ОПТИМИЗАЦИЯ КЛАСТЕРНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КРИТЕРИЕВ СТРУКТУРНОЙ СЛОЖНОСТИ

В.Е. Подольский, С.С. Толстых

Тамбовский государственный технический университет

Эффективность использования вычислительных кластеров во многом зависит от выбора структуры взаимодействия компьютеров в сети при решении конкретных задач. Использование вычислительных кластеров для решения прикладных задач тем легче (т.е. требует меньшей квалификации программиста), чем уже проблема, и, в особенности, проще структура задачи. В нашей работе основное внимание уделяется решению структурно–сложных задач. Рассматривается комплексная математическая модель, состоящая из специализированных блоков, предназначенных для решения типовых задач (системы уравнений, численное интегрирование, комбинаторика, адаптированные под эмпирику датчики случайных чисел и др.). Считается, что каждый блок сложной модели процедурно обеспечен и работает, в свою очередь, с использованием параллельных вычислений. Вместе с тем соединение блоков в единую модель остается проблематичным. Необходимость решения подобных задач становится тем очевиднее, чем выше производительность кластера. Примерами задач могут служить многие уже разработанные математические модели крупных производственных процессов (имитационное моделирование работы электростанций, химических цехов с большим числом одновременно протекающих процессов и др.). Именно с развитием вычислительных кластеров связаны комплексные решения задач большой размерности, которые до недавнего времени считались безнадежными в практическом плане. При этом значительную роль играют вычисления с повышенной разрядностью. Так, при решении, например, задач, связанных с моделированием химических реакций, часто возникают проблемы жесткости системы дифференциальных уравнений. Несмотря на то, что «жесткую» задачу удается эффективно перенести на вычислительный кластер, точность ее решения вызывает большие сомнения, если использовать стандартные представления чисел на периферийных компьютерах. Таким образом, при решении блочных задач проблемы размерности и точности могут быть взаимосвязаны: чем больше блоков участвует в моделировании, тем априори выше требования к точности вычислений с вещественными числами.

В нашей работе мы стремимся рассматривать структуру вычислений как адаптируемый ориентированный граф с параметричностями дуг в виде фреймов знаний, включающих в себя количественную и качественную информацию о передаче информации из блока в блок. Адаптация графа подразумевает смену структуры и/или уточнение фреймов с последующим пересчетом схемы кластерного расчетного модуля. В основе оптимизации расчетов – два конкурирующих критерия структурной сложности.

Итак, имеется система S, структура которой представима в виде сильно связного графа. Рассмотрим ряд модификаций классических матричных представлений сильно связного ориентированного графа без петель $G = (V, D, \Gamma)$, где $V = \{v_1, v_2, ..., v_n\}$ – множество вершин графа; $D = \{d_1, d_2, ..., d_m\}$ – множество дуг с параметричностями $\Gamma = \{\gamma_1, \gamma_2, ..., \gamma_m\}$. В данной работе будем считать, что дуги $d_k(i,j) = (v_i \to v_j), k = 1..m; i, j \in \{1..n\}$ имеют вещественные параметричности $\gamma_k(i,j) \in R_1^+$. В частности, это могут быть целые числа, как в работах Г.М. Островского [1]. Нумерация дуг подчиняется правилу Ξ, о котором будет сказано ниже. Граф G считается конденсированным по правилу Ψ так, что в нем изначально нет транзитивных вершин:

$$\nexists i, j, l, i_1, i_2 \in \{1..n\}, k, k_1, k_2, k_3, k_4 \in \{1..m\} : \left(\exists \left(d_{k_1}(i,j), d_{k_2}(j,l)\right), \exists \left(d_{k_3}(i_1,j), d_{k_4}(j,i_2)\right)\right).$$

1. Взвешенная матрица смежности

$$\mathbf{X} = (x_{ij})_{n,n};\ x_{ij} = \begin{cases} \exists d_k \in D \Rightarrow x_{ij} = \gamma_k(i,j), k \in \{1..m\}, \\ \nexists d_k \in D \Rightarrow 0, k \in \{1..m\}. \end{cases}$$

2. Взвешенная матрица инцидентности

$$\mathbf{B} = (b_{ij})_{n,m};\ b_{ij} = \begin{cases} \exists d_j(l,k), i \neq l, i \neq k \Rightarrow 0; k, l \in \{1..m\}, \\ \exists d_j(i,k) \Rightarrow x_{ik}; k \in \{1..m\}, \\ \exists d_j(k,i) \Rightarrow 2x_{ki}; k \in \{1..m\}. \end{cases}$$

