

Effective Domain Decomposition Methods for Adaptive Unstructured Grids Applied to High Performance Computing for Problems in Computational Aerodynamics

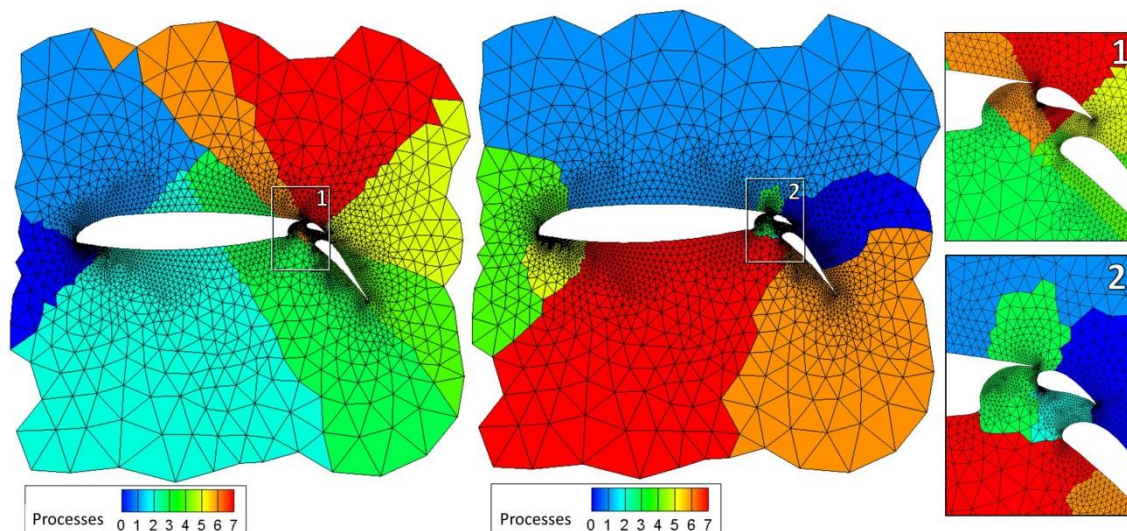
A.L. Zheleznyakova

*A.Yu. Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics Russian Academy of Sciences,
119526, Moscow, Russia
a.zheleznyakova@mail.ru*

Abstract

Modern domain decomposition methods in high performance aerodynamics simulations are investigated. Effective decomposition algorithms for adaptive unstructured grids based on geometric and graph representations are implemented. Geometric techniques (such as recursive coordinate bisection, recursive inertial bisection and space-filling curve methods), combinatorial approaches (which include leveled nested dissection, Kernighan-Lin and Fiduccia-Mattheyses algorithm), spectral methods, multilevel schemes are considered. A set of quality criteria for optimal mesh decomposition like load balancing, number of edges cut, the provision of connectivity of the subdomains, run time, the degree of parallelizability are discussed. Some test cases are considered to examine of the quantitative and qualitative characteristics of the traditional domain decomposition techniques and combined schemes.

Keywords: high performance computing, numerical simulation, computational aerodynamics, software systems, unstructured mesh, multiprocessor simulation, graph decomposition, data decomposition



Example of the unstructured mesh partitioning with recursive inertial bisection (left) and by using the multilevel algorithm (right)

УДК 533.6+519.6+519.178

Эффективные методы декомпозиции неструктурированных адаптивных сеток для высокопроизводительных расчетов при решении задач вычислительной аэродинамики

А.Л. Железнякова

*Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук,
119526, Москва, проспект Вернадского, 101-1
a.zheleznyakova@mail.ru*

Аннотация

Проведено исследование современных методов декомпозиции неструктурированных адаптивных сеток для организации параллельных вычислений на многопроцессорных системах при решении актуальных задач газовой динамики и аэродинамики. Изучены и реализованы эффективные алгоритмы оптимального разбиения расчетных сеток, строящиеся на основе геометрических и графовых моделей. Рассматриваются геометрические способы декомпозиции, которые используют принципы координатной или моментной рекурсивной бисекции, либо применяют заполняющие пространство кривые; комбинаторные подходы, такие как метод деления с учетом связности, алгоритм Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса; класс спектральных методов; многоуровневые (иерархические) технологии. Обсуждается ряд критериев разбиения: сбалансированность, количество коммуникационных связей между доменами, обеспечение связности каждой из подобластей, время выполнения алгоритмов, способность к распараллеливанию. Проведена качественная и количественная оценка эффективности исследованных классических технологий декомпозиции, а также комбинированных методов на ряде тестовых задач.

Ключевые слова: высокопроизводительные вычисления, математическое моделирование, вычислительная аэродинамика, программные комплексы, неструктурированные сетки, декомпозиция графов, декомпозиция данных

1. Введение

Организация параллельных вычислений при решении актуальных задач газовой динамики и аэродинамики требует решения целого ряда специфических проблем, среди которых балансировка работы процессоров, обеспечивающая их равномерную загрузку и минимизация межпроцессорных обменов. Последняя проблема наиболее актуальна для массивно-параллельных (Massively Parallel Processing) MPP-компьютеров с распределенной памятью. Несмотря на то, что для данного класса систем скорость межпроцессорного взаимодействия намного меньше скорости локальной обработки данных процессорами, в области вычислительной газовой динамики MPP-архитектура получила наиболее широкое распространение благодаря свойственным ей преимуществам. По сравнению с альтернативными SMP-компьютерами с общей памятью, имеющими жесткие ограничения по числу процессоров, современные MPP-системы могут объединять десятки тысяч микропроцессоров. Создание алгоритмов, масштабируемых на большое число вычислительных модулей, и разработка реализующей их параллельной программы очень сложная задача. Для систем с распределенной памятью необходимо учитывать, что при наращивании числа процессоров наступает момент, когда эффективность параллельных вычислений начинает резко снижаться, из-за

того, что временные затраты на обмен данными превосходят время вычислений. Предельное число вычислительных модулей определяется сущностью алгоритма и размерностью задачи (значительное число алгоритмов просто невозможно эффективно распараллелить). При распараллеливании задач вычислительной газовой динамики целесообразно применять традиционный метод геометрического параллелизма. Технология предполагает декомпозицию расчетной сетки на множество подобластей с их последующим распределением между процессорами. После этого отдельный вычислительный модуль выполняет расчет для соответствующей ему подобласти и на каждом временном шаге обменивается данными с процессорами, контролирующими соседние домены. Следовательно, для эффективного распараллеливания необходимо не только равномерно распределять вычислительную нагрузку (количество ячеек или узлов, приходящихся на каждую область), но и минимизировать число элементов сетки, определяющих границы каждой подобласти и участвующих в передаче данных. Использование алгоритмов, ориентированных на неструктурированные сетки, усложняет процесс адаптации исходных последовательных кодов к архитектуре высокопроизводительных многопроцессорных систем. Задача разбиения структурированных сеток решается значительно проще, чем нерегулярных. Однако применение последних предпочтительнее ввиду исключительной сложности реалистичных геометрических моделей и необходимости в максимально сжатые сроки рассматривать множество вариантов компоновок и конструкций.

Оптимальная декомпозиция нерегулярной расчетной сетки для высокопроизводительных вычислений на многопроцессорных системах с распределенной памятью предполагает разделение сетки между процессорами таким образом, чтобы каждому из процессоров выделялось примерно равное число элементов, а межпроцессорные коммуникации, необходимые для выполнения информационного обмена между соседними элементами, были минимальными. Задачи обработки данных, в которых используются двумерные или трехмерные сетки для аппроксимации расчетной области, могут быть сведены к проблеме оптимального разделения графа, часто встречающейся при проведении параллельных вычислений в различных научных исследованиях.

Для представления сеточной модели в виде неориентированного графа каждому элементу ставится в соответствие вершина графа, а дуги графа отражают свойства близости элементов. На рис. 1 приведен пример графов для двух моделей вычислений, используемых в механике сплошной среды, в которых значения переменных рассчитываются в узлах сетки (рис. 1, б) и центрах ячеек (рис. 1, в) соответственно. В первом случае (рис. 1, б) узлы сетки совпадают с вершинами графа, а его дуги с соответствующими ребрами. Следовательно, сеточная модель полностью соответствует модели вычислений. В случае, когда параметры задачи определяются в центрах ячеек (рис. 1, в), вершина графа отображает расчетный элемент, а дуги соединяют вершины, если соответствующие элементы имеют общее ребро (в 2D пространстве) или грань (в трехмерном случае). Данный граф является двойственным по отношению к конечно-элементной сетке (рис. 1, а). Двойственный граф отображает соседство элементов. Такое представление позволяет решить вопросы хранения обрабатываемых данных и предоставляет возможность применения типовых алгоритмов теории графов.

Разбиение вершин графа на N_p непересекающихся подобластей может использоваться для распределения вершин или элементов расчетной сетки по N_p процессорам. Оптимальная декомпозиция графа состоит в уравнивании числа вершин каждого подмножества и минимизации числа ребер соединяющих вершины разных подобластей (так называемых разрезанных ребер). Выполнение данных условий обеспечивает балансировку вычислительной нагрузки и минимизацию коммуникационной нагрузки соответственно.

На рис. 2, справа в виде графа, разделенного на три части, представлена модель параллельных вычислений на двумерной неструктурированной сетке размерностью $E = 114$ треугольных элементов (рис. 2, слева). Граф отражает структурные и коммуникационные

свойства исходной расчетной сетки. Элементы поровну распределены между тремя процессами (назовем их B, G, R) следующим образом: $E_B = E_G = E_R = 38$. В ходе расчетов процессор соответствующий домену B будет посылать параметры для ячеек 30, 13, 26, 18, 37 процессору, контролирующему подобласть R и данные, соответствующие ячейкам 80, 84, 102 процессору G . С другой стороны R передает информацию из ячеек 100, 85, 61, 2, 17 процессору B и данные из 17, 87, 77, 91 процессу G , который отсылает параметры в ячейках 70, 50, 10 для B и элементах 36, 67, 112, 110 для R . Таким образом, общее число односторонних коммуникационных взаимодействий, осуществляемых в процессе параллельных вычислений равно 24, что соответствует двенадцати информационным связям (разрезанным ребрам), выделенным красным цветом (рис. 2, справа).

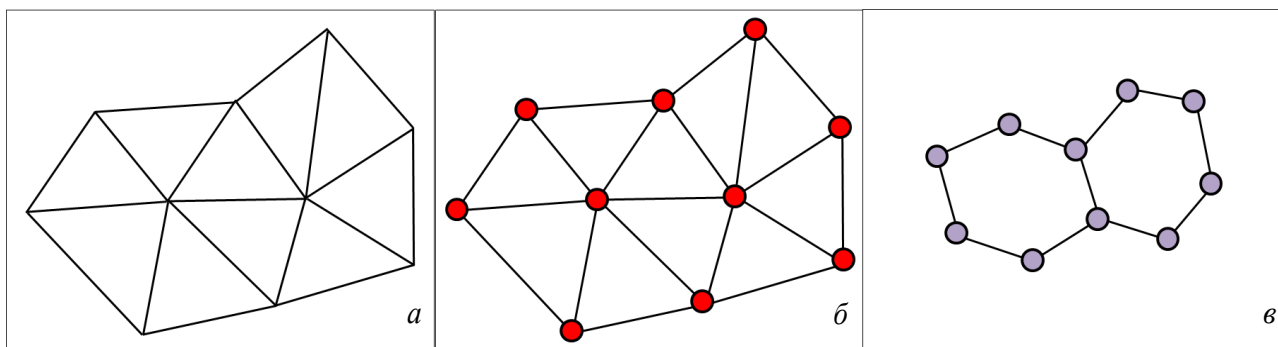


Рис.1. Треугольная неструктурированная расчетная сетка (а) и соответствующие ей графы (б, в). Граф, описывающий модель вычислений параметров задачи в узлах сетки (б). Граф, соответствующий модели, когда независимые переменные определяются в центрах ячеек

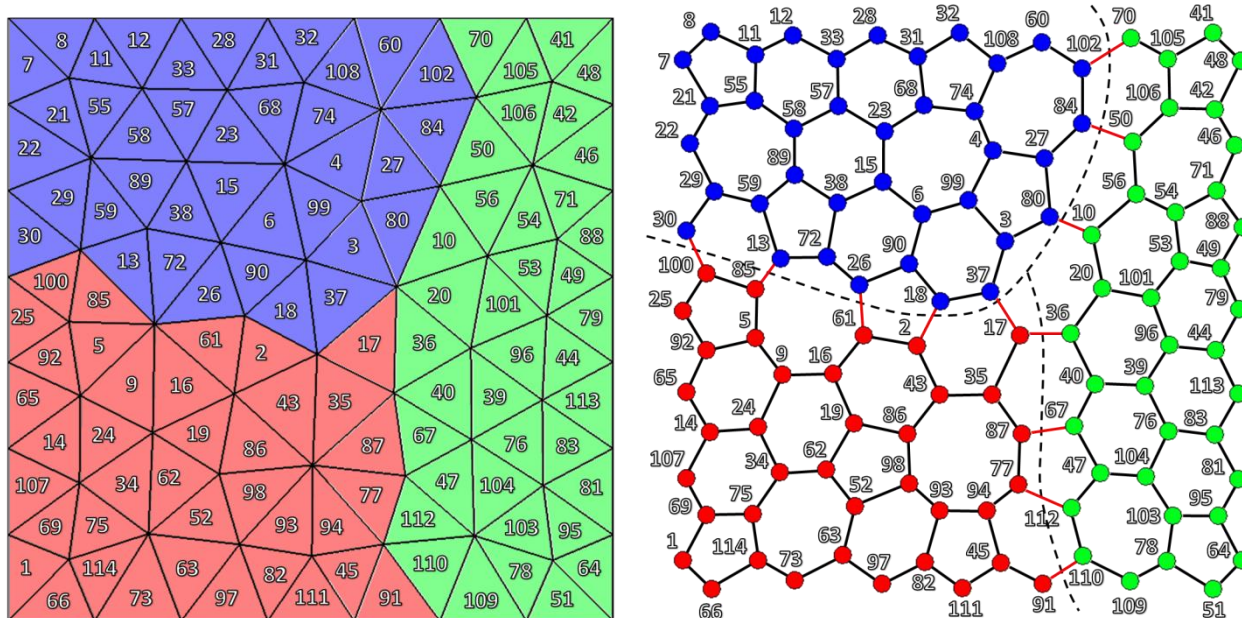


Рис.2. Графовое представление модели параллельных вычислений на неструктурированной треугольной сетке для трех процессов B, G, R (области закрашены соответствующими цветами – синим, зеленым и красным)

Проблема деления сеточной модели на неравные части, возникающая при применении гетерогенных вычислительных систем, также может быть эффективно решена с использованием графового представления.

