

Beschleunigungsverfahren für die Energie-Boundary-Elemente-Methode

Matthias Ram¹, Sören Keuchel² und Otto von Estorff¹

¹ Technische Universität Hamburg, Institut für Modellierung und Berechnung, 21073 Hamburg, Deutschland, Email: mub@tuhh.de

² Novicos GmbH, 21073 Hamburg, Deutschland, Email: keuchel@novicos.de

Einleitung

Die Boundary-Elemente-Methode (BEM) zählt mittlerweile zu den verbreiteten und gut untersuchten Verfahren zur Lösung akustischer Fragestellungen. Die zur Modellierung eines Problems erforderliche Zahl an Freiheitsgraden hängt nicht nur von der betrachteten Geometrie, sondern auch vom Frequenzbereich ab. Da die Systemmatrix des zu lösenden Gleichungssystems in der BEM im Allgemeinen voll besetzt und nicht symmetrisch ist, wird der Speicherbedarf bei der Berechnung von Hochfrequenzproblemen sehr groß und limitiert den Anwendungsbeereich auf niedrige bis mittlere Frequenzen. Bei der konventionellen BEM skaliert der numerische Aufwand mit der Zahl der Freiheitsgrade N in der Ordnung $\mathcal{O}(N^2)$, durch Anwendung der Fast-Multipole-BEM (FMBEM) lässt sich die Komplexität auf $\mathcal{O}(N)$ reduzieren [1]. In der Praxis ist jedoch auch die FMBEM häufig nicht ausreichend, den ganzen hörbaren Frequenzbereich effizient abzudecken. Einen anderen Ansatz zur Erweiterung des Frequenzbereichs stellt die Energie-Boundary-Elemente-Methode (EBEM) dar. Durch den dabei vorgenommenen Übergang auf nicht phasenbehaftete energetische Zustandsgrößen wird die Korrelation zwischen betrachtetem Frequenzbereich und Elementgröße aufgehoben. Die zugrundeliegenden Annahmen setzen aber gleichzeitig ausreichend hohe Frequenzen voraus. In diesem Beitrag soll ein Fast-Multipole-Algorithmus für die EBEM vorgestellt werden, der auch für dieses Verfahren die Komplexität von $\mathcal{O}(N^2)$ auf $\mathcal{O}(N)$ reduziert. Somit wird es möglich, die Rechenzeit weiter zu verkürzen und komplexere Geometrien abzubilden.

Fast-Multipole-Algorithmus

Die Ausführungen in diesem Abschnitt beruhen im Wesentlichen auf den Referenzen [1, 2, 3].

Die Fast-Multipole-Methode (FMM) basiert auf einer Faktorisierung der Kernelfunktion K in der Form

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{n=0}^{\infty} k_n^{(1)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}_0) k_n^{(2)}(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0). \quad (1)$$

In Gleichung (1) bezeichnen \mathbf{x} und \mathbf{y} den Ort eines Empfängers beziehungsweise einer Quelle, sowie \mathbf{y}_0 einen zunächst beliebigen Punkt im \mathbb{R}^3 . Bei den Funktionen $k_n^{(1)}$ handelt es sich üblicherweise um im Ursprung singuläre Funktionen, während $k_n^{(2)}$ ganze Funktionen sind. Die Trennung von Quellen und Empfängern in Gleichung (1) ermöglicht es, den Einfluss mehrerer Quellen in Gruppen zusammenzufassen und die Information gebündelt zu übertragen. Der Aufwand, die Interaktionen auszuwerten, wird somit reduziert (siehe Abbildung 1).

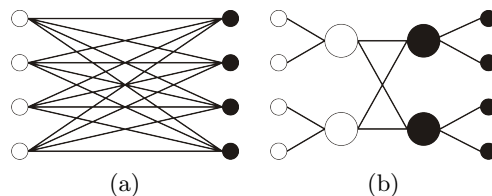


Abbildung 1: Evaluation direkter Partikelinteraktion (a) und Evaluation in einer einstufigen FMM (b) nach [2]

Da die Multipole-Entwicklung (1) üblicherweise nur unter der zusätzlichen Bedingung