3. Взвешенная матрица контуров

$$\mathbf{C} = (c_{ij})_{r,m};\ c_{ij} = \begin{cases} \underline{c}_{ij} = 1 \Rightarrow x_{uk} \sum_{l=1}^{r} \underline{c}_{lj}; \exists d_j(u,k), j \in \{1..m\}, \\ \underline{c}_{ij} = 0 \Rightarrow 0. \end{cases}$$

Здесь $\underline{\mathbf{C}}$ – матрица элементарных контуров:

$$\underline{\mathbf{C}} = (\underline{c}_{ij})_{r,m};\ \underline{c}_{ij} = \begin{cases} \exists \kappa_i = \left(d_{k_1}(i_1, j_1), d_{k_2}(i_2, j_2), ..., d_{k_{t_i}}(i_{t_i}, i_1)\right) \Rightarrow 1; \\ \nexists \kappa_i \Rightarrow 0, \end{cases}$$

где r – число контуров графа G; κ_i – i–й элементарный контур.

Правило Ξ нумерации дуг устанавливает в качестве более приоритетных дуги, входящие в большее число элементарных контуров:

$$\forall\, d_{k_1}, d_{k_2} \in D : \sum_{i=1}^{r} \underline{c}_{ik_1} \geq \sum_{i=1}^{r} \underline{c}_{ik_2} \Rightarrow k_1 < k_2 .$$

В рассмотрение вводится понятие «матрица сложности» графа G:

$$\mathbf{W}(G) = \left(\mathbf{XBC}^{\mathrm{T}}\right)\left(\mathbf{XBC}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}} = \left(w_{ij}\right)_{n,n} \tag{1}$$

Аксиома абстрактной сложности: граф G_1 сложнее графа G_2, если $\|\mathbf{W}(G_1)\|_F > \|\mathbf{W}(G_2)\|_F$.

Критерий предпочтительности используется нами в анализе структурной сложности графа G и вычисляется рекурсивно:

$$P(G) \Leftarrow \frac{\left\| W\left(G\middle|\gamma_1^* \Leftarrow \gamma_1^* + \delta\right)\right\|_F - \left\| W\left(G\middle|\gamma_1^* \Leftarrow \gamma_1^* - \delta\right)\right\|_F}{2\delta} \times \frac{1}{\gamma_1^*} \times$$
$$\times \left[1 + \sum_{i=1}^{\beta_1^*} P\left(Dec\left(G \Leftarrow \Psi\left(X, D \setminus \left\{d_1^*\right\}, \Gamma \setminus \left\{\gamma_1^*\right\}\right)\right)[i]\right)\right] \to \frac{}{d_1^*} \to \max, \tag{2}$$

где d_1^* – первая дуга в иерархии разрывов при итерационном расчете системы S; γ_1^* – ее параметричность; $G\left|\gamma_1^* \Leftarrow \gamma_1^* \pm \delta\right.$ – граф G, в котором параметричность дуги d_1^* получает приращение, равное $\pm\delta$; δ – параметр численного дифференцирования нормы Фробениуса матрицы $\mathbf{W}$.

Рекурсивность критерия (2) подразумевает, что после разрыва дуги d_1^* сначала проводится конденсация графа G без дуги d_1^*, а затем структурная декомпозиция: формально говоря, оператор $Dec(G)$ выявляет массив из β –го числа сильно связных подсистем (запись β_1^* означает, что число подсистем обусловлено разрывом дуги d_1^*; выражение $Dec(G)[i]$ формально означает «i–я сильно связная подсистема»), а затем к каждой i–й подсистеме применяется та же процедура вычисления критерия предпочтительности, что и к исходному графу. Для нахождения массива сильно связных подсистем оператор структурной декомпозиции использует матрицу достижимости $U = [sign(X)]^n$, в которой каждой отдельно взятой подсистеме соответствует набор одинаковых строк. Для исходного графа характерно равенство $\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} sign(u_{ij}) = n(n-1)$. Нумерация подсистем соответствует нумерации подматриц, образующих квазидиагональ матрицы смежности после установки в нуль элемента $x_{ij} \Leftrightarrow d_1^*$ в ее квазитреугольной форме, если она существует. Возможна ситуация, когда после разрыва дуги d_1^* граф продолжает оставаться сильно связным. В этом случае $\beta_1^* = 1$.