Полный перебор вариантов разбиения для больших сеток неприменим на практике из-за неприемлемых затрат времени. В результате, для решения задачи оптимального разбиения разработаны различные эвристические подходы [1], которые классифицируются как геометрические [2–10], комбинаторные [11–21], алгоритмы спектрального деления [22–35], многоуровневые методы [36–44].

2. Геометрические методы декомпозиции

Геометрические методы декомпозиции [2–10] основываются на информации о координатах узлов или центров ячеек расчетной сетки без учета связности между ее структурными элементами. Рассматриваемый класс подходов не использует графовую модель вычислений и понятия разрезанных ребер для сведения к минимуму межпроцессорных обменов в ходе параллельной обработки данных. Вместо этого напрямую минимизируется число ребер (в 2D пространстве) или граней (в трехмерном случае) исходной расчетной сетки, которые располагаются на границах смежных подобластей, принадлежащих разным процессорам, что приводит к сокращению протяженности границ каждого домена. Несмотря на то, что геометрическая декомпозиция сетки требует относительно небольших временных затрат, данный подход, как правило, используется для создания разбиений, невысокого качества, и значительно уступает методикам учитывающим межэлементные связи.

2.1. Рекурсивная координатная бисекция

К геометрическим методам относится алгоритм рекурсивной координатной бисекции. Подход основан на рекурсивном разбиении расчетной сетки с минимизацией протяженности границ между подобластями, посредством половинного деления исходной области, а затем ее потомков [2]. Декомпозиция проводится по наиболее длинной стороне домена, по линии перпендикулярной одной из координатных осей. Работа алгоритма проиллюстрирована на рис. 3.

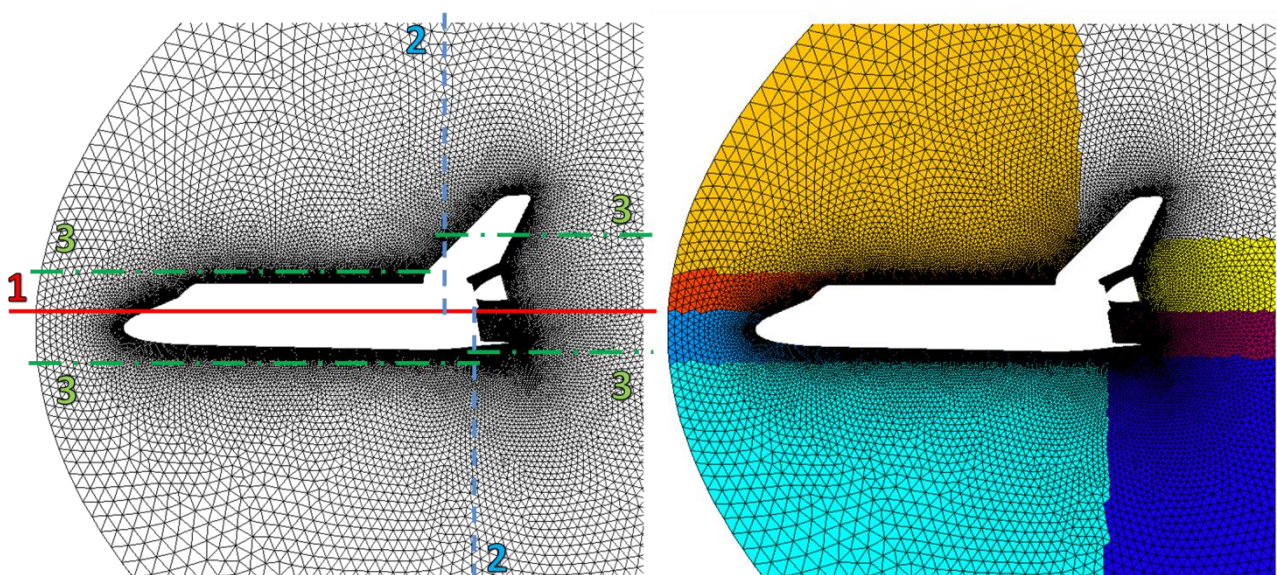


Рис.3. Этапы геометрической декомпозиции адаптивной двумерной расчетной сетки около орбитального корабля Space Shuttle на восемь подобластей

Алгоритм включает следующие этапы:

- 1) Вычисляются центры масс расчетных элементов и проецируются на координатную ось, вдоль которой размерность сетки максимальна (последнее условие обеспечивает минимизацию протяженности границ между подобластями).
- 2) Упорядоченный список элементов делится поровну.
- 3) Алгоритм рекурсивного разбиения применяется к каждой подобласти нужное число раз.

Несмотря на то, что декомпозиция по представленной схеме выполняется очень быстро и требует минимальных затрат памяти, полученное разбиение обладает невысоким качеством. Кроме этого для сложной геометрии в процессе деления возможно возникновение доменов, состоящих из изолированных подобластей [3]. На рис. 4 приводится такой случай, когда в процессе бисекции образуется изолированная подобласть (обведена красным цветом).

Метод имеет существенное ограничение в том, что разделение проводится строго перпендикулярно одной из координатных осей. Для многих случаев это приводит к далеко не оптимальному разбиению с границами большой протяженности между областями.

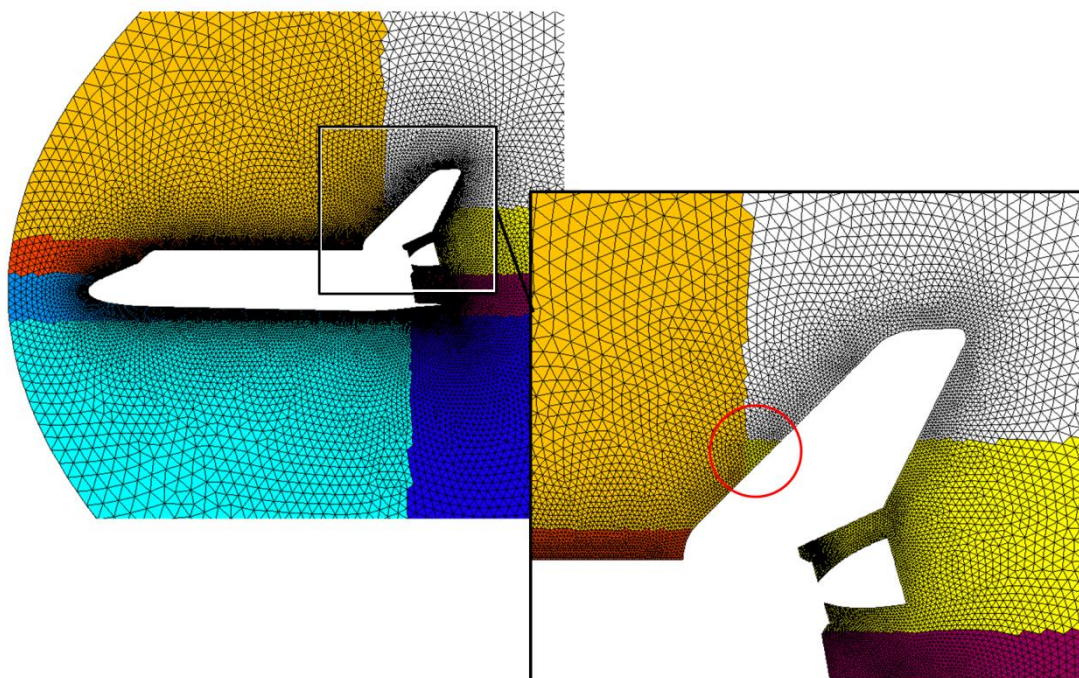


Рис.4. Образование изолированной подобласти на третьем этапе разбиения методом рекурсивной координатной бисекции (см. рис. 3, слева)

2.2. Рекурсивная инерционная бисекция

Рекурсивная инерционная бисекция является развитием предыдущего метода и позволяет проводить разбиение вдоль линий ориентированных под произвольным углом к координатным осям [4]. В данном подходе каждый элемент расчетной сетки рассматривается как точечная масса и определяется инерционная ось всей системы точечных масс. Декомпозиция по линии перпендикулярной оси инерции, как правило, приводит к образованию не протяженной границы между доменами. В ходе выполнения алгоритма инерционной бисекции, по аналогии с предыдущим методом, центры масс элементов проецируются на инерционную ось. Затем их упорядоченное множество разбивается на две равные части. Далее проводится рекурсивное деление подобластей нужное число раз. На рис. 5 представлен пример разбиения расчетной сетки, выполненного с использованием рекурсивной инерционной бисекции.

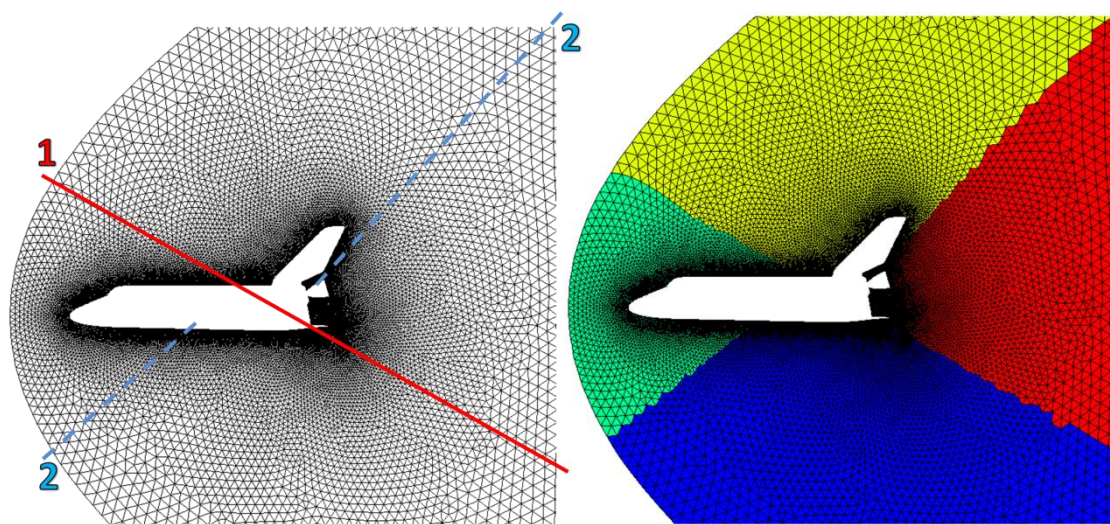


Рис.5. Этапы декомпозиции адаптивной двумерной расчетной сетки около орбитального корабля Space Shuttle на четыре домена с использованием алгоритма рекурсивной инерционной бисекции

2.3. Декомпозиция с использованием заполняющих пространство кривых

Алгоритмы, основанные на координатной или моментной рекурсивной бисекции, распределяют упорядоченные ячейки поровну между подобластями. Упорядочивание элементов расчетной сетки вдоль выделенного направления проводится посредством их проецирования на координатную или моментную оси.

Качество разбиения можно значительно улучшить, если проводить упорядочивание элементов в более чем одном измерении с использованием непрерывных кривых, которые полностью заполняют многомерное пространство (например, кривая Гильберта). Эти фрактальные [8] математические объекты обладают замечательными свойствами, благодаря которым они нашли широкое применение в научных вычислениях и могут использоваться для упорядочивания неструктурированных данных в 2D и 3D пространстве. Такие кривые представляют собой непрерывные функции, по сути отображающие многомерное (2D или 3D) пространство в одномерное. Кривая Гильберта – это непрерывная, фрактально заполняющая квадрат или куб кривая, которая строится с использованием рекурсии (рис. 6). Ее дискретное представление определяется уровнем рекурсии [9] и применяется для индексации расчетных элементов (присвоения индекса каждому элементу расчетной сетки в определенном порядке). В трехмерном случае заполняющая пространство кривая Гильберта обеспечивает упорядоченную нумерацию расчетной сетки размерностью 2^{3p} , где p глубина рекурсии, в которую вкладывается расчетная область. Расчетному элементу присваивается индекс квадрата или куба, в котором оказался его центр масс [5, 6].

На рис. 7 представлена неструктурированная расчетная сетка для упрощенной модели гиперзвукового прямоточного воздушно-реактивного двигателя (слева) и упорядоченное с использованием кривой Гильберта множество ее узлов (справа) [9]. В дальнейшем список упорядоченных элементов используется для разбиения сетки на нужное число подобластей. При этом полученная последовательность элементов сетки обладает нужными характеристиками: ячейки близко расположенные в пространстве расчетной области имеют близкие номера индексов в списке. Алгоритмы, основанные на декомпозиции с использованием заполняющих пространство кривых, очень быстрые, а разбиения, полученные в ходе их работы, превосходят по качеству координатную и моментную бисекцию. Рис. 8 иллюстрирует применение метода декомпозиции, использующего кривую Гильберта, для разбиения множества узлов треугольной сетки около аэродинамического профиля на пять подобластей [10].

