Параллельный алгоритм разделения сеточного графа на домены

В.Н. Берцун

Томский государственный университет, Томск

Для решения прикладных задач на сеточных графах большой размерности с помощью многопроцессорных вычислительных систем часто используют декомпозицию расчетной области, в результате которой граф разделяется на домены (подграфы, части сетки). Это связано с необходимостью сбалансирования нагрузки для выделенных q процессоров или хранения многомерных сеток.

Объем передачи данных между процессорами зависит от числа ребер (веса сечения), соединяющих вершины, принадлежащие разным доменам, распределенным по процессорам. Для разделения графов используются следующие геометрические методы [1, 2]: покоординатное разбиение, рекурсивный инерционный метод деления пополам, деление сети с использованием кривых Пеано. Эти методы основываются на координатной информации об узлах графа и поэтому не оптимизируют связи между доменами. Разделение графа методом спектральной бисекции [3] предполагает, что каждой i-той вершине простого связного графа G_n ставится в соответствие компонента x_i вектора $\overline{x}$, равная +1 или –1, таким образом, что

$$\sum_{i=1}^{n} x_i = 0, \quad \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = n. \tag{1}$$

При этих ограничениях минимизируется квадратичная форма

$$(L(G_n)\overline{x}, \overline{x}) = \sum_{(i,k)\in E} (x_i - x_k)^2, \tag{2}$$

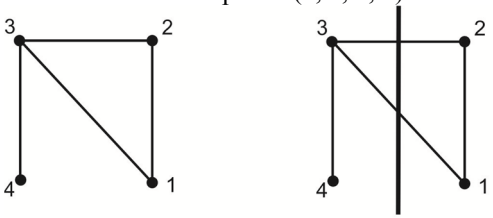
где $L=A–V$, V– нулевая матрица, содержащая на главной диагонали степени v_i вершин графа G_n, A – матрица смежности графа, L – симметричная матрица Лапласа с элементами

$$l_{ij} = \begin{cases} 1, \text{ если вершины } x_i \text{ и } x_j \text{ смежны,} \\ 0, \text{ если } i \neq j \text{ и вершины } x_i \text{ и } x_j \text{ не смежны,} \\ -v_i, \text{ если } i = j;\ i, j = \overline{1,n}. \end{cases}$$

Приближенное решение задачи (1)–(2) сводится к определению собственного вектора Фидлера $\overline{F}$, соответствующего максимальному ненулевому собственному значению λ_2 матрицы Лапласа L, затем координаты $\overline{F}$ отображаются на множество вершин графа V. Этот метод минимизирует суммарный вес ребер, соединяющих вершины из двух разных доменов V_1, V_2. При этом для четных n

$$V_1 \cup V_2 = \varnothing,\ n_1 + n_2 = n,\ |V_1| = |V_2|.$$

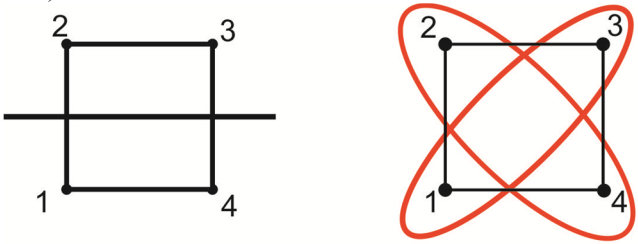
Например, для графа из рис. 1a вектор $\overline{F} = (-0.408, -0.408, 0, 0.816)$, а порядок номеров вершин соответствует компонентам вектора V= (1, 2, 3, 4).



a b

Рис. 1. Разделение графа на два домена для n=4

Используя этот вектор, можно распределить вершины графа в два домена V_1, V_2 так, что $d = n_1 / n_2$, $V_1 \cup V_2 = \varnothing$, $n_1 + n_2 = n$. Для d=1 такое разделение графа представлено на рис.1b, что соответствует оптимальному разбиению графа на два домена с двумя связями. Для простого цикла C_4 на рис. 2a представлено оптимальное разделение графа (λ_2=−2), а на рис.2b – не оптимальное (λ_4= −4).



a b

Рис. 2. Разделение графа на домены a – λ_2= −2; b – λ_4= −4

Как следует из этих рисунков, во втором случае два домена связаны уже не двумя, а четырьмя связями. Таким образом, вектор $\overline{F}$ действительно минимизирует связи между доменами [4, 5]. Используя алгоритм рекурсивной бисекции (*RSB*), граф можно последовательно разделить и на произвольное четное число частей.