На рис. 1 показано, как организуются параллельные вычисления с использованием критерия предпочтительности. Без ограничения общности будем полагать, что граф системы после разрыва дуги d_1^* является совокупностью из двух гамаков. Через дуги, обозначенные 2 и 3, проходит наибольшее число контуров, и предположительно именно они наиболее

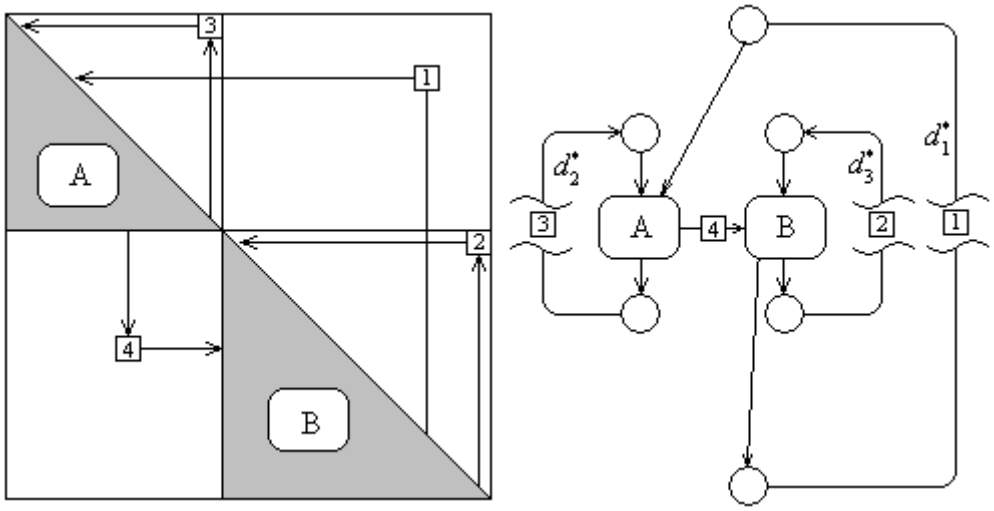

Рис. 1. Иллюстрация к параллельному расчету системы по критерию

предпочтительны к разрыву; производная нормы матрицы сложности по параметричности этих дуг больше производной для других дуг (производные всегда неотрицательные). Дуга d_1^* – первая дуга в иерархии разрывов, именно с разрыва этой дуги начинается итерационный расчет всей системы. Разрыв предполагает, что переменным, сопоставленным с этой дугой, производится задание начальных приближений с последующим уточнением, например методом Ньютона–Рафсона. Расчет подсистем A и B производится параллельно. Переменные, сопоставленные с дугой 4, находятся в критической секции, и доступ к ним можно регулировать (тривиальный случай – общая область памяти между двумя процессами). Внутри цикла по переменным разрыва дуги d_1^* находятся еще два итерационных цикла; после их параллельного прохождения в подсистеме B формируются уточненные значения переменных, сопоставленных дуге d_1^*. Разность заданных и полученных значений является, по сути дела, левой частью СНУ, решаемой в разрыве 1.

Следует отметить, что шкалирование сильно связных систем по критерию предпочтительности более конструктивно, нежели по норме матрицы сложности.

Рассмотрим другой критерий структурной сложности, по которому можно производить итерационный расчет больших систем. В работе [2] впервые появился термин «пролонгатор»; сам критерий претерпел с того времени значительные изменения [3–5], но название мы решили сохранить. В настоящее время он подкреплен аксиоматикой и выводом операторных уравнений, позволяющих расширить применение пролонгатора к фреймовым параметричностям. Пока же для сопоставления с критерием предпочтительности мы оставим параметричности вещественными:

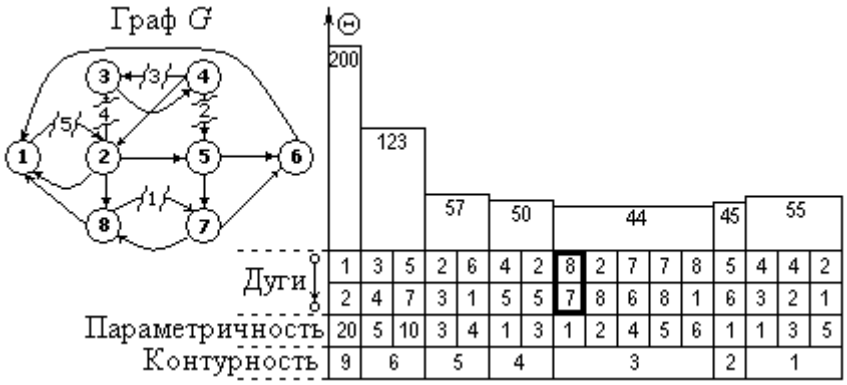

Рис. 2. Иллюстрация к вычислению пролонгатора

$$\theta(G) \Leftarrow \gamma_1^* \left[1 + \sum_{i=1}^{\beta_1^*} \theta\left(Dec\left(G \Leftarrow \Psi\left(X, D \setminus \{d_1^*\}, \Gamma \setminus \{\gamma_1^*\}\right)\right)[i]\right) \right] \xrightarrow[d_1^*]{} \min . \qquad (3)$$

На рис. 2 приведен пример графа из 8 вершин и показаны оптимальные разрывы, найденные в результате минимизации пролонгатора (номера разрывов). На этом же рисунке приведена диаграмма, иллюстрирующая вычисление пролонгатора на верхнем уровне рекурсии. Дуга $8 \to 7$ обведена жирной линией: именно с разрыва этой дуги начинается итерационный расчет системы, представленной графом G.

