2.1 Teilprojekt A4

Parallele Algorithmen für große Gleichungssysteme, basierend auf algebraischen Zerlegungsmethoden

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Volker Mehrmann
Fak. f. Mathematik
TU Chemnitz
09107 Chemnitz
Tel. (0371) 531-8367 (2659)
Fax (0371) 531-2657
email: mehrmann@mathematik.tu-chemnitz.de

2.1.2 Projektbearbeiter

Projektbearbeiter (Ergänzungsausstattung): T. Penzl und U. Elsner
Mitarbeiter (Grundausstattung): M. Bollhöfer, U. Schrader
alle Lehrstuhl Numerische Algebra

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Ziel des Projekts war die Entwicklung von numerischen Methoden zur Lösung von allgemeinen, großen unsymmetrischen linearen Gleichungssystemen auf modernen Parallelrechnerarchitekturen. Dabei kann nicht davon ausgegangen werden, daß die Gleichungssysteme von der Diskretisierung partieller Differentialgleichungen herrühren, so daß die Methoden rein algebraisch orientiert sind.

Im Rahmen des Projektes wurden die folgenden Zielrichtungen verfolgt:

(1) Entwicklung von algebraischen Methoden zur Entkopplung des Gleichungssystems in parallel leicht lösbare Teilsysteme gefolgt von einem Kopplungssystem (algebraische Gebietszerlegung) sowie von geschachtelten Divide-and-Conquer Methoden. Entwicklung von adaptiven selbststeuerenden Konvergenzbeschleunigern, basierend auf Niedrigrang-Aufdatierungen und der Konstruktion von optimalen Block-Ergänzungen. Untersuchung von chaotischen Iterationsverfahren zur Behandlung von linearen- und nichtlinearen Systemen mit M-Matrix-Struktur. Implementierung dieser neuen Methoden auf Parallelrechnern. Untersuchung des Zusammenhangs dieser neuen Methoden zu algebraischen Mehrgittermethoden und Gebietszerlegungsmethoden.

(2) Entwicklung von Graphenzerlegungsmethoden zur statischen und dynamischen Lastverteilung bei der Speicherung und Lösung von allgemeinen linearen Gleichungssytemen. Insbesondere dabei die parallele Lösung dieser Zerlegungsmethoden mittels Multilevelmethoden.

(3) Entwicklung von iterativen und Mehrgittermethoden für Tensorproduktsystem, wie zB. die Lösung von Lyapunov und Sylvestergleichungen.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

2.3.1 Teilaufgabe Algebraische Entkopplungs– und Divide & Conquer–Strategien

Bei der Entkopplung eines Gleichungssystems in Teilsysteme gibt es verschiedene zu berücksichtigende Gesichtspunkte. Einmal sollte eine Entkopplung möglichst kleinen Ranges erzeugt werden, weil die Lösung des Kopplungssystems im Prinzip sequentiell auf der Lösung der Teilsysteme aufbaut. Zweitens ist es wichtig, daß die Teilsysteme numerisch gut lösbar sind, d.h., daß die Entkopplung Teilsysteme kleiner Kondition erzeugt. Drittens soll das Kopplungssystem gut iterativ und parallel lösbar sein. Zwischen diesen Forderungen muß ein gewisser Kompromiß [19, 2, 3] gefunden werden. Es sollen approximative Strategien zur optimalen Konditionierung, wie in [5, 4] vorgeschlagen, weiterentwickelt werden. Dort wurde gezeigt, daß die minimale Norm der Inversen durch Lösung einer Matrixungleichung erzielt wird. Außerdem sollen die Strategien aus [5, 4] zur Modifikation blockdiagonaler unsymmetrischer Systeme eingesetzt werden. Ein weiterer Aspekt ist in diesem Teilbereich die Untersuchung der Einsetzbarkeit von Methoden der Stabilitätstheorie. Im diskreten Fall, der sich mittels des allgemeinen Ansatzes von [20] direkt aus dem kontinuierlichen ableiten läßt (zumindest von der Theorie her), entspricht eine Stabilisierung des Systems einer Clusterung der Eigenwerte im Einheitskreis. Damit soll versucht werden, den Ansatz von [9] zur Stabilisierung von Systemen zur Konvergenzbeschleunigung von Iterationsverfahren zu übertragen.

