計算工学講演会論文集 Vol. 29 (2024 年 6 月)
日本計算工学会

高性能計算機における高速直接境界要素法の並列化効率

A numerical examples for the parallelization efficiency of the fast direct boundary element method

松本安弘 [1)]
Yasuhiro Matsumoto

[1)]博士 (情報学) 東京工業大学 学術国際情報センター 特任講師（〒 152-0012 東京都目黒区大岡山 2-12-1 I8-21, E-mail: matsumoto@gsic.titech.ac.jp)

The fast direct boundary element method proposed by Martinsson and Rokhlin allows the algorithm to be executed independently for each node of the tree structure in each level. It is considered to exhibit excellent parallelization efficiency, especially at the leaf level of the tree. However, this algorithm is rarely implemented for high-performance computing platforms such as supercomputers. This presentation aims to verify its parallelization efficiency on supercomputers.

Key Words : *Fast direct solver, Boundary element method, Helmholtz equation, OpenMP*

1. はじめに

境界要素法を LU 分解等の直接解法で愚直に求解する場合，未知数の数を N として，$O(N^3)$ の計算量を必要とする．Martinsson and Rokhlin は，この計算量を (最良の場合に)$O(N)$ に減じることができる高速直接解法を 2005 年に提案した [1]．この高速直接解法は，木構造を用いた分割統治アルゴリズムである．木構造の同一の階層に属するノードに対する処理は，他のノードに対する処理と依存関係がなく，独立に実行できる．このために，ノード単位でアルゴリズムを俯瞰すると非常に高い並列性能を有すると考えられる．

一方で，スーパーコンピュータ等の高性能計算機上での並列実行性能を念頭においてこの高速直接解法を実装した例は著者の知る限りほとんどない．実際，このアルゴリズムは `Matlab` 実装されることが多い (例えば [2] など)．なお，Martinsson and Rokhlin の方法とは別のアルゴリズムである，ULV 分解に基づく高速直接解法にはスパコン向け実装例がある [3]．

本研究では，Martinsson and Rokhlin による高速直接解法の並列化性能を明らかにする第一歩として，`OpneMP` の中でも比較的簡単なディレクティブを用い，Helmholtz 方程式の transmission 問題を解く際の strong スケーリング性能を検証する．

2. Helmholtz 方程式の transmission 問題

簡単のため単一の有界領域 $\Omega_2 \subset \mathbb{R}^2$ を考える．また境界 $\Gamma = \partial\Omega_2$ はなめらかかつ自己交差しないものとする．入射波として平面波 u^I が外部領域 $\Omega_1 = \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega_2}$ にあるとする. このとき，次の条件

$$\Delta u(x) + k_j^2 u(x) = 0 \text{ in } \Omega_j, \tag{1}$$

$$u^+(x) = u^-(x) \text{ on } \Gamma, \tag{2}$$

$$\frac{1}{\varepsilon_1}\frac{\partial u^+}{\partial n}(x) = \frac{1}{\varepsilon_2}\frac{\partial u^-}{\partial n}(x) \text{ on } \Gamma, \tag{3}$$

$$\text{the outgoing radiation condition for } u - u^I, \tag{4}$$

を満たす解 u を求める問題が Helmholtz 方程式の transmission 問題である．ここに $k_j = \omega\sqrt{\varepsilon_j\mu_j}$, ε_j, μ_j はそれぞれ波数，比誘電率，比透磁率である．ω は角振動数であり, n は Γ 上から Ω_1 に向かう単位法線ベクトル，$\frac{\partial}{\partial n}$ は法線微分の意であり，上付きの + (–) は Ω_1 (Ω_2) から Γ への極限移行を表す.

3. 境界積分方程式

条件 (1)–(4) に対応する境界積分方程式として，Burton-Miller 法 [4] を用いた積分方程式を用いる．離散化には区分一定要素による選点法を用いる．詳細は [5] の 2.2 節等を参照されたい.

4. Martinsson and Rokhlin の高速直接解法

Martinsson and Rokhlin の高速直接解法は主に補間分解 [6] と proxy 法 [1] を組み合わせることにより実現されている．Burton-Miller 型の積分方程式を用いる場合の補間分解と proxy 法の適用方法は [5] の 3 節等を参照されたい.