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{y}_0\| > \|\mathbf{y} - \mathbf{y}_0\| \quad (2)$$

gültig ist, wird eine hierarchische Baumstruktur zur räumlichen Gruppierung der Partikel (hier: Elemente) benötigt. Somit kann sichergestellt werden, dass nur die Interaktionen von Partikeln, die durch mindestens eine Gruppe räumlich von einander getrennt sind, durch die Multipole-Entwicklung ausgewertet werden. Interaktionen mit Partikeln innerhalb einer Gruppe sowie mit Partikeln benachbarter Gruppen werden weiterhin direkt ausgewertet. Der Baum besteht auf der obersten Ebene (Level 0) aus einer einzigen Gruppe, die alle Partikel enthält. Auf dem jeweils nächsten Level wird die Gruppe je nach Dimension d des betrachteten Problems in 2^d Untergruppen zerlegt. Jeder Baum hat mindestens eine Tiefe bis Level 2. Zusätzlich werden zwischen den Gruppen die folgenden Beziehungen definiert:

- Eine Gruppe auf dem Level l wird als *Child* einer Gruppe auf dem Level $l - 1$ bezeichnet, wenn sie durch Teilung dieser Gruppe entstanden ist.
- Die geteilte Gruppe wird umgekehrt als *Parent* der durch ihre Teilung entstandenen Untergruppen bezeichnet.
- Eine Gruppe befindet sich im *Nahfeld* einer anderen Gruppe auf dem selben Level, wenn sie sich in mindestens einem Punkt berühren.
- Eine Gruppe befindet sich in der *Interaktionsliste* einer anderen Gruppe auf dem selben Level, wenn sich die Parents der beiden Gruppen im Nahfeld voneinander befinden, die betrachtete Gruppe selbst jedoch nicht Teil des Nahfelds ist.

Im \mathbb{R}^3 werden die Gruppen auch als Boxen bezeichnet und haben die geometrische Form eines Würfels. Um den Anteil direkter Auswertungen gering zu halten, werden Bäume mit mehr als drei Leveln genutzt und man spricht von der Multilevel-Fast-Multipole-Methode.

Die in der BEM auftretenden Integralgleichungen haben die Form

$$f(\mathbf{x}) = \int_{\Gamma} K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \phi(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \quad x \in \Gamma, \quad (3)$$

wobei f eine gegebene Funktion auf dem Rand Γ des Berechnungsgebiets und ϕ eine unbekannte Funktion darstellt. Unter Anwendung von Gleichung (1) lässt sich (3) für das Teilstück Γ_0 in einer Box und einen Punkt \mathbf{x} außerhalb der Box als

$$\int_{\Gamma_0} K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \phi(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} = \sum_{n=0}^{\infty} k_n^{(1)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}_0) M_n(\mathbf{y}_0) \quad (4)$$

ausdrücken. Dabei steht $M_n(\mathbf{y}_0)$ für das Multipole-Moment der Box, das als

$$M_n(\mathbf{y}_0) = \int_{\Gamma_0} k_n^{(2)}(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0) \phi(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \quad (5)$$

definiert wird. Gleichsam lässt sich für einen Punkt \mathbf{x} innerhalb einer anderen Box die lokale Entwicklung

$$\int_{\Gamma_0} K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \phi(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n(\mathbf{x}_0) k_n^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \quad (6)$$

mit den Koeffizienten $L_n(\mathbf{x}_0)$ definieren. Die Funktionen $k_n^{(3)}$ werden so gewählt, dass sie einen vollständigen Satz von inneren Lösungen der zugrundeliegenden partiellen Differentialgleichungen darstellen. Eine häufige Wahl stellt $k_n^{(3)} = k_n^{(2)}$ dar. Zur Vervollständigung der FMM müssen drei Operatoren definiert werden. Ein Operator zur Verschiebung der Multipole-Momente in den Mittelpunkt der übergeordneten Box *M2M*, ein Operator zur Translation der Multipole-Momente in die lokale Entwicklung einer Empfängerbox aus der Interaktionsliste *M2L* und ein Operator zur Verschiebung der Lokalen Entwicklung in den Mittelpunkt der Child-Box *L2L*.