Eines der Hauptprobleme bei der Entwicklung von Präkonditionierungstechniken für allgemeine unsymmetrische Probleme ist, daß nicht bekannt ist, nach welchen Kriterien der Präkonditionierer gewählt werden soll. Es gibt viele heuristische Ansätze, wie Minimierung der Kondition, Clusterung der Eigenwerte usw. Keine dieser Techniken ist ganz allgemein nutzbar, siehe z.B. [26]. Es ist daher notwendig, bekannte Techniken zu verfeinern bzw. zu kombinieren, um die Breite der Nutzbarkeit dieser Techniken zu erhöhen. Dabei kommen einem Methoden aus der Steuerungstheorie und der Lösung nichtlinearer Gleichungen zu Hilfe, die dort verwendet werden, um durch Steuerung die Eigenschaften eines Systems zu verändern.

Da zu erwarten ist, daß sich die beschriebenen Ansätze zur Konvergenzverbesserung auf den Fall verallgemeinerter M-Matrizen übertragen lassen, wäre es erstrebenswert, wenn bei der Lösung eines Anwendungsproblems solche Matrixstrukturen entstehen. Dies ist z.B. bei der Diskretisierung invers-monotoner Randwertaufgaben zu erwarten, vorausgesetzt, man verwendet eine Diskretisierungsmethode, die die Eigenschaft der Invers-Monotonie auf das diskrete System überträgt. Es sollen einerseits bekannte Diskretisierungsverfahren unter dieser Fragestellung untersucht werden, und andererseits neue Verfahren vorgeschlagen werden, die dies gewährleisten.

2.3.2 Teilaufgabe Algebraische Graphenzerlegung

Eine der Hauptideen im angestrebten nested-divide-and-conquer Verfahren ist die algebraische Entkopplung des gegebenen Gleichungssystems in Teilsysteme. Damit das Verfahren auch parallel möglichst effektiv arbeitet, ist es nötig, daß die Lösung der verschiedenen Teilsysteme möglichst gleich lang dauert, damit die verschiedenen Prozessoren gut ausgelastet sind. Falls die Teilsysteme iterativ gelöst werden sollen, kann man z.B. fordern, daß die Anzahl der Nicht-Null-Elemente in den verschiedenen Teilsystemen gleich groß ist. Außerdem möchte man, daß das Kopplungssystem möglichst klein ist.

Hat man den Graphen der Matrix, so erhält man daraus die verschiedenen Teilgraphen, indem man Knoten samt den dazugehörigen Kanten entfernt, bis nicht mehr miteinander verbundene Teilgebiete entstehen. Damit das Kopplungssystem möglichst klein bleibt, sollte die Anzahl der entfernten Knoten minimal sein.

Diese Aufgabe kann abstrakt als Graphenpartitionierungsproblem betrachtet werden. In der traditionellen Formulierung der Graphenpartitionierung wird zwar die minimale Anzahl Kanten gesucht, deren Entfernung den Graphen in unabhängige Teilgraphen zerlegt, aber aus dieser Kantenmenge läßt sich leicht eine entsprechende Knotenmenge finden und umgekehrt.

Das Finden der optimalen Zerlegung ist ein NP-vollständiges Problem und damit schon für mittelgroße Probleme nicht mehr in akzeptabler Zeit lösbar. Deswegen ist man auf Heuristiken angewiesen, die zwar vielleicht nicht die optimale Lösung liefern, aber dafür in kurzer Zeit eine gute Näherung. Ansätze hierfür bilden Spektralmethoden [23, 11], graphentheoretische Ansätze [18, 6] und Multilevel-Methoden [10, 17].