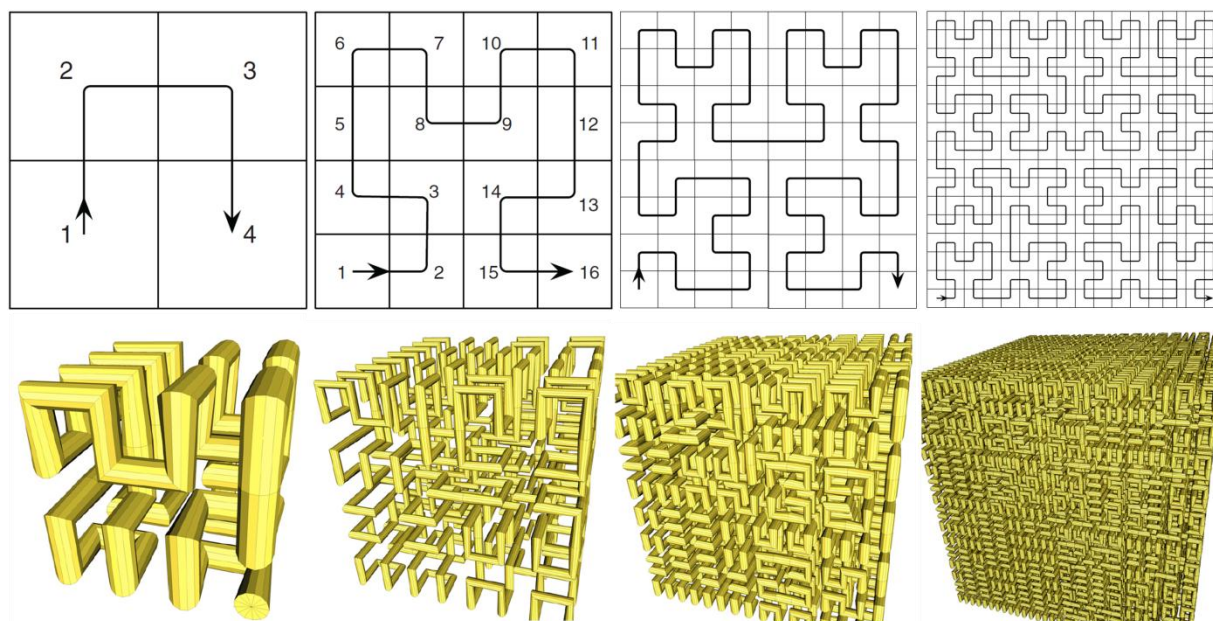


Рис.6. Представление кривой Гильберта в двумерном (вверху) и трехмерном (внизу) пространстве после выполнения определенного числа рекурсий [9]. Глубина рекурсии двумерной кривой, заполняющей квадрат (слева направо) 1, 2, 3, 4. Глубина рекурсии пространственной кривой, заполняющей куб (слева направо) 2, 3, 4, 5

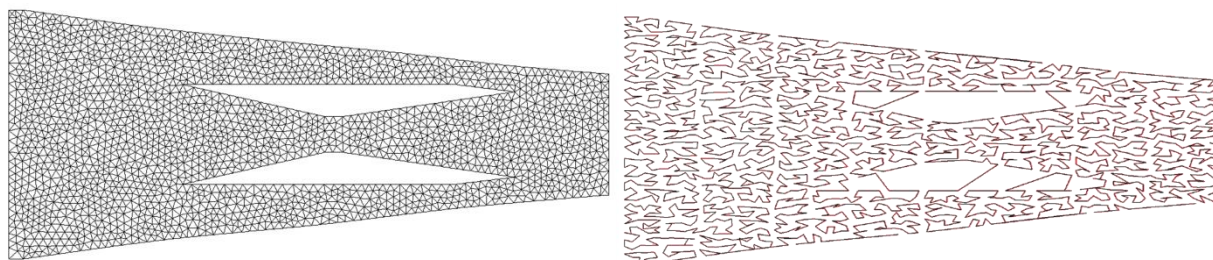


Рис.7. Неструктурированная сетка около двумерной модели гиперзвукового прямоточного воздушно-реактивного двигателя (слева). Упорядоченное представление соответствующих вершин расчетной сетки с использованием кривой Гильберта [9]

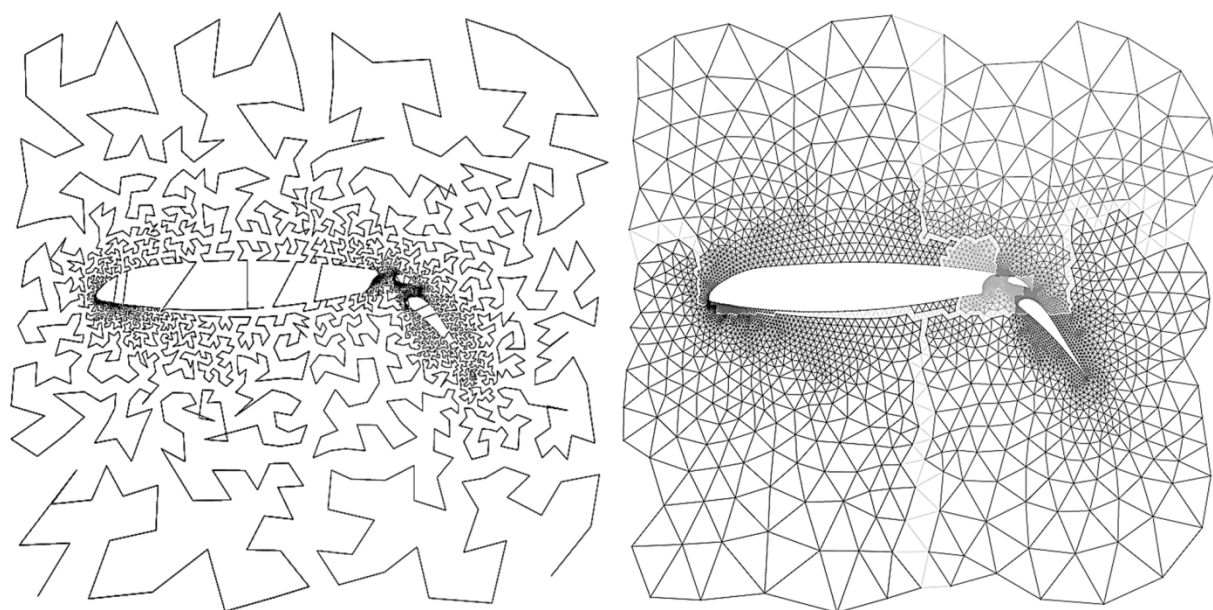


Рис.8. Разбиение адаптивной двумерной расчетной сетки около аэродинамического профиля на пять доменов с использованием кривой Гильберта [10]

3. Комбинаторные методы

Группа комбинаторных методов декомпозиции [11–21], к которым относятся жадный алгоритм, подходы Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса, основывается на использовании информации о связях между структурными элементами сетки, в независимости от их взаимного расположения в пространстве расчетной области. По этой причине разбиение, полученное с использованием данного класса подходов, характеризуется минимальной протяженностью границ доменов (минимальным числом разрезанных ребер или информационных связей между частями разбиения) и небольшой вероятностью возникновения изолированных подобластей в отличие от геометрических методов. Недостатком алгоритмов, реализующих комбинаторные подходы, является их относительно медленное выполнение.

3.1. Алгоритм деления с учетом связности

Жадный алгоритм или алгоритм деления с учетом связности, относящийся к классу комбинаторных методов, основан на очевидном свойстве: при разбиении графа число разрезанных ребер будет минимальным, если смежные вершины (соединенные дугами) находятся в одной подобласти [14]. Выполнение алгоритма начинается с определения “стартового” узла – периферийной или псевдопериферийной вершины графа [18]. Термины “периферийная” и “псевдопериферийная” вершины определяются с использованием базовых понятий теории графов таких как “путь”, “эксцентриситет вершины” и “диаметр графа”. Эксцентриситет вершины V_i – это наибольшее расстояние между V_i и любым другим узлом графа. Расстояние между двумя узлами графа V_i и V_j определяется как наименьшая длина пути (V_i, \dots, V_j) . Путем длины l называется упорядоченное множество попарно различных вершин (V_1, V_2, \dots, V_l) , для которого вершины V_i и V_{i+1} – смежные. Путь можно также рассматривать как упорядоченное множество l ребер (V_1, V_2) , (V_2, V_3) , ..., (V_{l-1}, V_l) . Наибольшее значение эксцентриситета по всем вершинам графа называется диаметром графа. Периферийная вершина – это вершина V_i , эксцентриситет которой равен диаметру графа. Псевдопериферийной вершиной называется вершина с большим, близким к диаметру графа эксцентриситетом.

Рис. 9. поясняет работу жадного алгоритма [1], который состоит из нескольких этапов: сначала определяется начальная подобласть, содержащая один единственный элемент – “стартовый” узел (периферийная или псевдопериферийная вершина графа), которому присваивается номер 0. Выбор периферийной вершины, в качестве стартовой, был бы идеальным, но, к сожалению, достаточно эффективные алгоритмы для отыскания периферийных частиц неизвестны. С другой стороны, существуют хорошие методы, позволяющие находить псевдопериферийные вершины [18]. Далее подобласть расширяется путем включения узлов смежных с “нулевой” вершиной. Новым узлам присваиваются значения 1. На каждом последующем шаге домен дополняется новыми узлами, смежными с вершинами, добавленными на предыдущей итерации. Процесс продолжается до тех пор, пока не будет пронумерована половина всех вершин графа. Сплошная линия на рис. 9 показывает результат бисекции графа, выполненной с использованием жадного алгоритма.

Как правило, декомпозиция с учетом связности демонстрирует сопоставимое или лучшее качество разбиения по сравнению с геометрическими подходами. Однако метод деления с учетом связности не является достаточно надежным и не гарантирует создания оптимального разбиения. Как видно из рис. 9, полученный результат далек от оптимального по числу коммуникационных связей (лучшее решение показано штриховой линией).

Задача эффективного разбиения с учетом связности значительно усложняется для многосвязных областей. Кроме того для получения разбиения, близкого к оптимальному, необходимо проводить несколько запусков алгоритма с использованием различных началь-

ных вершин и выбирать наиболее рациональный результат. Модификации метода, повышающие его эффективность, предложены в [11, 15, 19, 20].

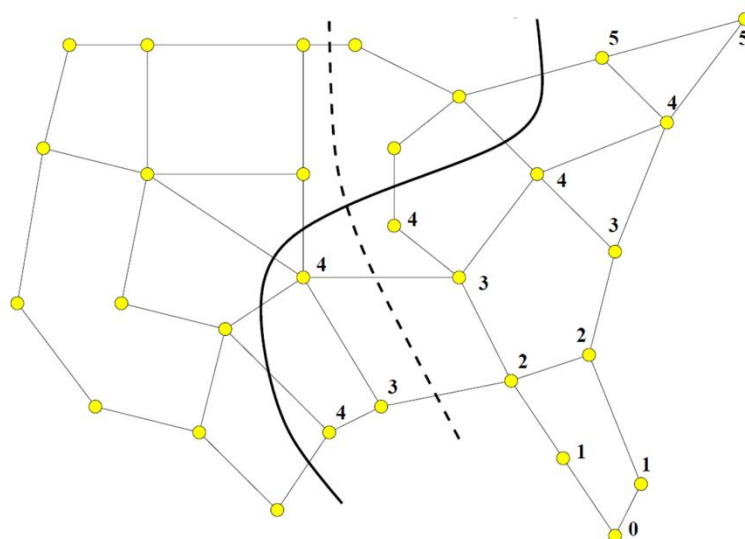


Рис.9. Декомпозиция графа с использованием жадного алгоритма [1]. Сплошная линия – результат работы алгоритма. Штриховая линия – оптимальное разбиение

3.2. Алгоритм Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса

С задачей эффективной декомпозиции расчетной сетки или ее графового представления тесно связана проблема оптимизации исходного разбиения. Целью оптимизации является улучшение качества начального нерационального разбиения при сохранении баланса загрузки процессоров. По сути, хорошая схема оптимизации может успешно применяться для решения задач эффективной декомпозиции, если в качестве исходного использовать случайное разбиение.

В работе Кернигана и Лина [17] был предложен метод поэтапных преобразований подобластей *A* и *B* исходного разбиения, в ходе которых на каждом шаге достигается локально оптимальное решение, и в конечном итоге, могут быть получены два равновеликих домена с минимально возможным числом разрезанных ребер между ними. Алгоритм выполняется до тех пор, пока дальнейшее улучшение становится невозможным.