Die FMM kann nun zur Approximation eines Matrix-Vektor-Produkts und in Verbindung mit einem iterativen Löser zur Berechnung eines Randwertproblems in der BEM genutzt werden. Der eigentliche Ablauf des Algorithmus kann wie folgt beschrieben werden: Beginnend auf dem tiefsten Level werden die Multipole-Momente aller Boxen nach Gleichung (5) berechnet. Die Momente werden dann mittels des *M2M* in den Mittelpunkt der jeweiligen Parent Box verschoben wobei die Kontribution aller Childs aufsummiert wird. Dieser Vorgang wird für jedes Level wiederholt, bis auf dem Level 2 für alle Boxen ein Multipole-Moment vorliegt. Im nächsten Schritt wird mittels *M2L* auf jedem Level für die Boxen der Interaktionslisten das Multipole-Moment in eine lokale Entwicklung überführt und aufsummiert. Ausgehend vom Level 2 wird dann mittels *L2L* die lokale Entwicklung eines Parents in den Mittelpunkt der Childs transformiert und zu den bestehenden Koeffizienten addiert. Dieser Vorgang wird nun ebenfalls auf jedem Level den Baum abwärts wiederholt. Im letzten Schritt wird die Entwicklung mittels Gleichung (6) an den Empfängerpunkten ausgewertet. Der Anteil aller Elemente im Nahfeld der Box wird direkt ausgewertet und zum Ergebnis aus der lokalen Entwicklung addiert.

Anwendung in der EBEM

Die der EBEM zugrunde liegende Randintegralgleichung lautet

$$\int_{\Gamma} \mathbf{H}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot \mathbf{n}_x \sigma(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} + c(\mathbf{x}) = I_n(\mathbf{x}) \quad (7)$$

(vergleiche [5]). In Gleichung (7) bezeichnet \mathbf{n}_x den Normalenvektor am Empfängerpunkt, $\sigma(\mathbf{y})$ die virtuelle Quellstärke auf dem Rand, $c(\mathbf{x})$ die Randfaktoren und $I_n(\mathbf{x})$ die Intensität in Normalenrichtung. Die Kernelfunktion ist durch

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{e^{-\mu r}}{4\pi} \frac{\mathbf{r}}{r^3} \quad (8)$$

mit $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{y}$, $r = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$ und dem Dämpfungskoeffizienten μ gegeben. Zur Umsetzung einer FMM zur Lösung der Randintegralgleichung (7) ist eine Entwicklung (1) für den Kernel (8) gesucht. Für den allgemeinen Fall ist jedoch keine offensichtliche Faktorisierung erkennbar.

Da der Kernel nicht oszillierend und außerhalb der Singularität glatt ist, ist die Nutzung einer sogenannten kernel-unabhängigen Methode [6] möglich. Für den Sonderfall der ungedämpften akustischen Wellenausbreitung, die für viele praktische Probleme eine zulässige Annahme darstellt, kann aber auch eine analytische Formulierung gefunden werden, die im Folgenden vorgestellt wird.

Mit $\mu = 0$ kann für das Skalarprodukt $\mathbf{H}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot \mathbf{n}_x$ die Identität

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot \mathbf{n}_x = \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{n}_x}{4\pi r^3} \equiv -\frac{\partial G(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial \mathbf{n}_x} \quad (9)$$

mit der Greenschen Funktion für die Laplace-Gleichung $G(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{4\pi r}$ gefunden werden. Das Skalarprodukt $\mathbf{H}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot \mathbf{n}_x$ wird also als Normalenableitung des Laplace-Kernels am Empfängerpunkt interpretiert. Dieser Ansatz ermöglicht es, eine FMM auf Basis der bekannten Multipole-Entwicklung für den Laplace-Kernel [4]

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \bar{S}_n^m(\mathbf{x} - \mathbf{y}_0) R_n^m(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0) \quad (10)$$

umzusetzen. In Gleichung (10) kennzeichnet das Symbol $\bar{\cdot}$ die komplexe Konjugation. Die R_n^m und S_n^m benannten Funktionen werden als *Solid Harmonics* bezeichnet und sind als

$$R_n^m(\mathbf{x}) = \frac{1}{(n+m)!} P_n^m(\cos \theta) e^{im\phi} r^n \quad (11)$$

und

$$S_n^m(\mathbf{x}) = \frac{1}{(n-m)!} P_n^m(\cos \theta) e^{im\phi} \frac{1}{r^{n+1}} \quad (12)$$

definiert. In den Gleichungen (11) und (12) wird der Vektor \mathbf{x} in den Kugelkoordinaten r, ϕ, θ dargestellt und die Funktionen P_n^m bezeichnen die assoziierten Legendrefunktionen vom Grad n und der Ordnung m , entsprechend der Definition in [4] ohne Berücksichtigung der