2.3.3 Teilaufgabe Gleichungssysteme mit Kronecker-Produkt-Struktur

Lineare Gleichungssysteme, deren Koeffizientenmatrizen eine Tensorproduktstruktur besitzen, stellen eine wichtige Teilklasse der in der Praxis auftretenden, großdimensionierten, dünnbesetzten Gleichungssysteme dar. Beispielsweise führt die Diskretisierung von Modellproblemen partieller Differentialgleichungen sehr häufig auf Gleichungssysteme dieses Typs. Die Tensorproduktstruktur ermöglicht es, diese Gleichungssysteme in Lyapunov-Gleichungen, verallgemeinerte Lyapunov-Gleichungen, Sylvester-Gleichungen oder verallgemeinerte Sylvester-Gleichungen von wesentlich geringerer Ordnung zu überführen. Darüber hinaus treten solche Matrixgleichungen auch in verschiedenen Zusammenhängen in der Steuerungstheorie auf, z.B. in Modellreduktions- und Optimalsteuerungsverfahren. Dabei ist im allgemeinen die asymptotische Stabilität der beteiligten Koeffizientenmatrix bzw. -matrizen die einzige grundlegende algebraische Forderung. Lyapunov- und Sylvester-Gleichungen kleiner Ordnung (bis ca. 500, was bereits einem linearen Gleichungssystem mit 250000 Unbekannten entspricht) werden mit direkten Standardverfahren [1, 8] gelöst, für die bereits effiziente, auf BLAS und LAPACK basierende Software [16, 21, 22] existiert. Der Nachteil der direkten Verfahren ist deren Unfähigkeit, eventuelle schwach besetzte Strukturen in den Matrixgleichungen auszunutzen.

Für schwach besetzte Probleme bieten sich iterative Verfahren als Alternative an, da diese Verfahren in der Regel schwach besetzte Strukturen sehr gut ausnutzen und auch wesentlich besser für eine Parallelisierung geeignet sind als die oben genannten direkten Verfahren. Nichtsdestotrotz ist der Einsatz von Iterationsverfahren nur sinnvoll, wenn eine schnelle Konvergenz der Verfahren gewährleistet ist. Falls der betrachteten Matrixgleichung eine partielle Differentialgleichung zugrundeliegt, lassen sich häufig Mehrgitterverfahren anwenden, die eine optimale Konvergenzrate besitzen. Von Rosen und Wang [24] wurde ein solches Mehrgitterverfahren für Lyapunov-Gleichungen entwickelt, bei dem jedoch der Glättungsschritt relativ aufwendig ist. Außerdem ist die Konvergenzanalyse des Zweigitterverfahrens nur teilweise entwickelt worden. Es soll deshalb versucht werden, ein ähnliches Verfahren für die verallgemeinerte Gleichung mit einem vereinfachten Glätter zu entwickeln und die Konvergenzanalyse zu vertiefen.

Bei der Mehrzahl der in Anwendungen auftretenden Lyapunov-Gleichungen besitzt die rechte Seite der Gleichung einen sehr niedrigen Rang. Das gilt insbesondere für Gleichungen, denen ein steuerungstheoretisches Problem zugrunde liegt. Diese Struktur ermöglicht die Konstruktion von Niedrigrangverfahren, die die Lösung sehr großer Lyapunov-Gleichungen ermöglichen, da die vollbesetzte Lösungsmatrix in einer komprimierten Form erzeugt wird. Dadurch können sogar Gleichungen gelöst werden, deren explizite Lösung wesentlich mehr Speicher benötigen würde, als zur Verfügung steht. Der Nachteil der in den letzten Jahren entwickelten Niedrigrangverfahren [7, 12, 13, 14, 15, 25] ist deren oft sehr langsame Konvergenz. Auf der anderen Seite sind die bisher entwickelten, schnell konvergierenden Verfahren, z.B. das ADI-Verfahren [27], nicht in der Lage, die Niedrigrangeigenschaft der rechten Seite vorteilhaft auszunutzen. Es liegt deshalb nahe, Niedrigrangvarianten von schnell konvergierenden Lösungsverfahren zu konstruieren.

Literaturverzeichnis

[1] R. Bartels and G. Stewart. Solution of the matrix equation $AX + XB = C$: Algorithm 432. *Comm. ACM*, 15:820–826, 1972.

[2] M. Bollhöfer. Algebraic domain decomposition. Dissertationsschrift, TU Chemnitz, Fak. f. Mathematik, März 1998.

[3] M. Bollhöfer and V. Mehrmann. Nested divide & conquer concepts for the solution of large sparse linear systems. Preprint SFB393/98_05, TU Chemnitz, Fak. f. Mathematik, 1998. in Vorbereitung.

[4] L. Elsner, C. He, and V. Mehrmann. Minimizing the condition number of a positive definite matrix by completion. *Numer. Math.*, 69:17–24, 1994.

[5] L. Elsner, C. He, and V. Mehrmann. Minimization of the norm, the norm of the inverse and the condition number of a matrix by completion. *Numer. Lin. Alg. w. Appl.*, 2(2):155–171, 1995.

