Marburg, S.; Nolte B.: *Computational acoustics of noise propagation in fluids: Finite and boundary element methods*. Springer, 2008.
- [9] Quaife, B.; Coulier, P.; Darve, E.: An efficient preconditioner for the fast simulation of a 2D stokes flow in porous media. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 113 (2018), 561–580.
- [10] Takahashi, T.; Coulier, P.; Darve, E.: Application of the inverse fast multipole method as a preconditioner in a 3D Helmholtz boundary element method. *Journal of Computational Physics* 341 (2017), 406–428.