Собственное значение λ_2 (или спектр R матрицы L) можно вычислить по ее характеристическому многочлену. Рассмотрим один из параллельных алгоритмов для нахождения коэффициентов характеристического многочлена матрицы Лапласа:

$$P_L(\lambda) = \det(L - \lambda E) = (-1)^n[\lambda^n + c_1\lambda^{n-1} + ... + c_n], \; n >> 1. \qquad (3)$$

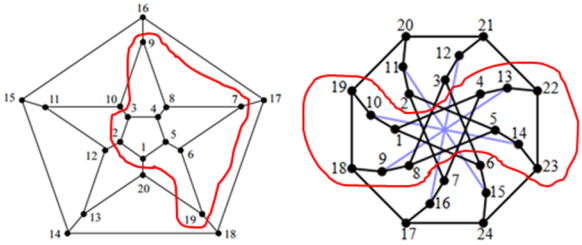
Такой многочлен можно построить методом Леверье, используя понятие следа *Sp*L матрицы L [6]. Если $R = [\lambda_i, \; i = \overline{1,n}\;]$ – спектр этой матрицы, то λ_i^k являются собственными значениями матрицы L^k. Обозначим

$$S_k = \lambda_1{}^k + \lambda_2{}^k + ... + \lambda_n{}^k = SpL^k \;,$$

тогда при $1 \le k \le n$ коэффициенты c_k, $k = \overline{1,n}$ характеристического многочлена (3) определяются по формуле

$$c_k = -\frac{1}{k}\left(S_k + c_1 S_{k-1} + c_2 S_{k-2} + ... + c_{k-1} S_1\right), \;\; S_k = 0, \text{ если } k \le 0.$$

Сложность этого алгоритма $O(n^4)$, а вычисление степеней и следов матрицы L для $n>>1$ осуществляется в параллельном режиме [2, 7].



a b

Рис.3. Разделение графа на два домена (a – граф G20, b – граф G24)

Определив коэффициенты характеристического многочлена и границы его спектра R по теореме Гершгорина, используем параллельный алгоритм сплайновой интерполяции для определения λ_2 и параллельный алгоритм для определения вектора Фидлера. В

качестве примера рассмотрим регулярные графы додекаэдра G_{20} и Макджи G_{24}, для которых оптимальное разделение на два домена представлено на рис.3.

Так как матрица Лапласа симметрична, то для решения полной проблемы собственных значений можно использовать параллельный метод вращений или метод Ланцоша приведения матрицы к трехдиагональной форме [8]. Если граф G_n является регулярным, то спектр R матрицы L можно вычислить по спектру матрицы смежности A.

Литература

1. *Волков К.Н.* Балансировка нагрузки процессоров при решении краевых задач механики жидкости и газа сеточными методами // Вычислительные методы и программирование. 2012. Т.13. С.107–129.
2. *Гергель В.П.* Высокопроизводительные вычисления для многопроцессорных многоядерных систем. М.: МГУ, 2010. 544 с.
3. *Fiedler M.* Eigenvectors of acyclic matrices // Czechoslovak Mathematical Journal. 1975. V.25(100). P. 607–618.
4. *Якобовский М.В.* Обработка сеточных данных на распределенных вычислительных системах // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 2. С.40–53.
5. *Берцун В.Н.* Математическое моделирование на графах. Ч. 2. Томск: Изд–во Том. ун–та, 2013. 86 с.
6. *Березин И.С., Жидков Н.П.* Методы вычислений. М., 1959. Т. 2. 620 с.
7. *Старченко А.В., Берцун В.Н.* Методы параллельных вычислений. Томск: Изд-во Том. ун-та, 2013. 223 с.
8. *Квасов Б.И.* Численные методы анализа и линейной алгебры. Ч. 2: Линейная алгебра. Новосибирск, 2009. 132 с.