[6] C. Farhat. A simple and efficient automatic FEM domain decomposer. *Computers and Structures*, 28(5):579–602, 1988.

[7] T. Gudmundsson and A. Laub. Approximate solution of large sparse Lyapunov equations. *IEEE Trans. Automat. Control*, 39:1110–1114, 1994.

[8] S. Hammarling. Numerical solution of the stable, non-negative definite Lyapunov equation. *IMA J. Numer. Anal.*, 2:303–323, 1982.

[9] C. He and V. Mehrmann. Stabilization of large linear systems. In M. Karny and K. Warwick, editors, *Proceedings of the IEEE Workshop, Prague, September 1994*, pages 91–101, 1994.

[10] B. Hendrickson and R. Leland. A multilevel algorithm for partitioning graphs. Technical Report SAND93-1301, Sandia National Laboratories, 1993.

[11] B. Hendrickson and R. Leland. An improved spectral graph partitioning algorithm for mapping parallel computations. *SIAM J. Sci. Comp.*, 16(2):452–469, 1995.

[12] A. Hodel and K. Poolla. Heuristic approaches to the solution of very large sparse Lyapunov and algebraic Riccati equations. In *Proc. 27th IEEE Conf. Decis. Cont.*, Austin, TX, December 1988.

[13] A. Hodel, K. Poolla, and B. Tenison. Numerical solution of the Lyapunov equation by the power iteration. *Linear Algebra Appl.*, 236:205–230, 1996.

[14] D. Hu and L. Reichel. Krylov-subspace methods for the Sylvester equation. *Linear Algebra Appl.*, 172:283–313, 1992.

[15] I. Jaimoukha and E. Kasenally. Krylov subspace methods for solving large Lyapunov equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 31:227–251, 1994.

[16] B. Kågström and P. Poromaa. LAPACK-style algorithms and software for solving the generalized Sylvester equation and estimating the separation between regular matrix pairs. *ACM Trans. Math. Software*, 22:78–103, 1996.

[17] G. Karypis and V. Kumar. A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs. Technical Report 95–035, University of Minnesota, Dept. of Computer Science, 1995.

[18] B. Kernigan and S. Lin. An efficient heuristic procedure for partitioning graphs. *The Bell System Technical Journal*, 29(2):291–307, 1970.

[19] V. Mehrmann. Divide & conquer methods for block tridiagonal systems. *Parallel Comput.*, 19:257–279, 1993.

[20] V. Mehrmann. A step towards a unified theory for continuous and discrete time control problems. *Linear Algebra Appl.*, 241-243:749–779, 1996.

[21] T. Penzl. Numerical solution of generalized Lyapunov equations. *Advances in Comp. Math.*, 8:33–48, 1998.

[22] T. Penzl. Numerische Lösung großer Lyapunov-Gleichungen. Dissertationsschrift, TU Chemnitz-Zwickau, Fak. f. Mathematik, 1998. In Vorbereitung.

[23] A. Pothen, H. Simon, and K.-P. Liou. Partitioning sparse matrices with eigenvectors of graphs. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 11(3):430–452, July 1990.

[24] I. Rosen and C. Wang. A multi-level technique for the approximate solution of operator Lyapunov and algebraic Riccati equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 32:514–541, 1995.

[25] Y. Saad. Numerical solution of large Lyapunov equations. In M. Kaashoek, J. V. Schuppen, and A. Ran, editors, *Signal Processing, Scattering, Operator Theory and Numerical Methods*, pages 503–511. Birkhäuser, Boston, MA, 1990.

[26] L. N. Trefethen. Pseudospectra of matrices. In D. Griffiths and G. Watson, editors, *Numerical Analysis 1991*, pages 234–266. Longman Sci. Tech. Publ., 1992.