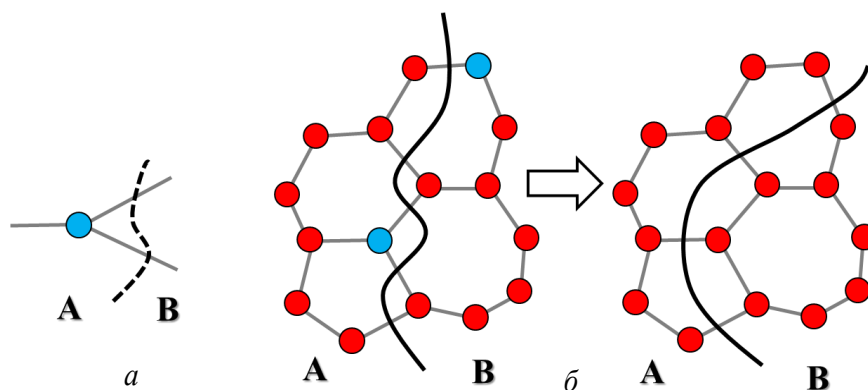


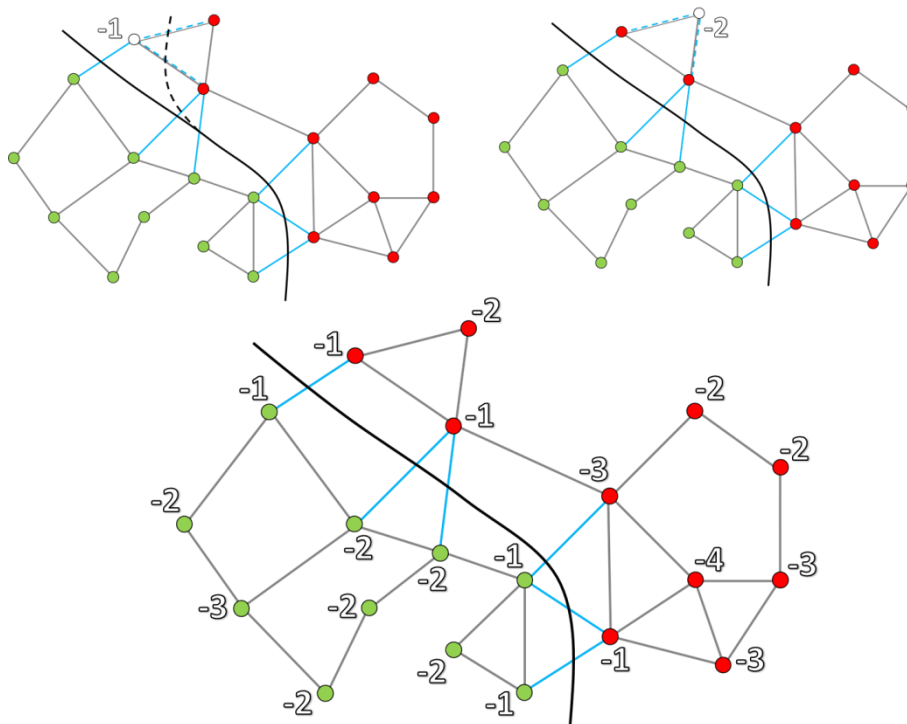
Рис.10. Узел, перемещение которого из подобласти *A* в подобласть *B* приведет к единичному выигрышу (*a*). Элементарный акт обмена вершинами между подобластями в ходе выполнения алгоритма Кернигана и Лина, улучшающий качество разбиения, путем уменьшения числа разрезанных ребер (*б*)

На каждой итерации между подобластями проводится обмен небольшим числом вершин. Пары частиц (по одной из A и B подобласти) перемещаются из одного домена в другой при условии, что будет достигнуто максимальное улучшение качества разбиения. Оптимальный выбор узлов осуществляется исходя из принципа получения “максимальной выгоды”. Перемещение узла из A в B считается “выгодным” если это преобразование уменьшит число информационных связей (рис. 10, a).

Для примера, представленного на рис. 10, a , так называемый “выигрыш” равен единице. Рис. 10, b иллюстрирует промежуточный этап работы алгоритма Кернигана и Лина.

Модификация рассмотренного алгоритма, позволяющая значительно сократить время его выполнения без существенного снижения эффективности, представлена в работе Фидуччи-Маттейсеса [13]. В подходе Фидуччи-Маттейсеса предлагается в процессе пошаговых преобразований перемещать одиночные узлы, вместо парных обменов, реализующих алгоритм Кернигана-Лина.

В ходе выполнения алгоритма Фидуччи-Маттейсеса для каждого домена (A и B) создается приоритетная очередь вершин, в порядке которой они будут перемещаться в соседнюю подобласть. Приоритет каждого узла (рис. 11) определяется числом (не обязательно положительным), на которое будет уменьшено количество разрезанных ребер при перемещении этого узла в соседнюю подобласть (по аналогии с “выигрышем”).



Число коммуникационных связей между подобластями: 6

Рис.11. Принцип расстановки приоритетов для вершин графа, принадлежащих двум подобластям

На каждом шаге работы алгоритма вершина, стоящая в начале первой или второй приоритетной очереди, перемещается в соседнюю подобласть. После каждой перестановки приоритет вершины и смежных с ней узлов обновляется. Чтобы баланс между числом вершин в подобластях сохранялся в ходе преобразований, узлы перемещаются попеременно, то из одного, то из другого домена (на промежуточных стадиях работы алгоритма Фидуччи-Маттейсеса допускается небольшой дисбаланс между числом узлов). Ход выполнения алгоритма показан на рис. 12.

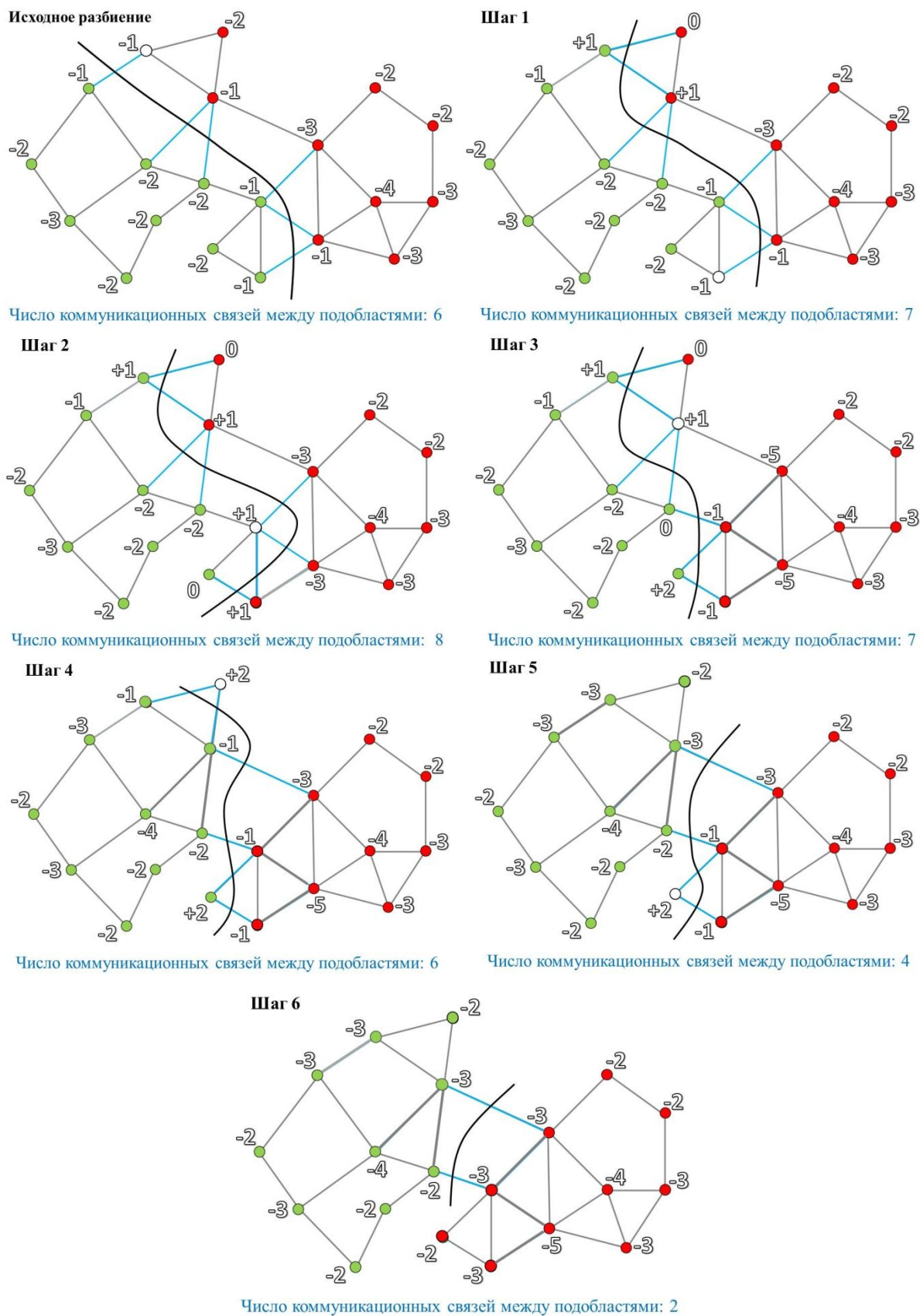


Рис.12. Пошаговая оптимизация исходного разбиения (зеленые и красные вершины), состоящего из двух подобластей, методом Фидуччи-Маттейсеса. Узлы, которые будут перемещены на следующей итерации, показаны в виде незакрашенных кружков. Цифрами обозначен приоритет вершин, рассчитываемый на каждом шаге

Исходная бисекция графа имеет шесть разрезанных ребер, которые соединяют вершины разных подобластей. Хотя представленное разбиение можно считать сбалансированным (каждая подобласть содержит по десять вершин), оно не является рациональным, так как число коммуникационных связей между доменами не минимально. На том же рисунке показаны приоритеты вершин, соответствующие данному разбиению. Поскольку все значения отрицательны, перестановка любой вершины приведет к увеличению числа разрезанных ребер. Следовательно, начальное разбиение представляет собой некоторый локальный минимум. Семейство методов типа Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса рассматривают на промежуточных этапах также варианты перегруппировок, приводящие к увеличению числа коммуникационных связей (рис. 12). Это свойство позволяет преодолеть локальный минимум и в конечном итоге найти оптимальное решение, уменьшив число разрезанных ребер с шести до двух.

Дальнейшие модификации алгоритмов типа Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса, представленные в [12, 16, 21] предлагают перемещать частицы не парами, а большими группами, что расширяет возможности и существенно повышает эффективность подходов.

4. Спектральные методы

Класс так называемых спектральных методов декомпозиции [22–29] предполагает принципиально новую формулировку задачи оптимального разбиения и использует свойства собственных значений и векторов дискретного оператора Лапласа (матрицы Кирхгофа или спектральной матрицы) данного графа. В ходе реализации алгоритма спектральной бисекции (половинного деления) для исходного графа определяются матрица смежности (**A**), матрица степеней вершин графа (**D**), дискретный оператор Лапласа (**L**).

Матрица смежности – это способ представления графа с множеством вершин V и множеством ребер E в виде квадратной двоичной матрицы (каждый элемент принимает одно из двух значений 0 или 1) с числом строк и столбцов равным числу вершин графа. Элементы A определяются следующим образом: $A_{i,j} = 1$, если вершины V_i и V_j связаны между собой ребром, в противном случае $A_{i,j} = 0$. На рис. 13 приведен пример графа (а) и его представление в виде матрицы смежности (б). Матрица вершин графа $D_{i,i}$ является диагональной, а значения ее элементов равны числу ребер, сходящихся в соответствующей вершине (рис. 13, в). Матрица Кирхгофа (рис. 13, г) вычисляется из соотношения [29]:

$$L = D - A, \tag{1}$$

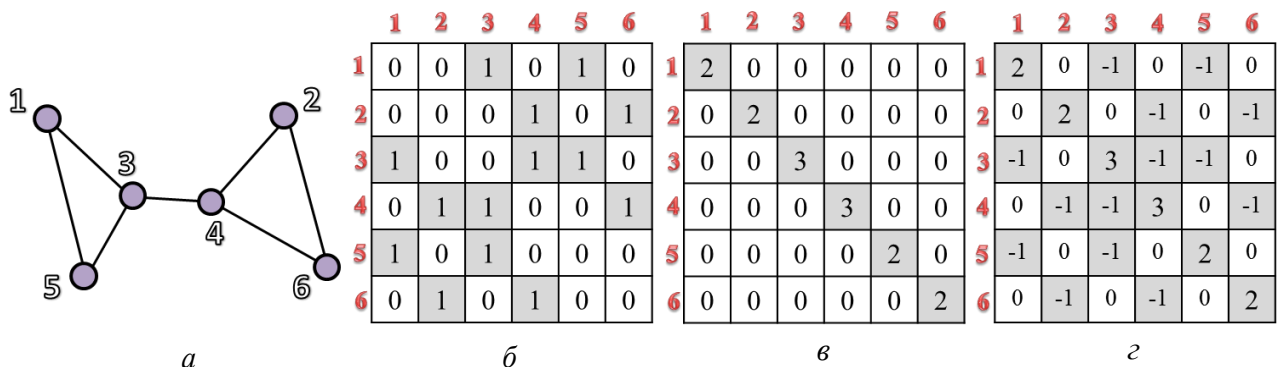


Рис.13. Граф (а) и соответствующие ему матрица смежности (б), диагональная матрица степеней вершин (в), дискретный оператор Лапласа (г)

Допустим, что симметричная квадратная матрица Кирхгофа **L** является матрицей квадратичной формы $Q(X)$, для которой в векторно-матричном виде справедливо соотношение [30]:

$$\mathbf{Q}(\mathbf{X}) = \mathbf{X}^T \mathbf{L} \mathbf{X}, \quad (2)$$

Рассмотрим V -мерный вектор $\mathbf{X} = (x_1, x_2, \dots, x_V)^T$, соответствующий вершинам графа, разделенного на две части (V число вершин). Компоненты вектора принимают значения ± 1 , причем $x_i = -1$, если узел принадлежит первой подобласти и $x_i = +1$, если узел относится ко второму домену. Для решения задачи оптимального разбиения графа необходимо выполнить два условия: обеспечить равномерную загрузку процессоров и минимизировать межпроцессорные обмены (максимально сократить число разрезанных ребер, соединяющих подобласти). Выполнение первого условия может гарантировать следующее соотношение:

$$\sum_{i=1}^V x_i = 0, \quad (3)$$

Кроме этого для рассматриваемого графа будет справедливо равенство:

$$\sum_{i=1}^V x_i^2 = V. \quad (4)$$

Количество информационных связей между областями (число разрезанных ребер) может быть рассчитано как:

$$E_{cut} = \frac{1}{4} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j, i \leftrightarrow j}}^V (x_i - x_j)^2. \quad (5)$$