ここでは概念的なアルゴリズムについて述べる．Martinsson and Rokhlin による高速直接解法は次の通り，init, upward, downward の順に実行される．

1. init:
   (a) 境界要素，節点等を作成し，2 分木構造により分割する．
   (b) 右辺ベクトルを構成する．
2. upward: 次の処理を指定する木構造の階層における線型方程式を得るまで繰り返す.
   (a) (木構造の leaf 層の場合のみ) 係数行列の対角ブロックの行列エントリの直接計算を行う．
   (b) それぞれの対角ブロック (木構造の同じ階層に属するノード) に対し，proxy 法と補間分解を用い，行・列スケルトンと対応する線型結

合パラメータを計算する．スケルトンと線型結合パラメータを用いて線型方程式をより未知数の小さなそれへ変換する．

(c) 同じ親ノードに属する 2 つの子ノードがもつスケルトンの情報を統合し，親ノードで有効とする境界要素，節点等の番号を得る．この節点番号等に基づき，変換後の線型方程式の係数行列の行・列および右辺ベクトルを並べ替え，1 層上の木構造における (変換前の) 線型方程式を構成する．

3. downward: 次の処理を木構造の leaf の階層における解 (もとの線型方程式の解) を得るまで繰り返す．
   (a) (指定する木構造の最上位階層の場合のみ) 現階層における線型方程式を解き，解を得る．
   (b) 解を 1 層下の木構造における解へ変換する．

5. 並列化の要点

OpenMP には様々な機能があるが，本研究では比較的簡単な for ディレクティブまたは single + task/taskloop ディレクティブのみを用いた単純な実装とした．実装上の工夫として，前節の upward の実行に必要な OpenMP のスレッドの同期回数を減らすよう，upward の (a), (b), (c) をそのままの順では実装せず，

1: **for** $level \leftarrow leafLev, leafLev-1, \cdots, stopLev$ **do**
2:     **for all** $i \leftarrow nodes$ of $level$ **do**
3:         **if** $level = leafLevel$ **then**
4:             Do (a) for i
5:         **else**
6:             Do (c) for i
7:         **end if**
8:         Do (b) for i
9:     **end for**
10: **end for**

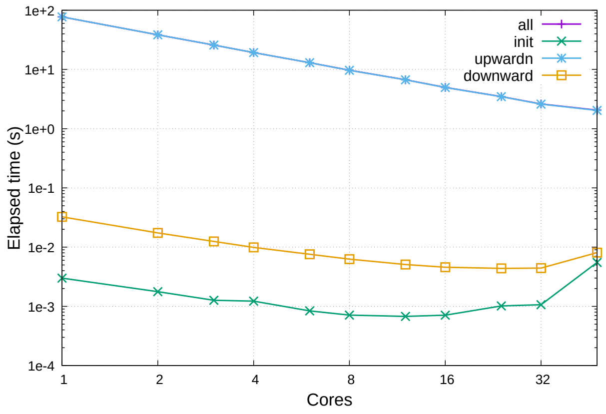
のように実装した．上記アルゴリズム 2 行目の **for all** の繰り返し処理が OpenMP の taskloop による並列化対象である．このようにすることで，taskloop 終了時の自明な暗黙的同期 1 回のみで木構造の各階層ごとの繰り返し処理を実行できる．ここに，(c) はある親ノードに対応するすべての子ノードの (b) の完了後にしか実行できず，本研究の taskloop ディレクティブの形式でそのまま (b), (c) の順に実行するには (b) の終了を待つための同期を必要とすることに注意が必要である．また，1 行目の **for** は実行順序の依存関係があり並列化できない．OpenMP のスレッド生成のオーバーヘッドを避けるために，single + taskloop ディレクティブによる並列化を実施した．