[27] E. Wachspress. Iterative solution of the Lyapunov matrix equation. *Appl. Math. Lett.*, 1:87–90, 1988.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe Algebraische Entkopplungs– und 'divide and conquer'–Strategien

Im Rahmen der Dissertation von M. Bollhöfer [4] ist der Zusammenhang zwischen dem 'divide and conquer'-Ansatz, algebraischen Mehrgittermethoden sowie der Block-ILU-Zerlegung und die Realisierung des 'divide and conquer'-Ansatzes auf einem Parallelrechner untersucht worden. Die Hauptidee beim 'divide and conquer'-Ansatz [5] ist, die Eigenschaften des resultierenden Kopplungssystems dadurch zu verbessern, daß man adaptiv einen Vorkonditionierer für das Ausgangssystem konstruiert und dabei gleichzeitig den Rang der Restmatrix reduziert. Damit erhält man im Extremfall, falls ein iterativer Löser versagt, ein direktes Verfahren. Die Untersuchungen von Herrn Bollhöfer [2, 3, 4] zeigen, daß man diesen Ansatz als Schur-Komplement-Methode für ein erweitertes System interpretieren kann. Über diesen Zusammenhang erhält man dann den direkten Zusammenhang mit Gebietszerlegungsmethoden und algebraischem Multigrid und kann damit auch die dort gewonnene Konvergenztheorie einsetzen. Zur parallelen Realisierung des 'divide and conquer'-Ansatzes sind blockdiagonale Zerlegungen untersucht worden. Hierbei wurde gezeigt, daß Modifikationen des blockdiagonalen Anteils zur Verbesserung der Eigenschaften des Kopplungssystems auf approximative Lösungen von algebraischen Riccati–Gleichungen führen. Für den symmetrischen Fall sind optimale Modifikationen im Sinne quadratischer Formen hergeleitet worden, während im allgemeinen Fall noch eine Reihe von Fragen offen sind.

Beispiel [4],pp.134–135. *Matrix* **LANPRO/NOS2** *aus der Harwell–Boeing–Sammlung.*

Vergleich der Konditionszahlen des Kopplungssystems S_c bei modifizierter Blockdiagonale und der Ausgangsmatrix, vorkonditioniert durch die (unmodifzierte) Blockdiagonale S_J für p Diagonalblöcke.

$\kappa_2 \setminus p$	*2*	*4*	*8*	*16*	*32*	*64*
$\kappa_2(S_J^{-1}A)$	$8.4{\cdot}10^6$	$8.1{\cdot}10^8$	$1.6{\cdot}10^9$	$3.1{\cdot}10^9$	$5.9{\cdot}10^9$	$1.1{\cdot}10^{10}$
$\kappa_2(S_c)$	$4.0{\cdot}10^0$	$7.2{\cdot}10^1$	$1.2{\cdot}10^3$	$2.0{\cdot}10^4$	$3.2{\cdot}10^5$	$2.8{\cdot}10^6$

Vergleich der flops bei Anwendung des CG–Verfahrens auf das Kopplungssystem S_c sowie das vorkonditionierte System $S_J^{-1}A$.

flops \ p	*2*	*4*	*8*	*16*	*32*	*64*
$S_J^{-1}A$	$3.9{\cdot}10^5$	$1.3{\cdot}10^6$	$3.8{\cdot}10^6$	$1.2{\cdot}10^7$	$3.3{\cdot}10^7$	$6.8{\cdot}10^7$
S_c	$7.7{\cdot}10^4$	$9.0{\cdot}10^4$	$1.3{\cdot}10^5$	$2.8{\cdot}10^5$	$1.3{\cdot}10^6$	$6.9{\cdot}10^6$

Der Mehraufwand für die Konstruktion der modifizierten Blockdiagonale wird kompensiert durch das besser konditionierte System und die geringere Iterationszahl.

Zur Implementation auf einem Parallelrechner ist ein Modell entwickelt worden, welches auf der Verwendung überlappender und addierender (oder konsistenter und inkonsistenter) Vektoren basiert, welches schon bei Gebietszerlegungsmethoden für partielle Differentialgleichungen eingesetzt wird. Hier handelt es sich allerdings um ein rein algebraisches Modell, basierend auf dem Graphen der Ausgangsmatrix.

Das parallele Modell ist auf den Fall der geschachtelten 'divide and conquer' Strategie verallgemeinert worden. Durch Bündeln der einzelnen Aufdatierungen wird eine wesentliche Reduktion der Kommunikationsschritte bewirkt.