Здесь знак “ \leftrightarrow ” означает смежность i -го и j -го узла (они соединены дугой). Действительно, если x_i и x_j имеют один знак (соответствующие вершины принадлежат одной подобласти), то квадрат разности под знаком суммы в (5) равен нулю, т.е. $(x_i - x_j)^2 = 0$, и ничего не вносит в общую сумму. Если же x_i и x_j имеют разные знаки (i -я и j -я вершины располагаются в разных доменах), то $(x_i - x_j)^2 = 4$. Соотношение (5) можно представить в виде:

$$\frac{1}{4} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j, i \leftrightarrow j}}^V (x_i - x_j)^2 = \frac{1}{4} \left[\sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j, i \leftrightarrow j}}^V (x_i^2 + x_j^2) - 2 \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j, i \leftrightarrow j}}^V x_i x_j \right]. \quad (6)$$

В соотношении (6) первая сумма в квадратных скобках – это каноническая квадратичная форма, соответствующая диагональной матрице \mathbf{D} . Вторая сумма также является квадратичной формой, которой соответствует матрица смежности \mathbf{A} . Используя векторно-матричную запись для квадратичных форм (2) с учетом (1) получаем:

$$\frac{1}{4} \left[\sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j, i \leftrightarrow j}}^V (x_i^2 + x_j^2) - 2 \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j, i \leftrightarrow j}}^V x_i x_j \right] = \frac{1}{4} [\mathbf{X}^T \mathbf{D} \mathbf{X} - \mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X}] = \frac{1}{4} \mathbf{X}^T \mathbf{L} \mathbf{X}. \quad (7)$$

Таким образом, задача оптимальной декомпозиции графа на две подобласти сводится к задаче минимизации квадратичной формы (2) с учетом ограничений (3) и (4).

Как отмечалось выше, построение алгоритма спектральной декомпозиции основано на использовании свойств собственных значений и векторов спектральной матрицы \mathbf{L} , которые могут быть определены из соотношения:

$$\mathbf{L} \mathbf{X} = \lambda \mathbf{X}. \quad (8)$$

Таким образом (7) можно переписать как:

$$\frac{1}{4} \mathbf{X}^T \mathbf{L} \mathbf{X} = \frac{1}{4} \mathbf{X}^T \lambda \mathbf{X}, \quad (9)$$

Следовательно, для минимизации числа разрезанных ребер необходимо, чтобы вектор \mathbf{X} соответствовал наименьшему собственному значению матрицы \mathbf{L} . Дискретный оператор Лапласа является положительно полуопределенным. Минимальное собственное значение \mathbf{L} равно нулю (спектральные свойства матрицы Кирхгофа подробно рассмотрены в [31, 32]. Соответствующий ему собственный вектор, состоящий из единиц, не удовлетворяет условию (3). Все остальные собственные значения для связного графа положительны. Таким образом, исходная задача сводится к нахождению второго минимального собственного значения и соответствующего ему собственного вектора, который называется вектором Фидлера [33, 34]. Собственный вектор матрицы Кирхгофа, соответствующий ее наименьшему нетривиальному собственному значению (вектор Фидлера) определяет связность графа (количество связей между вершинами).

Последующая реализация спектрального метода заключается в сортировке компонентов вектора Фидлера $\mathbf{X}' = (x'_1, x'_2, \dots, x'_V)^T$, соответствующих определенной вершине графа, в порядке возрастания. Для случая половинного деления выбирается некоторое значение M соответствующее медиане вектора (средний по величине элемент). Вершины, для которых $x'_i \leq M$ относятся к одной подобласти, а узлы, для которых $x'_i > M$ к другой. Для дальнейшего дробления полученных подобластей шаги повторяются в той же последовательности.

С использованием спектрального подхода можно получать гарантированно высокое качество декомпозиции (в том числе и для сложных многосвязных областей), однако метод является весьма затратным с точки зрения вычислительных ресурсов. По такому критерию, как число коммуникационных связей между доменами спектральное разбиение превосходит любые геометрические методы, что подтверждается в исследовании [35]. Примеры применения геометрического и спектрального способов декомпозиции для разбиения графа двойственного треугольной неструктурированной расчетной сетке около профиля крыла с механизацией [35] показаны на рис. 14.

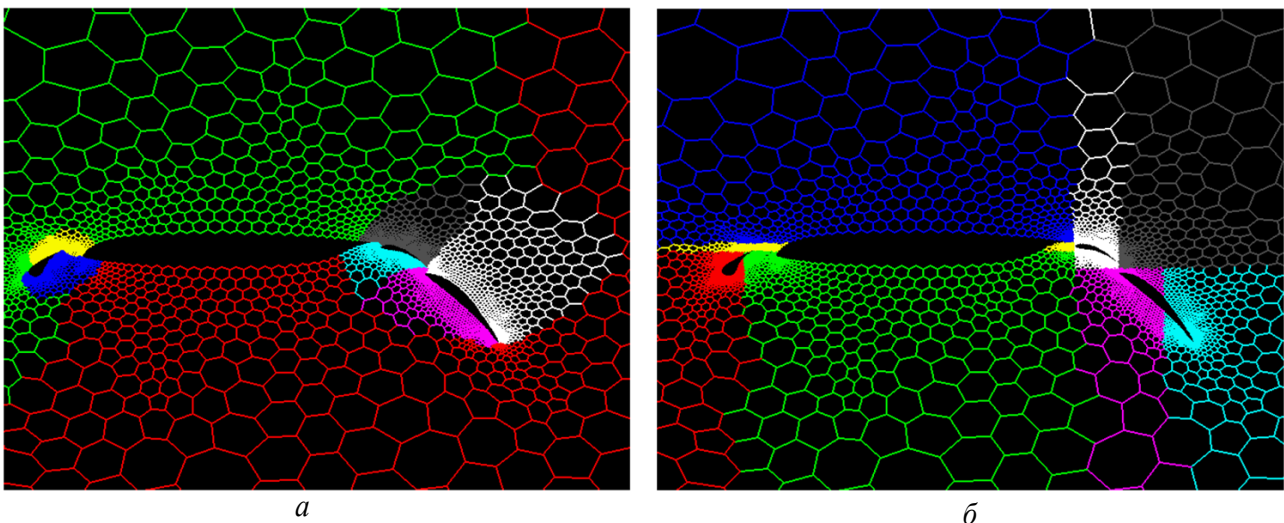


Рис.14. Разбиение многосвязной расчетной области около профиля крыла на восемь подобластей с использованием спектрального (а) и геометрического (б) подходов. Число разрезанных ребер, характеризующее качество спектральной и геометрической декомпозиции равно 299 и 529 соответственно [35].

5. Современные многоуровневые и иные альтернативные подходы

В последнее время широкое распространение получил эффективный метод декомпозиции сеточных моделей, основанный на многоуровневом подходе [36–43]. Реализация многоуровневой схемы состоит из трех этапов: огрубление исходного графа, предварительное разбиение и многоуровневое уточнение. На стадии огрубления структура графа многократно пошагово укрупняется, путем попарного стягивания его узлов, образуя многоуровневую систему вложенных графов. Процедура повторяется до тех пор, пока не будет получен граф относительно небольшого размера. На втором этапе проводится декомпозиция самого грубого графа, что требует минимальных затрат расчетного времени. Третья стадия заключается в оптимизации разбиения, которая применяется к соответствующим подобластям графов различных уровней, начиная с самого грубого и заканчивая самым подробным исходным графом. На данном этапе можно использовать, например, алгоритмы типа Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса. Модель, приведенная на рис. 15, иллюстрирует концепцию многоуровневого подхода [44].

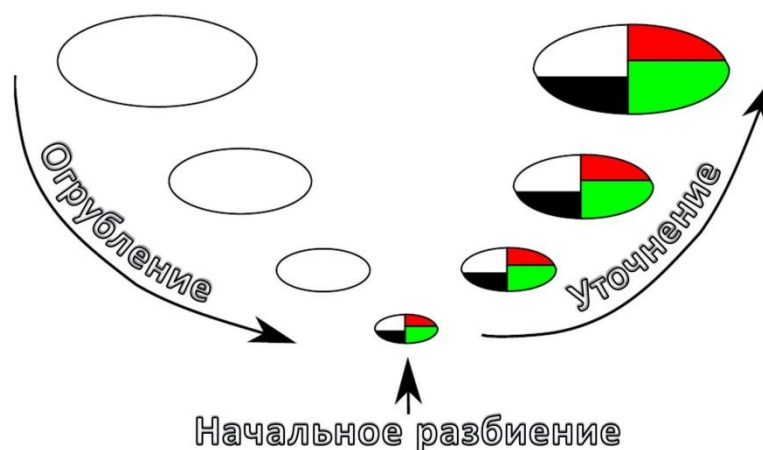


Рис. 15. Три стадии реализации многоуровневого подхода

Огрубление начальной структуры графа можно получить согласованным попарным слиянием вершин, соединенных ребрами, при условии, что никакие два из них не выходят из одного узла. Рис. 16, *а* иллюстрирует процесс случайного согласования узлов и формирование на его основе огрубленного графа.

В работе [41] предложен более эффективный метод согласования вершин, основанный на принципе выбора объединяющих связей с наибольшим весом (рис. 16, *б*). Технология использует понятие так называемого взвешенного графа, когда каждому ребру ставится в соответствие некоторое значение – вес ребра (рис. 16). В процессе огрубления исходного графа путем стягивания части ребер формируется последовательность вложенных графов.

Хорошая схема укрупнения структуры графа может существенно уменьшить его размерность (рис. 16). Исходный граф на этом рисунке имеет суммарный вес ребер равный 37. Огрубление с использованием двух различных методик позволило уменьшить суммарный вес полученного графа и тем самым понизить сложность задачи рационального разбиения.

Кроме этого в рамках многоуровневого подхода удастся значительно повысить эффективность алгоритма локальной оптимизации Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса, так как перемещение узла огрубленного графа любой степени вложения в соседнюю подобласть эквивалентно перемещению большой группы частиц исходного графа, но с меньшими временными затратами. В исследовании [41] показано, что выбор метода декомпозиции на этапе начального разбиения (рис. 15) не оказывает большого влияния на конечный результат.

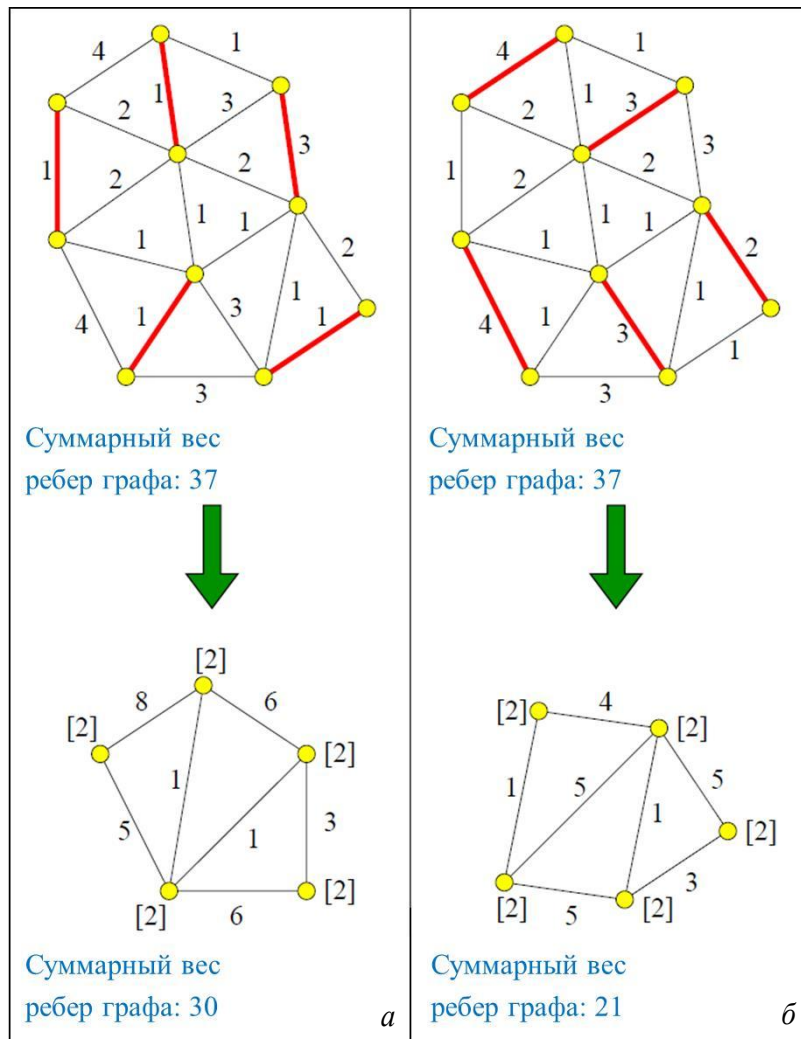


Рис.16. Парное согласование вершин случайным способом (а) и с учетом веса объединяющих связей (б). Последующее огрубление взвешенного графа путем слияния вершин

Многоуровневый подход является надежным и для большинства случаев превосходит метод спектрального деления по скорости и качеству разбиения. Благодаря своим преимуществам, технология многоуровневой декомпозиции используется в таких общедоступных библиотеках программ как METIS [45], SCOTCH [46], CHACO [47].