На рис. 2 видно, что наиболее предпочтительной к разрыву является дуга $1 \to 2$ – она разрывает сразу 9 контуров, но имеет большую параметричность, слишком большую, чтобы было выгодно начинать с ее разрыва итерационный расчет. Как видно из этого рисунка, правило Ξ нумерации дуг дополняется необходимостью упорядочения дуг в порядке возрастания параметричностей внутри каждой подматрицы матрицы элементарных контуров. На шкале сложности показана выпуклая оболочка значений пролонгатора. От особенностей ее построения во многом зависит вычислительная сложность алгоритма вычисления пролонгатора. Выведен ряд особенностей поведения функции $\theta(G)$, позволяющих находить d_1^* за время, которое зависит от размерности системы почти линейно.

После удаления из графа дуги d_1^* проводится конденсация графа, иллюстрация к которой приводится на рис. 3. Показано, что транзитивные дуги заменяются обобщенной дугой с минимальной параметричностью

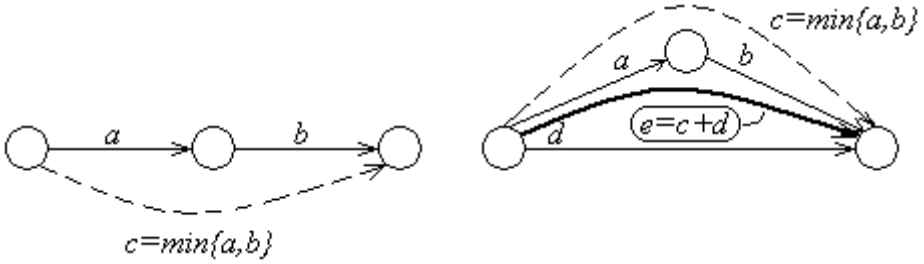

Рис. 3. Иллюстрация к конденсации графа

(показана пунктиром). Этот процесс мы называем стягиванием. После стягивания могут появиться «параллельные» дуги, т.е. возникает тенденция перехода к рассмотрению мультиграфа. Но мы отказываемся от этого и заменяем две «параллельные» дуги на одну обобщенную с суммарной параметричностью $e = \min\{a,b\} + d$.

В таком виде конденсация графа отвечает цели анализа (построения оптимального расчетного модуля с возможностью параллельного процессирования). Другие цели анализа порождают не только иной алгоритм конденсации, но и другие принципы пролонгирования сложности. Так, например, иначе устроен пролонгатор для оценки вычислительной сложности циклических алгоритмов с шаговыми циклами. Разработан также пролонгатор для оценки вычислительной сложности итерационных алгоритмов линейной алгебры. Данные оценки принципиально согласуются с выводами, полученными в теории вычислений совсем другим путем. Оценивание сложности алгоритмов может проводиться как с учетом распараллеливания, так и без него.

В настоящее время ведется работа по отысканию Парето-оптимальных областей с использованием критерия предпочтительности (2) и пролонгатора (3).

Вычисление критериев (2), (3) оформлено в виде программы на языке Visual C++, имеющей дружественный, графический интерфейс. Протокол осуществления разрывов записывается в HTML-файл, удобный для просмотра.

Литература

1. Островский Г.М., Волин Ю.М. Моделирование сложных химико-технологических схем. – М.: Химия, 1975. – 311 с.
2. Толстых С.С., Чаузов А.Г. Метод структурного анализа больших систем //Деп. в ВИНИТИ редколлегией журнала «Известия АН СССР. Техническая кибернетика». – 1985. – № 6581–85. – 36 с.
3. Толстых С.С., Толстых Т.Н. Эвристический алгоритм построения функций структурной сложности //Вестник ТГТУ. Тамбов, 1996. Т.1, № 1–2.
4. Толстых С.С. Матричный критерий сложности замкнутых систем //Вестник ТГТУ. Тамбов, 1998. Т. 4, № 2–3.
5. Толстых Т.Н., Толстых С.С. Структурный анализ в региональной экономике. – Воронеж: «Истоки», 1998. – 68 с.