Beispiel [4],pp.152–155. *Wir betrachten die Matrix* **LANPRO/NOS1** *aus der Harwell–Boeing–Sammlung. Für $A = I \otimes T + T \otimes I$, wobei T die Matrix* **LANPRO/NOS1** *bezeichne, vergleichen wir das Block–Jacobi–Verfahren mit dem geschachtelten 'divide and conquer'–Ansatz (D & C) für $p = 2, 4, \ldots, 64$. Die Testrechnungen wurden auf dem Parsytec–GCPP Parallelrechner in Chemnitz durchgeführt.*

Anzahl Iterationen für das cg–Verfahren

p	*2*	*4*	*8*	*16*	*32*	*64*
$S_J^{-1}A$	43	842	2041	2577	3000	3436
Geschachteltes D & C	46	121	124	206	397	529

Zeit [sec] für Lösung eines Gleichungssystems mit cg–Verfahren

p	*2*	*4*	*8*	*16*	*32*	*64*
Block–Jacobi	91.17	348.00	420.91	254.60	159.75	134.53
Geschachteltes D & C	51.96	156.25	76.93	50.62	46.77	39.45

Die Zahl der Iterationen für das geschachtelte 'divide and conquer' ist deutlich geringer als für das Block–Jacobi–Verfahren. Zusätzlich wird das Kopplungssystem während des Prozesses sukzessive in seiner Dimension reduziert. Für größere Prozessorzahlen nimmt die Kommunikation wesentliche Zeit ein und überdeckt teilweise die Verbesserung des arithmetischen Anteils. Die parallele Lösung wird hier dadurch beeinträchtigt, daß das Kopplungssystem mit zunehmender Prozessorenzahl schnell wächst.

Im Rahmen seiner Dissertation [24] beschäftigt sich Herr Schrader mit der Frage, welche Diskretisierungsverfahren die Invers-Isotonie spezieller Klassen von Randwertaufgaben auf die diskrete Aufgabe übertragen. Für Randwertprobleme für lineare, gewöhnliche Differentialgleichungen hat sich herausgestellt, daß exponentiell angepaßte Verfahren, die auf der exakten Diskretisierung eines approximierenden Problems beruhen, unabhängig von dem gewählten Gitter stets auf M-Matrizen führen. Dieser Ansatz wurde deshalb als Ausgangspunkt gewählt, um für Probleme mit nichtlinearen Differentialgleichungen Diskretisierungsverfahren zu entwickeln, die unabhängig vom gewählten Gitter auf M-Funktionen führen. Dabei wurde nachgewiesen, daß nur lokal teilweise exponentiell angepaßte Verfahren diese Forderung im allgemeinen erfüllen.

Desweiteren hat Herr Schrader untersucht, wie die M-Eigenschaft zur effizienten Lösung der entstehenden Gleichungssysteme mittels asynchroner Iterationsverfahren auf Parallelrechnern ausgenutzt werden kann. Dabei konnte er insbesondere für das Jacobi-Newton-Verfahren die Konvergenz nachweisen, [22], [23]. Die Testrechnungen zeigen, daß asynchrone Iterationsverfahren im Vergleich mit den entsprechenden synchronen Methoden ca. 10 – 20% der Rechenzeit einsparen können. Das reicht jedoch nicht, um den Nachteil dieser einfachen Iterationsverfahren (lineare Konvergenz) wettmachen zu können.

2.4.2 Teilaufgabe Algebraische Graphenzerlegung

Für diese algebraischen Methoden ist es nötig, den Graphen der Ausgangsmatrix geeignet zu zerlegen. Das Finden der optimalen Zerlegung ist ein NP-vollständiges Problem und damit schon für mittelgroße Probleme nicht mehr in akzeptabler Zeit lösbar. Deswegen wurden von U. Elsner verschiedene Heuristiken untersucht [7], die auch für große Probleme eine annähernd optimale Lösung in akzeptabler Zeit liefern.

Verschiedene Ansätze wie Spektralmethoden, graphentheoretische Ansätze und Multilevel-Methoden wurden untersucht. Sie unterscheiden sich sehr, sowohl in der Qualität der Ergebnisse als auch in der Ausführungszeit. Einige Beispiele finden sich in Tabelle 2.1. (Das Netz barth5 ist ein zweidimensionales FE-Netz einer Tragfläche mit 15060 Knoten und 45878 Kanten.)