В работе [42] предложен метод многоуровневой декомпозиции, обобщенный на случай произвольного числа подобластей, который позволяет избежать многократного применения алгоритма многоуровневой бисекции. Данный модифицированный метод используется в следующих программных пакетах: METIS [45], JOSTLE [48], PARTY [49].

В настоящее время активно развивается альтернативный подход к разбиению больших сеток для решения разнообразных задач моделирования на высокопроизводительных вычислительных системах, реализующий инкрементный алгоритм декомпозиции [50]. Данная технология ориентирована на неструктурированные сетки, основывается на графовом представлении сеточной модели и гарантирует получение оптимально сбалансированного разбиения высокого качества. Распределение вершин графа проводится в ходе итерационной процедуры путем инкрементного наращивания доменов за счет захвата смежных нераспределенных вершин. Рост каждой подобласти начинается со случайно выбранной инициализирующей вершины и ограничивается столкновением с границами соседних доменов. В процессе расширения смежные подобласти взаимодействуют посредством диффузного пе-

перераспределения вершин через общую границу, которое проводится с целью выравнивания суммарного веса вершин в доменах. После формирования предварительного разбиения используется алгоритм локального уточнения доменов типа Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса. Оценка качества доменов проводится с применением критерия, основанного на проверке связности оболочек последних, что приводит к формированию преимущественно связанных подобластей. Таким образом, метод лишен недостатка присущего популярным иерархическим методам [50]. При недостаточном качестве полученного разбиения алгоритм предусматривает механизм оптимизации, действие которого предполагает освобождение части вершин и повторение этапа роста доменов.

В работах [51–53] метод получил дальнейшее развитие благодаря использованию комплексного критерия качества, учитывающего не только связность оболочек, но и суммарный вес разрезанных ребер, дисбаланс числа вершин в подобластях, число несвязных доменов. Параллельная версия инкрементного алгоритма декомпозиции графов, реализована в программном комплексе GRIDSPIDERPAR [53]. В [53] также приводятся результаты подробного сравнительного анализа разбиений, которые были получены с помощью известных пакетов METIS [45], SCOTCH [46], ZOLTAN [53], реализующих иерархические алгоритмы, и комплекса программ GRIDSPIDERPAR. Качество декомпозиции оценивалось по дисбалансу числа вершин в доменах, количеству несвязных доменов и числу разрезанных ребер.

6. Сравнительная оценка различных методов декомпозиции

Все рассмотренные подходы к эффективному разбиению расчетных сеток или соответствующих им графов для высокопроизводительных вычислений имеют свои преимущества и недостатки, поэтому ни один из рассмотренных методов не может априори считаться более предпочтительным. Использование комбинированных схем позволяет компенсировать недостатки одного метода преимуществами другого и тем самым существенно повышать эффективность классических подходов. Например, алгоритмы Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса могут эффективно использоваться в рамках любой схемы декомпозиции для улучшения качества разбиения.

Качественная оценка эффективности описанных классических технологий, а также комбинированных методов выполнялась на основе анализа литературных источников [1–7, 11–20, 22–29, 35–44] и собственных исследований. Для определения количественных характеристик подходов осуществлялось их тестирование на задаче разбиения расчетной сетки около профиля крыла с механизацией (рис. 17, а). При этом проводилось либо поузловое разбиение (модель вычислений параметров задачи в узлах сетки), либо поэлементная декомпозиция (модель вычислений независимых переменных в центрах ячеек) с использованием дуального графа расчетной сетки (рис. 17, б). Геометрия профиля крыла позаимствована из демонстрационного примера MATLAB “airfoil” [54]. Многосвязная расчетная область аппроксимировалась неструктурированной адаптивной сеткой, включающей 4253 узла, 12289 ребер и 8034 треугольных элемента.

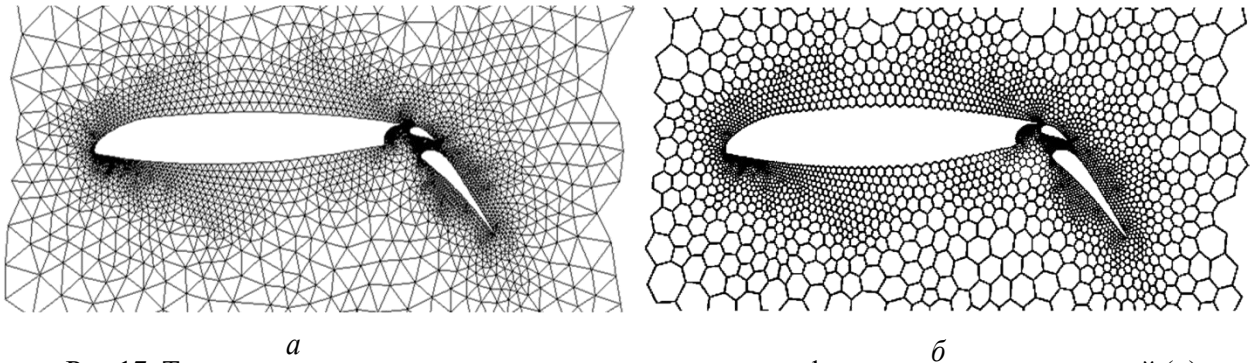


Рис.17. Треугольная адаптивная расчетная сетка около профиля крыла с механизацией (а) и ее графовое представление (б)

В табл. 1 приводятся результаты качественной оценки рассмотренных методик по пятибалльной шкале. Методы сопоставлялись по наиболее важным критериям таким как: качество (определялось сбалансированностью разбиения, количеством коммуникационных связей между доменами, наличием или отсутствием изолированных подобластей), время выполнения алгоритмов, способность к распараллеливанию. Примеры применения исследованных алгоритмов на задаче разбиения треугольной сетки около крылового профиля (рис. 17) на различное число подобластей представлены на рис. 18, 19. Количественные показатели, характеризующие качество декомпозиции при использовании рассмотренных подходов помещены в табл. 2, 3 для поузлового и поэлементного разбиения соответственно.

Выше отмечалось, что геометрические подходы, основанные на алгоритмах рекурсивной координатной (рис. 18 а, б; рис. 19 а, б) и инерционной бисекции (рис. 19 в, г) значительно уступают другим методам по качеству разбиения.

Этот вывод подтверждается результатами анализа данных, представленных в табл. 2, 3 для рекурсивной координатной декомпозиции. Несмотря на то, что получаемые разбиения хорошо сбалансированы (табл. 2, 3), они имеют самые плохие показатели по суммарному числу коммуникационных связей между доменами. Кроме этого, для сложной геометрии в процессе деления возможно возникновение доменов, состоящих из изолированных подобластей (рис. 4). Рекурсивное инерционное разбиение (рис. 19 в, г) и деление с учетом связности (жадный алгоритм) лишь немногим превосходит первый метод по соответствующему показателю (табл. 1). Также неплохие результаты, с относительно небольшим числом информационных связей между подобластями, дает метод декомпозиции, основанный на использовании заполняющих пространство кривых (рис. 8). Этот подход имеет лучший показатель в семействе геометрических методов (табл. 1).

Спектральный метод, а также подходы Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса позволяют получать декомпозицию близкую к оптимальной (табл. 2). В работе [55] проведено качественное сравнение традиционного метода спектральной бисекции и спектрального подхода с последующим применением алгоритма оптимизации Кернигана-Лина на примере разбиения расчетной сетки около профиля крыла (рис. 17). Сопоставление соответствующих показателей проводится в табл. 2. Алгоритм спектрального деления и комбинированная схема на его основе стабильно показывают очень хорошие результаты при последовательном дроблении расчетной области на 2, 4, 8, 16, 32 и 64 подобласти. Кроме этого, технология, основанная на спектральной декомпозиции, гарантирует связность каждой подобласти.

Многоуровневый подход (рис. 18 в – е; рис. 19 д, е) показывает стабильно лучшие результаты декомпозиции (табл. 1 – 3). Применение алгоритмов Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса на этапе многоуровневого уточнения позволяет добиться отличного качества разбиения. При этом суммарное расчетное время необходимое на оптимизацию декомпозиции укрупненных графов на всех уровнях вложения существенно меньше временных затрат на реализацию классических алгоритмов Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса.

Анализ временных затрат на работу алгоритмов показывает, что схемы, основанные на рекурсивной координатной и инерционной бисекциях, характеризуются минимальным временем исполнения и, соответственно, оцениваются высшим баллом (табл. 1). Декомпозиция с использованием заполняющих пространство кривых, разбиение с учетом связности, а также многоуровневая технология затрачивают на порядок больше времени. Значительными временными затратами характеризуются подходы Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса, при использовании которых возникает необходимость проведения нескольких итераций для достижения разбиения приемлемого качества. С точки зрения расходования вычислительных ресурсов, спектральный метод является самым дорогостоящим и неэффективным, из-за больших затрат расчетного времени на определение собственных векторов (табл. 1), поэтому данное семейство алгоритмов демонстрирует худшие временные показатели.

Задача оптимального разделения графов сама может являться предметом распараллеливания. Это бывает необходимо в тех случаях, когда вычислительной мощности и объема оперативной памяти обычных компьютеров недостаточно для эффективного решения задачи. Параллельной реализации эффективных алгоритмов разделения графов посвящены, например, следующие исследования: [3, 51 – 53, 56 – 61].

Алгоритмы типа Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса являются последовательными по своей природе (табл.1) и плохо поддаются распараллеливанию. Геометрические методы, к которым относятся координатная и инерционная бисекции, могут быть распараллелены достаточно эффективно. При использовании остальных подходов удается достичь хотя бы некоторой степени параллелизма.

Таблица 1

Качественная оценка рассмотренных методов декомпозиции по пятибалльной шкале

Метод декомпозиции	Качество разбиения	Время выполнения	Способность к распараллеливанию
Геометрические методы			
Рекурсивная координатная бисекция	1	5	4
Рекурсивная инерционная бисекция	2	5	4
Декомпозиция с использованием заполняющих пространство кривых	3	4	4
Комбинаторные методы			
Алгоритм деления с учетом связности	3	4	3
Алгоритм Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса	4	3	2
Спектральный метод	4	2	3
Многоуровневый подход	5	4	3

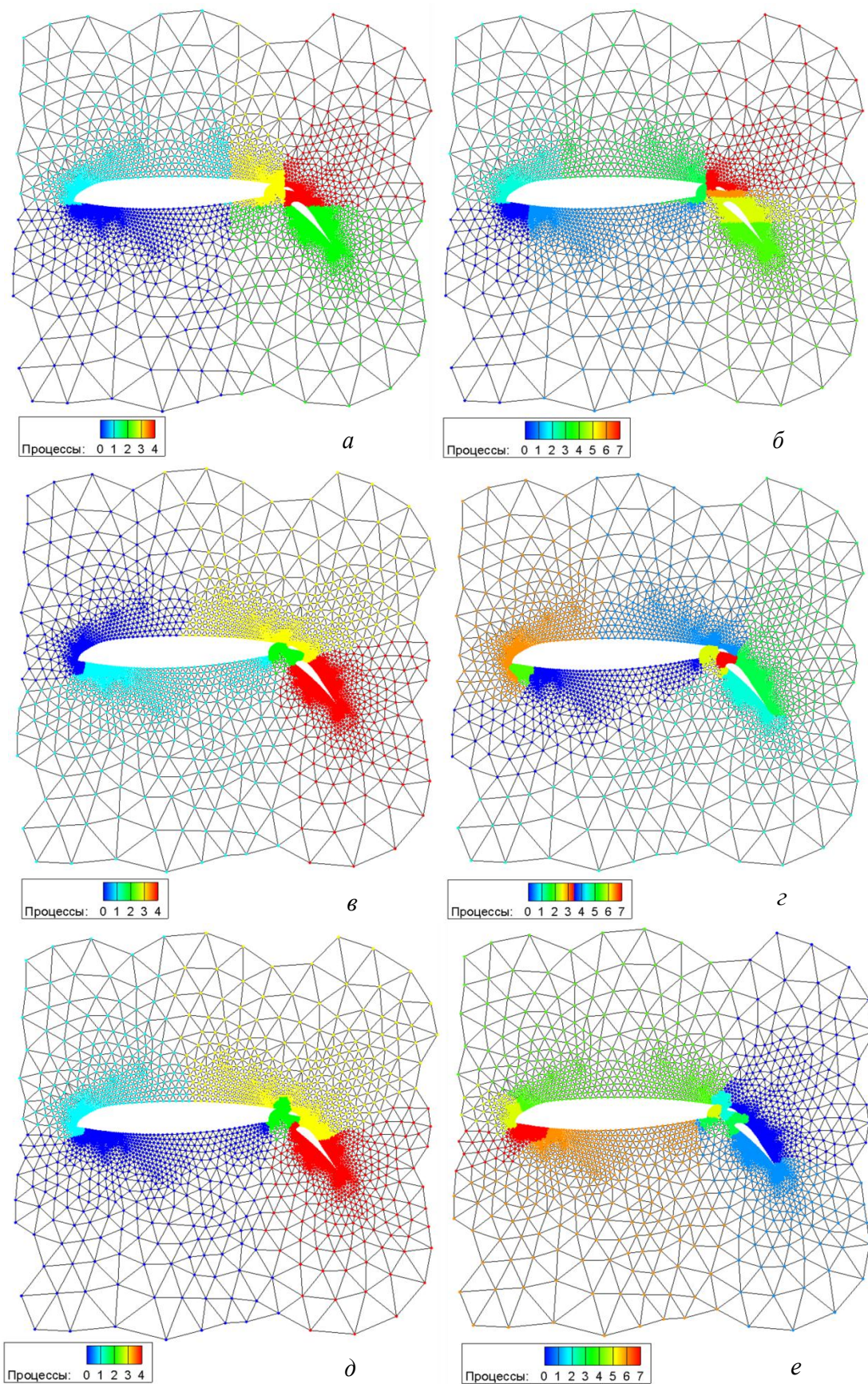


Рис. 18. Модели параллельных вычислений на неструктурированной треугольной сетке при поузловом разбиении для пяти (*a*, *в*, *д*) и восьми (*б*, *г*, *е*) процессов, созданные с применением рекурсивной координатной бисекции (*a*, *б*), метода многоуровневой бисекции (*в*, *г*) и усовершенствованного многоуровневого подхода (*д*, *е*)