6. 数値計算結果

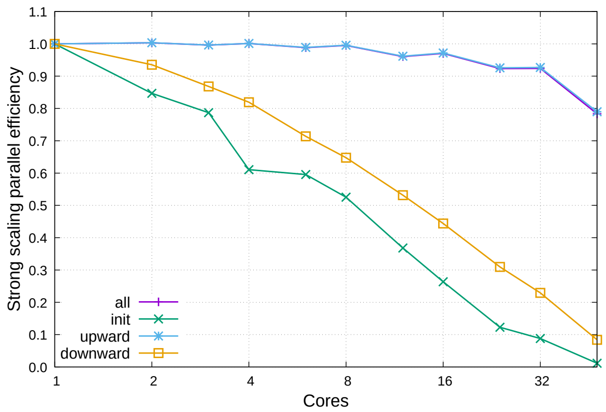
数値計算には筑波大学のスパコン Pegasus システムを用いた (1 ノードあたり第 4 世代 Intel Xeon CPU 48 コア)．使用コア数を変化させながら，高速直接境界要素法を解いたときの計算時間，並列化効率を測定した結果をそれぞれ**図-1**，**図-2** に示す．計算条件は，境界形状を正円，境界の分割数を約 10 万 (未知数約 20 万)，角振動数を 1.0，外部の比誘電率を 1.0，内部の比誘電率を 3.0 とした．また，**図-2** に示した strong スケーリング効率 α は，1 コアを使って問題を解いたときの時間を T_1 としたとき，m コアを使って問題を解いたときの計算時間 T_m によって，

$$\alpha = \frac{T_1}{T_m}$$

と定義した．つまり $0 < \alpha \leq 1$ であり，$\alpha = 1$ のとき最良の strong スケーリング効率となる．



図–1 コア数ごとの計算時間



図–2 コア数ごとの strong スケーリング効率

図-1 から，全体の計算時間のほとんどを upward が占めていることがわかる．init と downward は 48 コアのとき，32 コアのときに比較して計算時間が増加しているが，全体の計算時間へはほとんど影響がない．また**図-2** から，16 コアまでは 100%に近い strong スケーリング効率が得られていることがわかる．32 コアで 90%程度，48 コアで 80%程度の効率であった．木構造に存在するノード数は同一であるのに対してコア数を増加させたため，ノード数の少ない木構造の root に近い階層において並列化効率が徐々に低下したものと考えられる．またアルゴリズム全体の効率と upward の効率はほぼ同じであった．

講演においては，年度当初のアカウント発行タイミングの問題で実行できなかった，より CPU コア数が多い東京工業大学 TSUBAME4.0 もしくは京都大学 Camphor3 による数値計算結果を発表する予定である．

7. 結言

Helmholtz 方程式の transmission 問題の数値解法として Burton-Miller 型境界積分方程式を用いる場合の Martinsson-Rokhlin 型の高速直接解法の並列化効率を検証した．CPU 48 コアのマシンにおいて，約 80%の strong スケーリング効率を確認した．

謝辞: 本研究は JSPS 科研費 JP23K19972, 24K20783 の助成ならびに JHPCN および HPCI による課題番号 jh240031 の支援を受けた．

参考文献

[1] Per-Gunnar Martinsson and Vladimir Rokhlin. A fast direct solver for boundary integral equations in two dimensions. *Journal of Computational Physics*, Vol. 205, No. 1, pp. 1–23, 2005.

[2] Adrianna Gillman, Patrick M Young, and Per-Gunnar Martinsson. A direct solver with O(N) complexity for integral equations on one-dimensional domains. *Frontiers of Mathematics in China*, Vol. 7, pp. 217–247, 2012.

[3] Qianxiang Ma, Sameer Deshmukh, and Rio Yokota. Scalable linear time dense direct solver for 3-d problems without trailing sub-matrix dependencies. In *SC22: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, pp. 1–12. IEEE, 2022.

[4] AJ Burton and GF Miller. The application of integral equation methods to the numerical solution of some exterior boundary-value problems. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, Vol. 323, No. 1553, pp. 201–210, 1971.

[5] 松本安弘, 西村直志. 2 次元 Helmholtz 方程式の 1 周期 transmission 問題に対する Burton-Miller の定式化を用いた高速直接解法. 計算数理工学論文集, Vol. 19, pp. 73–78, 2019.

[6] Hongwei Cheng, Zydrunas Gimbutas, Per-Gunnar Martinsson, and Vladimir Rokhlin. On the compression of low rank matrices. *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol. 26, No. 4, pp. 1389–1404, 2005.