Condon-Shortley-Phase. In der Schreibweise von Gleichung (1) wurde also $k_l^{(1)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}_0) = \bar{S}_{n(l)}^{m(l)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}_0)$ und $k_l^{(2)}(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0) = R_{n(l)}^{m(l)}(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0)$ gewählt. Da die in Gleichung (9) gesuchte Normalenableitung $\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}_x}$ sich nur auf den Empfänger auswirkt, ergibt sich für den EBEM-Kern nur im letzten Schritt, der Auswertung am Empfängerpunkt gemäß Gleichung (6), eine Änderung. Mit $k_l^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \frac{\partial R_{n(l)}^{m(l)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)}{\partial \mathbf{n}_x}$ ergibt sich

$$\int_{\Gamma_0} \mathbf{H}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot \mathbf{n}_x \sigma(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} = -\frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n L_n^m(\mathbf{x}_0) \frac{\partial R_n^m(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)}{\partial \mathbf{n}_x}. \quad (13)$$

Das Multipole-Moment der Boxen auf dem tiefsten Level berechnet sich unter Berücksichtigung der Diskretisierung mit den Elementen i der Box und ihren Ansatzfunktionen N_i zu

$$M_n^m(\mathbf{y}_0) = \sum_{i \in \text{Box}} \int_{\Gamma_i} R_n^m(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0) N_i(\mathbf{y}) \sigma(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y}. \quad (14)$$

Die Translationen $M2M$, $M2L$ und $L2L$ können direkt aus der FMM für die Laplace-Gleichung übernommen werden. Dies sind nach [4]

$$M_n^m(\mathbf{y}'_0) = \sum_{n'=0}^n \sum_{m'=-n'}^{n'} R_{n'}^{m'}(\mathbf{y}_0 - \mathbf{y}'_0) M_{n-n'}^{m-m'}(\mathbf{y}_0), \quad (15)$$

$$L_n^m(\mathbf{x}_0) = \sum_{n'=0}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} (-1)^n \bar{S}_{n+n'}^{m+m'}(\mathbf{x}_0 - \mathbf{y}_0) M_{n'}^{m'}(\mathbf{y}_0), \quad (16)$$

$$L_n^m(\mathbf{x}_1) = \sum_{n'=n}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} R_{n'-n}^{m'-m}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) L_{n'}^{m'}(\mathbf{x}_0). \quad (17)$$

Gleichung (15) repräsentiert dabei $M2M$, Gleichung (16) $M2L$ und Gleichung (17) $L2L$. Zur Auswertung der lokalen Entwicklung (13) werden zudem die Ableitungen von R_n^m benötigt. Sie können zu

$$\frac{\partial}{\partial x} R_n^m = \frac{1}{2} (R_{n-1}^{m-1} - R_{n-1}^{m+1}), \quad (18)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} R_n^m = \frac{i}{2} (R_{n-1}^{m-1} + R_{n-1}^{m+1}), \quad (19)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} R_n^m = R_{n-1}^m \quad (20)$$

bestimmt werden [4]. In der numerischen Implementierung wird die äußere Summe nach p Gliedern abgebrochen, damit werden die Multipole-Entwicklung und lokale Entwicklung einer jeden Box durch jeweils p^2 Koeffizienten charakterisiert.

Ergebnisse

Die im vorigen Abschnitt beschriebene Fast-Multipole-EBEM wurde im Kontext einer BEM-Bibliothek in C++ umgesetzt.

Das Verfahren ist als Multi-Level-Fast-Multipole-Methode realisiert worden, wobei die Anzahl n der erforderlichen Level nach [7] zu

$$n \approx \log_8(N) \quad (21)$$

abgeschätzt wird.

Als Testfall für eine erste Verifikation und Untersuchung des Verfahrens wird die Geometrie einer Kugel betrachtet, für welche die Intensitäts-Randbedingung entsprechend einer Punktquelle in ihrem Mittelpunkt vorgeschrieben wird. In Abbildung 2 ist die Quellstärke auf dem Rand einer Kugel mit 9359 Elementen mit konstanten Ansatzfunktionen als Berechnungsergebnis einer konventionell implementierten EBEM dargestellt.