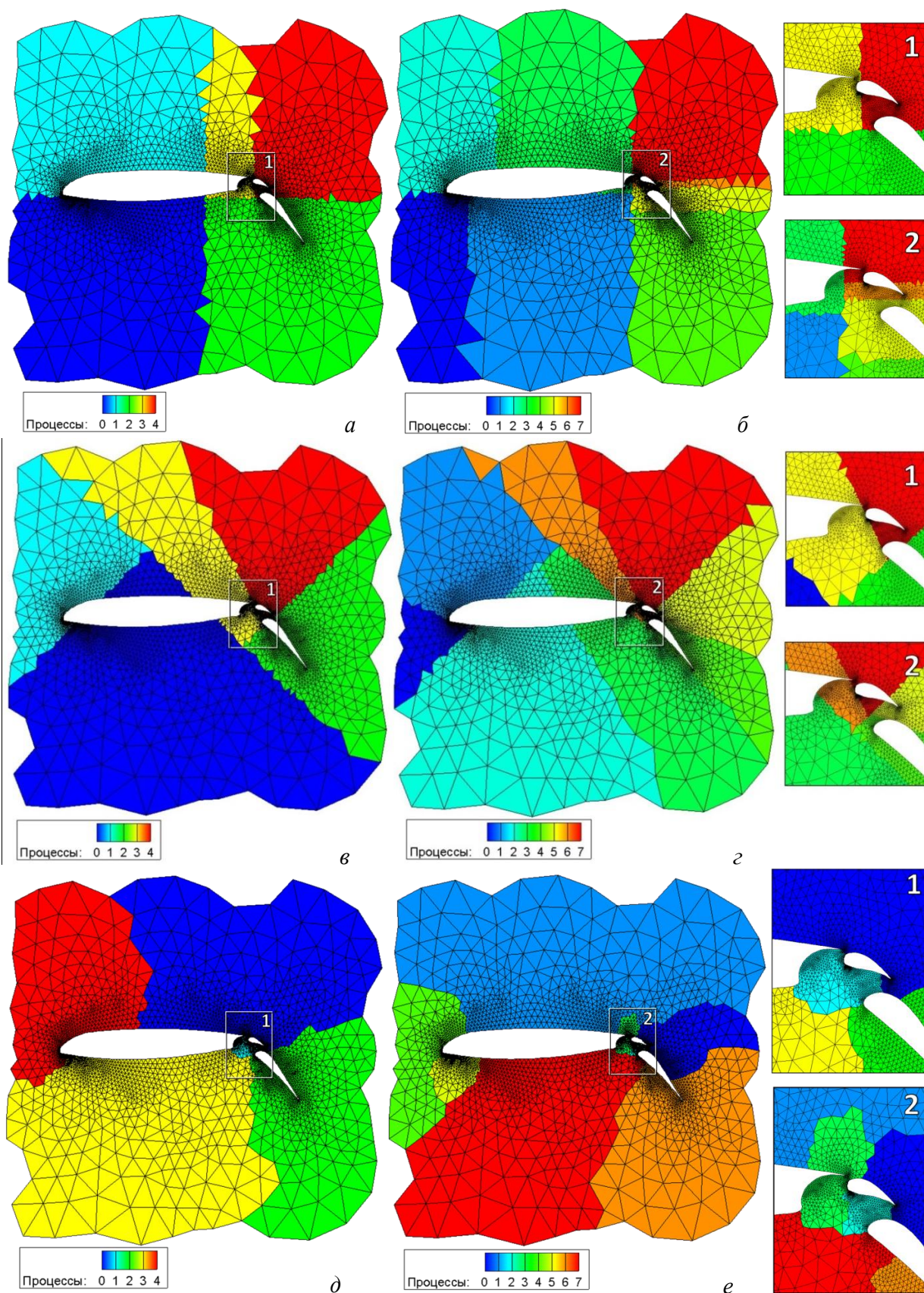


Рис. 19. Модели параллельных вычислений на неструктурированной треугольной сетке при поэлементном разбиении для пяти (а, в, д) и восьми (б, г, е) процессов, созданные с использованием рекурсивной координатной бисекции (а, б), рекурсивной моментной бисекции (в, г), и технологии многоуровневого разбиения (д, е)

Таблица 2

Характеристики качества поузлового разбиения треугольной сетки (4253 узла) вблизи крылового профиля (рис. 17, а), полученного с использованием различных классических методов декомпозиции и комбинированных подходов

Число подобластей N_p	Общее число разрезанных ребер	Число подобластей N_p	Общее число разрезанных ребер			
Спектральная бисекция [55]		Спектральная бисекция с оптимизацией методом Кернигана-Лина [55]				
2	117	2	90			
4	260	4	245			
8	469	8	395			
16	752	16	652			
32	1216	32	1097			
64	1909	64	1742			
Число подобластей N_p	Минимальное число узлов в подобласти	Максимальное число узлов в подобласти	Минимальное число коммуникационных связей домена	Максимальное число коммуникационных связей домена	Общее число разрезанных ребер	Расчетное время
Рекурсивная координатная бисекция (рис. 18 а, б)						
5	850	851	62	76	339	0.280 с
8	531	532	51	105	586	0.296 с
Метод многоуровневой бисекции (рис. 18 в, г)						
5	850	851	33	53	203	0.686 с
8	531	532	36	50	353	1.012 с
Многоуровневая декомпозиция на произвольное число подобластей (рис. 18 д, е)						
5	829	871	32	64	239	0.327 с
8	517	546	33	55	368	0.529 с

Таблица 3

Количественные характеристики поэлементного разбиения треугольной сетки (8034 ячейки) вблизи крылового профиля (рис. 17 б), полученного с использованием различных классических методов декомпозиции и комбинированных подходов

	Рекурсивная координатная бисекция (рис. 19 а, б)		Метод многоуровневой бисекции (рис. 19 д, е)	
Число подобластей N_p	5	8	5	8
Минимальное число узлов в подобласти	1606	999	1606	1004
Максимальное число узлов в подобласти	1607	1005	1607	1005
Минимальное число коммуникационных связей домена	63	52	31	34
Максимальное число коммуникационных связей домена	81	128	51	53
Общее число разрезанных ребер	179	327	101	169
Расчетное время	0.347 с	0.409 с	1.271 с	1.560 с

На рис. 20 представлен результат работы наиболее эффективного комбинированного метода декомпозиции (алгоритма Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса в рамках иерархического подхода) для разбиения трехмерных неструктурированных сеток.

Рисунок демонстрирует тетраэдральную сеточную модель размерностью $N = 1923402$ узла и $E = 10763732$ элемента, построенную для решения задач внешнего обтекания пространственной конфигурации орбитального корабля Space Shuttle на 64 процессорах.

Расчетная область посредством оптимальной декомпозиции сеточного графа разделяется между параллельными процессами на соответствующее число подобластей, выделенных различными цветами. Домены формируются с учетом адаптивных свойств расчетной сетки (значительного сгущения к сложной поверхности обтекаемого тела) и имеют относительно небольшую площадь границ. Основные характеристики полученного разбиения представлены в табл. 4.

На рисунке внизу показаны некоторые результаты расчетно-теоретического исследования обтекания орбитальной ступени космической системы Space Shuttle, полученные с использованием построенной модели параллельных вычислений.

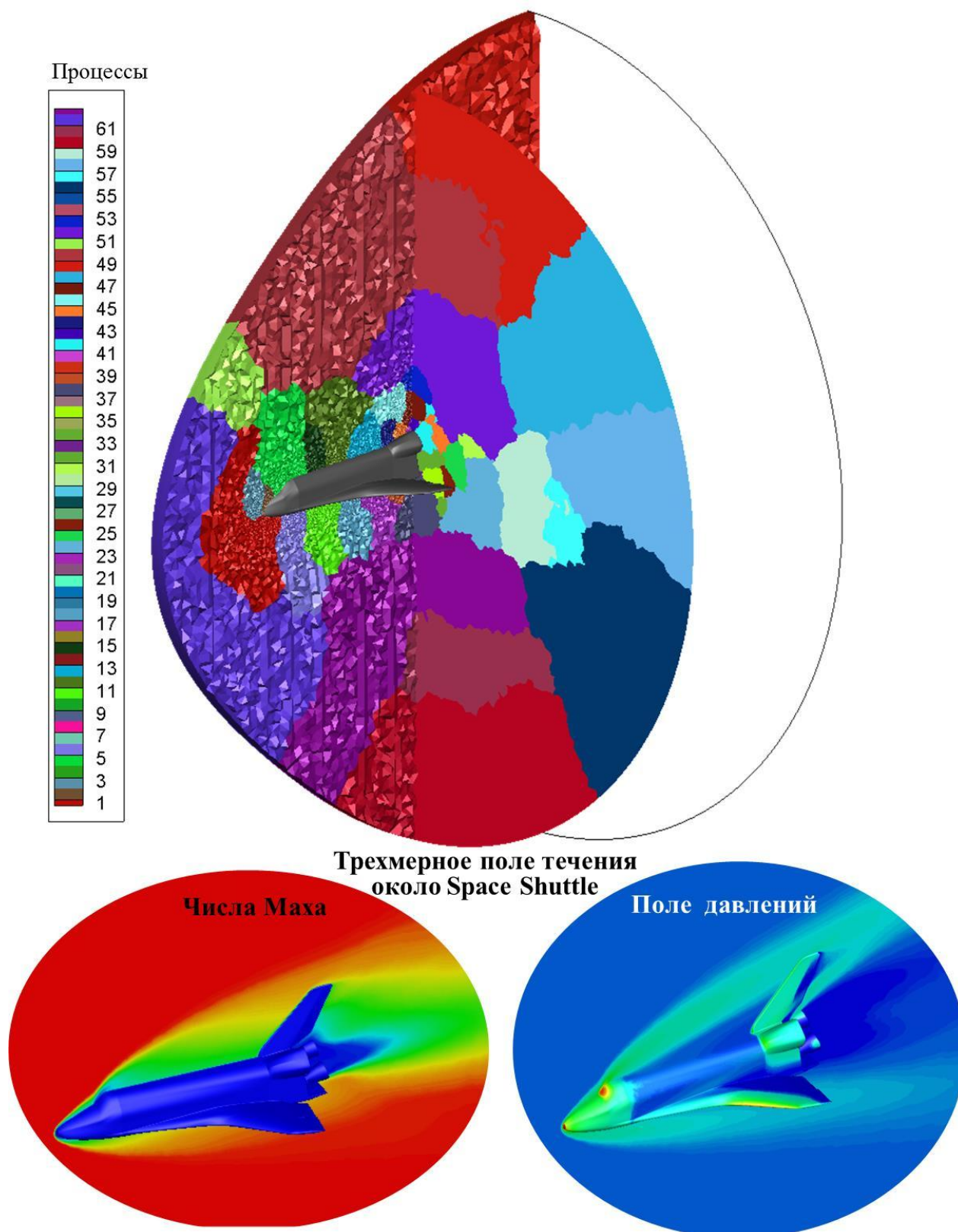


Рис.20. Модель параллельных вычислений на тетраэдральной сетке, созданная при помощи технологии многоуровневого разбиения, для решения задачи внешнего обтекания пространственной модели орбитального корабля Space Shuttle на 64 процессорах. Некоторые результаты численного моделирования обтекания летательного аппарата

Таблица 4

Количественные характеристики поэлементной декомпозиции тетраэдральной сетки (10 763 732 расчетных элемента, 1 923 402 узла), построенной для модели космолана Space Shuttle (рис. 20)

Число подобластей N_p	64		
	Минимальное	Максимальное	Общее
Число ячеек подобласти (отклонение от среднего, %)	163 392 (-2.85%)	173 229 (+3.00%)	10 763 732
Количество тетраэдральных элементов, примыкающих к границе подобласти	3 056	9 904	408 519 (3.80% от общего числа)
Число граней	333291	354098	21783258
Число граней, формирующих границу подобласти (число коммуникационных связей)	3 190	10 419	214 166 (0.98% от общего числа)
Число соседних доменов	3	12	64

7. Заключение

Выполнен анализ современных подходов к рациональной декомпозиции двумерных и пространственных неструктурированных адаптивных сеток для высокопроизводительных вычислений на многопроцессорных системах при решении актуальных задач газовой динамики и аэродинамики. Изучены и реализованы: эффективные алгоритмы оптимального разбиения расчетных сеток, использующие координатную и моментную рекурсивную бисекции, заполняющие пространство кривые; комбинаторные подходы, такие как метод деления с учетом связности, алгоритм Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса; класс спектральных методов; многоуровневые (иерархические) технологии.

На основе анализа литературных источников и собственных исследований проведены качественные и количественные оценки эффективности описанных классических технологий, а также комбинированных методов. Методы сопоставлялись по наиболее важным критериям таким как: сбалансированность разбиения, количество коммуникационных связей между доменами, наличие или отсутствие изолированных подобластей, время выполнения алгоритмов, способность к распараллеливанию.