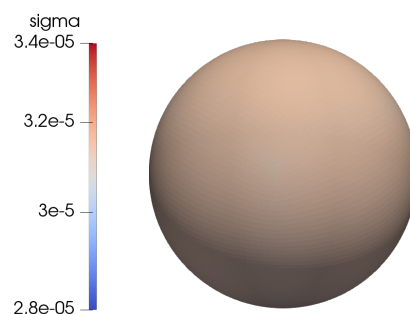


Abbildung 2: Quellstärke auf dem Rand der Kugel nach direkter Auswertung von (7) mittels konventioneller EBEM

In Abbildung 3 sind die Berechnungsergebnisse der FMEBEM für den selben Fall gezeigt. Hier treten bei einer Entwicklungslänge von $p = 3$ noch verhältnismäßig große Abweichungen in der Größenordnung 10% auf, mit größeren Entwicklungslängen nehmen diese jedoch rasch ab. Für $p = 6$ ist bereits eine qualitativ sehr gute Übereinstimmung mit dem direkt berechneten Ergebnis aus Abbildung 2 ersichtlich. Die Rechenzeiten der FMEBEM liegen in allen Fällen mit 3–5 s deutlich unter der Rechenzeit für die direkte Auswertung von 15 s.

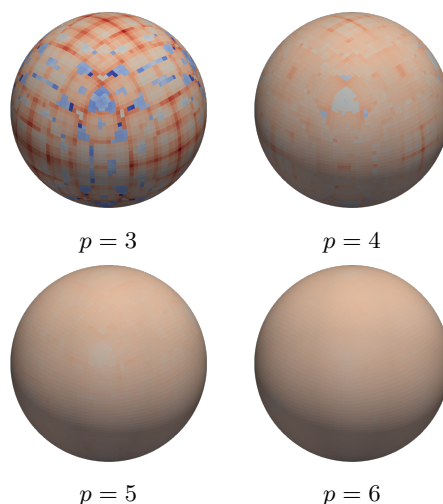


Abbildung 3: Quellstärke auf dem Rand als Ergebnis der FMEBEM mit unterschiedlichen Entwicklungslängen (Farbskala wie Abbildung 2)

Da die Operatoren $M2M$, $M2L$ und $L2L$ in der hier implementierten Form die Komplexität $\mathcal{O}(p^4)$ haben und die Entwicklungslänge somit potenziell große Auswirkungen auf die Rechenzeit hat, wird der Einfluss der Entwicklungslänge auf Genauigkeit und Rechenzeit genauer betrachtet. Es wird zunächst der relative mittlere Fehler in der euklidischen Norm als

$$\varepsilon = \frac{\sqrt{\sum_N (\sigma_{\text{direkt}}(r_i) - \sigma_{\text{FMM}}(r_i))^2}}{\sqrt{\sum_N \sigma_{\text{direkt}}^2(r_i)}} \quad (22)$$

definiert. In Gleichung (22) bezeichnet $\sigma_{\text{direkt}}(r_i)$ die Quellstärke an dem Kollokationspunkt i als Ergebnis der direkten EBEM und σ_{FMM} die Quellstärke als Ergebnis der FMEBEM. In Abbildung 4 sind der so berechnete Fehler und die Rechenzeit über der Entwicklungslänge aufgetragen. Unerwartet ist, dass der Fehler nicht monoton fällt, sondern ab $p = 12$ stagniert. Das Verhalten konnte bislang nicht restlos aufgeklärt werden, eine mögliche Erklärung ist die begrenzte Maschinengenauigkeit bei der Berechnung großer Fakultäten. Es werden jedoch bereits sehr geringe relative Abweichungen erreicht. Nachdem die Genauigkeit des Verfahrens gezeigt werden

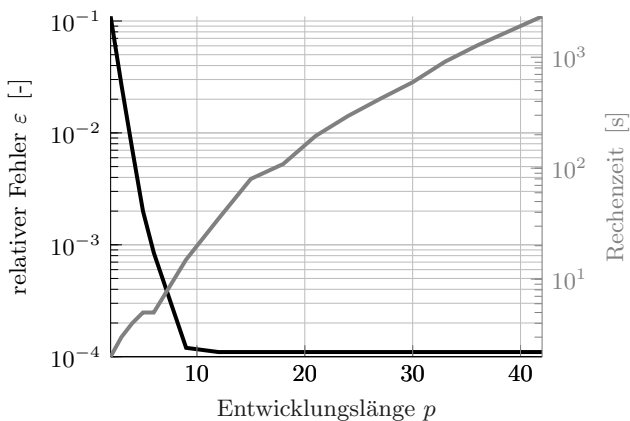


Abbildung 4: Rechenzeit und Fehler der FMEBEM in Abhängigkeit der Entwicklungslänge