Геометрическая декомпозиция проводится без учета структурной связности между элементами расчетной сетки, поэтому данный класс подходов, как правило, используется для создания разбиений, невысокого качества, и значительно уступает методикам, учитывающим межэлементные связи. Кроме этого для сложной геометрии в процессе деления возможно возникновение доменов, состоящих из изолированных подобластей. Преимуществами геометрических подходов, основанных на применении координатной или моментной рекурсивной бисекциях, либо заполняющих пространство кривых, являются: высокая способность к распараллеливанию, минимальные временные затраты на исполнение.

Метод рекурсивной координатной бисекции имеет существенное ограничение в том, что разделение проводится строго перпендикулярно одной из координатных осей. Для многих случаев это приводит к далеко не оптимальному разбиению с границами большой протяженности между областями. Рекурсивная инерционная бисекция является развитием предыдущего метода и позволяет проводить разбиение вдоль линий ориентированных под произвольным углом к координатным осям. Метод декомпозиции, основанный на использовании заполняющих пространство кривых, дает неплохие результаты и имеет лучшие показатели качества в семействе геометрических методов.

Комбинаторный алгоритм деления с учетом связности (жадный алгоритм) лишь немногим превосходит геометрические методы по качеству разбиения и характеризуется меньшей вероятностью возникновения изолированных подобластей. Однако метод деления с учетом связности не является достаточно надежным и для получения разбиения, близкого к оптимальному, необходимо проводить несколько запусков алгоритма с использованием различных начальных вершин и выбирать наиболее рациональный результат, что увеличивает временные затраты.

С использованием спектрального подхода можно получать гарантированно высокое качество декомпозиции (в том числе и для сложных многосвязных областей), однако метод является весьма затратным с точки зрения вычислительных ресурсов.

Многоуровневый подход является самым надежным и для большинства случаев превосходит метод спектрального деления по скорости и качеству разбиения.

Алгоритмы Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса могут эффективно использоваться в рамках любой схемы декомпозиции для улучшения качества разбиения. Их применение на стадии уточнения в процессе реализации многоуровневого подхода позволяет добиться отличного качества разбиения. При этом суммарное расчетное время необходимое на оптимизацию декомпозиции укрупненных графов на всех уровнях вложения существенно меньше временных затрат на реализацию классических алгоритмов Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса. Таким образом, в рамках многоуровневого подхода удастся значительно повысить эффективность алгоритма локальной оптимизации Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса, так как перемещение узла огрубленного графа любой степени вложения в соседнюю подобласть эквивалентно перемещению большой группы частиц исходного графа, но с меньшими временными затратами.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю, академику РАН, проф. С.Т. Суржикову за идеи, положенные в основу работы.

Работа выполнена в Лаборатории радиационной газовой динамики ИПМех РАН в рамках Программы фундаментальных исследований Российской академии наук, при поддержке гранта РФФИ 16-01-00379.

Литература

1. Schloegel K., Karypis G., Kumar V. Graph partitioning for high performance scientific simulations / In J. Dongarra, I. Foster, G. Fox, K. Kennedy, and A. White, editors, CRPC Parallel Computing Handbook, Morgan Kaufmann, 2001.
2. Berger M.J., Bokhari S. A partitioning strategy for nonuniform problems on multiprocessors // IEEE Trans. Comp. Vol. 36. 1987. P. 570–580.
3. Heath M.T., Raghavan P. A Cartesian parallel nested dissection algorithm // SIAM Journal of Matrix Analysis and Applications. Vol. 16, № 1, 1995. P. 235–253.
4. Nour-Omid B., Raefsky A., Lyzenga G. Solving finite element equations on concurrent computers. / In A.K. Noor, editor, Parallel Computations and Their Impact on Mechanics, ASME, 1986. P. 209–227.
5. Patra A., Kim D.W. Efficient mesh partitioning for adaptive hp finite element methods / In International Conference on Domain Decomposition Methods, 1998.
6. Pilkington J.R., Baden S.B. Partitioning with spacefilling curves / Technical Report CS94-349, Dept. of Computer Science and Engineering, Univ. of California, 1994.
7. Raghavan P. Line and plane separators / Technical Report UIUCDCS-R-93-1794, Dept. of Computer Science, Univ. of Illinois, 1993.
8. Mandelbrot B.B. The Fractal Geometry of Nature / New York: W. H. Freeman and Co., 1982.
9. Alauzet F., Loseille A. On the use of space filling curves for parallel anisotropic mesh adaptation // Proc. in 18th International Meshing Roundtable, Springer-Verlag, 2009. P. 337–357.

10. Schamberger S., Wierum J.M. A locality preserving graph ordering approach for implicit partitioning: Graph-filling curves // Proc. 17th Intl. Conf. on Parallel and Distributed Computing Systems, PDCS 2004, ISCA, 2004. P. 51–57.
11. Ashcraft C., Liu J.W.H. A partition improvement algorithm for generalized nested dissection / Technical Report BCSTECH-94-020, Dept. of Computer Science, York Univ., 1994.
12. Ashcraft C., Liu J.W.H. Using domain decomposition to find graph bisectioners / Technical report CS-95-08, Dept. of Computer Science, York Univ., 1995.
13. Fiduccia C.M., Mattheyses R.M. A linear time heuristic for improving network partitions // Proc. 19th IEEE Design Automation Conference, 1982. P. 175–181.
14. George A., Liu J.W. Computer Solution of Large Sparse Positive Definite Systems / Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1981.
15. Goehring T., Saad Y. Heuristic algorithms for automatic graph partitioning / Technical Report UMSI-94-29, University of Minnesota Supercomputing Institute, 1994.
16. Hager W.W., Park S.C., Davis T.A. Block exchange in graph partitioning / In P.M. Pardalos, editor, Approximation and Complexity in Numerical Optimization: Continuous and Discrete Problems. Kluwer Academic Publishers, 2000. P. 299-307.
17. Kernighan B.W., Lin S. An efficient heuristic procedure for partitioning graphs // The Bell System Technical Journal. Vol. 49, №2, 1970. P. 291–307.
18. Писсанецки, С. Технология разреженных матриц / С. Писсанецки. - М.: Мир, 1988.
19. Chung Y.-C., Ranka S. Mapping finite element graphs on hypercubes // Journal of Supercomputing. Vol. 6, 1992. P. 257 – 282.
20. Sadayappan P., Ercal F. Mapping of finite element graphs onto processor meshes // IEEE Transactions on Computers. Vol. C-36, 1987. P. 1408 – 1424.
21. Diekmann R., Monien B., Preis R. Using helpful sets to improve graph bisections / In D. Hsu, A. Rosenberg, D. Sotteau, editors, Interconnection Networks and Mapping and Scheduling Parallel Computations. AMS Publications, DIMACS Volume Series. Vol. 21, 1995. P. 57–73.
22. Simon H.D. Partitioning of unstructured problems for parallel processing // Comput. Syst. Eng. Vol. 2, 1991. P. 135–148.
23. Williams R.D. Performance of dynamic load balancing algorithms for unstructured mesh calculations / Technical Report, California Institute of Technology, 1990
24. Chan T.F., Resasco D.C. A framework for the analysis and construction of domain decomposition preconditioners / Technical Report CAM-87-09, University of California, Los Angeles, 1987.
25. Chan T.F., Smith B. Domain decomposition and multigrid algorithms for elliptic problems on unstructured meshes // Contemp. Math, 1993. P. 1–14.
26. Hendrickson B., Leland R. An improved spectral graph partitioning algorithm for mapping parallel computations // SIAM J. Sci. Comput. Vol. 16, №2, 1995. P. 452–469.
27. Pothen A., Simon H.D., Liou K.-P. Partitioning sparse matrices with eigenvectors of graphs // SIAM Journal of Matrix Analysis and Applications. Vol. 11, № 3, 1990. P. 430–452.
28. Pothen A., Simon H.D., Wang L., Barnard S.T. Towards a fast implementation of spectral nested dissection // Supercomputing '92 Proceedings, 1992. P. 42–51.
29. Spielman D.A., Teng S.-H. Spectral partitioning works: Planar graphs and finite element meshes // Linear Algebra and its Applications. Vol. 421, 2007. P. 284–305.
30. Ильин В. А., Позняк Э. Г. Линейная алгебра: Учебник для вузов. — 6-е изд., стер. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. — 280 с.
31. Chung F. R. K. Spectral Graph Theory / CBMS regional conference series in mathematics Conference Series in Mathematics. Vol.92, 1997.
32. Mohar B. The Laplacian spectrum of graphs / In Y. Alavi, G. Chartrand, O. R. Oellermann, A. J. Schwenk , editors, Graph Theory, Combinatorics, and Applications. Vol. 2, Wiley, New York, 1991. P. 871–898.
33. Fiedler M. Algebraic connectivity of graphs // Czech. Math. J. Vol 23, №98, 1973. P. 298–305
34. Fiedler M. A property of eigenvectors of nonnegative symmetric matrices and its application to graph theory // Czech. Math. J. Vol. 25, №100, 1975. P. 619–633.
35. Data and Graph Partitioning. [Электронный ресурс] / Lecture notes. Indiana University. URL: <http://www.cs.indiana.edu/classes/b673/notes/GraphPartitioning.pdf>
36. Bui T. N., Jones C. A heuristic for reducing fill in sparse matrix factorization // 6th SIAM Conf. Parallel Processing for Scientific Computing, 1993. P. 445 – 452.

37. Cong J., Smith M. A parallel bottom-up clustering algorithm with applications to circuit partitioning in VLSI design / Proc. ACM/IEEE Design Automation Conference, 1993. P. 755–760.
38. Gupta A. Fast and effective algorithms for graph partitioning and sparse matrix reordering // IBM Journal of Research and Development. Vol. 41, 1996. P. 171–183.
39. Hauck S., Borriello G. An evaluation of bipartitioning techniques // IEEE Transactions on Computer-Aided Design. Vol. 16, № 8, 1997. P. 849–866.
40. Hendrickson B., Leland R. A multilevel algorithm for partitioning graphs / Technical Report SAND 93-1301, Sandia National Laboratories, 1993.
41. Karypis G., Kumar V. A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs // SIAM Journal on Scientific Computing. Vol. 20, №1, 1998. P. 359–392.
42. Karypis G., Kumar V. Multilevel k-way partitioning scheme for irregular graphs // Journal of Parallel and Distributed Computing. Vol. 48, № 1, 1998. P. 96–129.
43. Monien B., Preis R., Diekmann R. Quality matching and local improvement for multilevel graph-partitioning / Technical report, University of Paderborn, 1999.
44. Chevalier C., Safro I. Comparison of coarsening schemes for multi-level graph partitioning / Proc. Learning and Intelligent Optimization, 2009. P. 191–205.
45. Karypis G., Kumar V. MeTiS 4.0: Unstructured graph partitioning and sparse matrix ordering system / Technical report, Dept. of Computer Science and Engineering, Univ. of Minnesota, 1998.
46. Pellegrini F., Roman J. SCOTCH: A software package for static mapping by dual recursive bipartitioning of process and architecture graphs // Proc. HPCN'96, 1996. P. 493–498.
47. Hendrickson B., Leland R. The Chaco user's guide: Version 2.0 / Technical Report SAND94-2692, Sandia National Laboratories, 1994.
48. Walshaw C. The Parallel JOSTLE Library User's Guide, Version 3.0. / University of Greenwich, 1998.
49. Preis R., Diekmann R. PARTY – a software library for graph partitioning / Technical report, University of Paderborn, 1997.
50. Якобовский М.В. Инкрементный алгоритм декомпозиции графов // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. Серия «Математическое моделирование и оптимальное управление». Издательство ННГУ. № 1(28), 2005. С. 243–250.
51. Головченко Е.Н. Параллельный пакет декомпозиции больших сеток // Матем. моделирование. Т. 23, № 10, 2011. С. 3–18.
52. Головченко Е.Н. Разбиение больших сеток // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. Серия «Информационные технологии». Издательство ННГУ. № 5(2), 2012. С. 309–315.
53. Головченко Е.Н., Якобовский М.В. Пакет параллельной декомпозиции больших сеток GridSpiderPar // Вычислительные методы и программирование: Новые вычислительные технологии (Электронный научный журнал). Т. 16, № 4, 2015. С. 507–517.
54. MATLAB. <http://www.mathworks.com/products/matlab/>
55. Rantakokko J. A local refinement algorithm for data partitioning / Proc. of PARA2000, T. Sorevik et.al, editors, New Paradigms for HPC in Industry and Academia, 5th International Workshop, PARA2000, Lecture Notes in Computer Science, Springer-Verlag, Berlin, 2001. P. 140–148.
56. Barnard S.T. PMRSB: Parallel multilevel recursive spectral bisection / Proc. ACM/IEEE Conference on Supercomputing (on CD-ROM), 1995.
57. Gilbert J. R., Zmijewski E. A parallel graph partitioning algorithm for a message-passing multiprocessor // International Journal of Parallel Programming. Vol.16, 1987. P. 498–513.
58. Karypis G., Kumar V. A parallel algorithm for multilevel graph partitioning and sparse matrix ordering // Journal of Parallel and Distributed Computing. Vol.48, №1, 1998. P. 71–95.
59. Karypis G., Kumar V. Parallel multilevel k-way partitioning scheme for irregular graphs / Siam Review. Vol.42, №2, 1999. P. 278 – 300.
60. Karypis G., Schloegel K., Kumar V. ParMeTiS: Parallel graph partitioning and sparse matrix ordering library / Technical report, Dept. of Computer Science and Engineering, Univ. of Minnesota, 1997.
61. Cross M., Walshaw C. Parallel optimization algorithms for multilevel mesh partitioning / Technical Report 99/IM/44, University of Greenwich, 1999.