konnte, wurde im nächsten Schritt ein erster Vergleich des numerischen Aufwands in Abhängigkeit der Freiheitsgrade unternommen. Hierzu wurde das Netz stufenweise verfeinert. Abbildung 5 zeigt die Berechnungsdauer sowie den Speicherbedarf während der Berechnung jeweils für das konventionelle Verfahren und die FMEBEM bei konstanter Entwicklungslänge. Es wird ersichtlich, dass die FMEBEM mit der Komplexität $\mathcal{O}(N)$ skaliert, während die konventionelle EBEM die Komplexität $\mathcal{O}(N^2)$ aufweist. Insbesondere ist es mit der FMEBEM aufgrund des geringeren Speicherbedarfs auch möglich, wesentliche größere Modelle zu berechnen.

Zusammenfassung und Ausblick

Es konnte ein Fast-Multipole-Algorithmus für den ungedämpften EBEM-Kernel entwickelt und erfolgreich getestet werden. Das Verfahren wurde anhand des Vergleichs mit einer direkten EBEM-Berechnung verifiziert und liefert sehr genaue Ergebnisse. Der Speicherbedarf

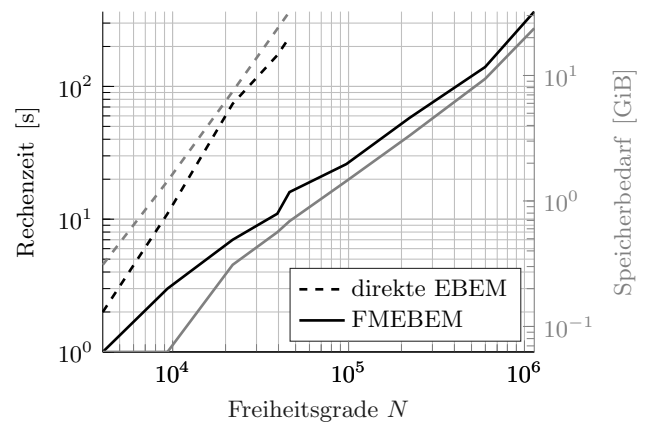


Abbildung 5: Rechenzeiten und Speicherbedarf für direkte EBEM und FMEBEM in Abhängigkeit der Freiheitsgrade

sowie die Berechnungsdauer konnten mit dem Verfahren gegenüber der konventionellen EBEM deutlich reduziert werden.

Für den Laplace-Kernel existieren effizientere Operatoren der Komplexität $\mathcal{O}(p^3)$ (vergleiche [1, 4, 7]), die für das hier vorgestellte Verfahren implementiert und untersucht werden sollen. Weiterhin sollen Möglichkeit und Nutzen einer FMM für den gedämpften EBEM-Kernel, zum Beispiel auf Basis einer Kernel-unabhängigen FMM [6] betrachtet werden.

Literatur

- [1] Nishimura, N., 2002. Fast multipole accelerated boundary integral equation methods. In: Applied Mechanics Reviews 55 (4), S. 299-324
- [2] Gumerov, Neil A. und Ramani Duraiswami, 2004. Fast Multipole Methods for the Helmholtz Equation in Three Dimensions. In: Elsevier Series in Electromagnetism. Elsevier Science. ISBN 9780080443713
- [3] Keuchel, Sören, 2017. Aufwandsreduzierung in der Fast-Multipole-Boundary-Elemente-Methode [Dissertation]. Technische Universität Hamburg-Harburg. Aachen: Shaker Verlag. ISBN 9783844050455
- [4] Yoshida, Ken-ichi, 2001. Applications of Fast Multipole Method to Boundary Integral Equation Method [Dissertation], Kyoto: University
- [5] Ram, Matthias, Sören Keuchel, Joscha Piepiorka und Otto von Estorff 2018. Energiebasierte BEM und Fast-Multipole BEM für Hochfrequenzprobleme: Eine Gegenüberstellung. In: Fortschritte der Akustik - DAGA 2018, 44. Deutsche Jahrestagung für Akustik, 19.-22. März 2018 in München.
- [6] Fong, William und Eric Darve, 2009. The black-box fast multipole method. In: Journal of Computational Physics 228 (23), S. 8712-8725
- [7] Greengard, L. und V. Rokhlin, 1996. A New Version of the Fast Multipole Method for the Laplace Equation in Three Dimensions. Research Report YALEU/DCS/RR-1115