Einige der Methoden arbeiten mit Zufallswerten, deswegen wird in den Tabellen der Mittelwert von 20 Läufen angegeben. Dabei können z. T. große Unterschiede in der Qualität des Ergebnisses auftreten

Zusätzlich zu den aufwendigeren algebraischen Partitionierungsmethoden wie spektrale Bi–, Quadri– und Oktasektion [20, 10] (bezeichnet mit „Spectral(2), Spectral(4), Spectral(8)“) und Multilevel-Methoden [9, 12] werden auch die Ergebnisse für einige einfachere Methoden, die z. T. Wissen über die geometrische Verteilung der Knoten erfordern, betrachtet. Dieses zusätzliche Wissen ist zwar nicht immer gegeben, wenn es aber vorhanden ist (wie z. B. bei vielen physikalischen Problemen), ermöglicht es oft eine recht effektive Lösung des Problems. Bei „Linear“ werden die Knoten der Reihenfolge nach aufgeteilt, d.h., die ersten n/p Knoten in die erste Partition, die zweiten n/p Knoten in die zweite, usw. Bei „Rand.“ werden die Knoten zufällig auf die verschiedenen Partitionen verteilt. Bei „Coord.“ werden die Knoten rekursiv orthogonal zu den Koordinatenachsen halbiert. „Inertial“ steht für die inertiale Bisektion [19]. Bei mit „K/L“ gekennzeichneten Verfahren wurde auf das Ergebnis zusätzlich der Algorithmus von Kernigan und Lin [13] angewendet, der eine bereits vorhandene Partition “lokal” verbessert.

	Graph: barth5						
	2	4	8	16	32	64	128
Linear	812	2000	2990	4442	6769	10641	16929
Linear + K/L	199	464	903	1443	2228	3412	5127
Rand. + K/L	1524	1826	2643	3243	4051	5379	7079
Coord.	230	594	1153	1950	3009	4445	6131
Coord. + K/L	200	576	1130				
Inertial	245	897	1441	2267	3138	4257	5840
Inertial + K/L	201	485	922	1394	2068	3158	4755
Spectral(2)	187	513	866	1400	2106	3207	4922
Spectral(2) + K/L	163	433	726	1228	1886	2964	4612
Spectral(4) + K/L		490	732	1281	1904	3162	4684
Spectral(8) + K/L			1126	1464	2181	3489	4884
Multilevel K/L	156	388	657	1108	1803	2932	4574

Tabelle 2.1: cutsize bei verschiedenen Partitionsmethoden

Es stellt sich heraus, daß von den algebraischen Methoden die Multilevel-K/L Methode um einiges schneller ist als die verschiedenen spektralen Methoden. Wenn geometrische Inwqœ:wq formationen vorhanden sind, kann die inertiale Bisektion eine schnelle Alternative sein.

2.4.3 Teilaufgabe Gleichungssysteme mit Kronecker-Produkt-Struktur

Ein auf dem Verfahren von Rosen und Wang [21] basierendes Mehrgitterverfahren für eine Klasse verallgemeinerter Lyapunov-Gleichungen, die aus der Diskretisierung partieller Differentialgleichungen hervorgeht, wurde in [16, 18] vorgestellt. Die Konvergenzrate des Zweigitterverfahrens wurde analytisch abgeschätzt. Es konnte gezeigt werden, daß für die Konvergenzrate eine Schranke existiert, die unabhängig von der Feinheit der Diskretisierung der zugrundeliegenden partiellen Differentialgleichung ist.

Die Konvergenzgeschwindigkeit des Mehrgitterverfahrens wurde in numerischen Experimenten untersucht. Diese Experimente deuten an, daß sogar für den V-Zyklus eine Schranke für die Konvergenzrate existiert, die unabhängig vom Diskretisierungsparameter ist. In Tabelle 2.2 werden die Testresultate des V-Zyklus für das in [21] beschriebene Modellproblem angegeben. Dabei bezeichnet l_{max} die Anzahl der Level des Mehrgitterverfahrens und n die Ordnung der Gleichung des feinsten Gitters. Es werden ν_1 und ν_2 Schritte der Richardson-Iteration zur Vor- bzw. Nachglättung verwendet.

Eine interessante Alternative zu Multigridverfahren stellen die Niedrigrangverfahren dar, falls die rechte Seite der Gleichung einen niedrigen Rang besitzt. Aufgrund der kompakten, impliziten Darstellungsform der im allgemeinen dicht besetzten Lösungsmatrix lassen sich in diesem Fall sogar Lyapunov-Gleichungen von einer

l_{max}	n	$\nu_1 = 1$ $\nu_2 = 0$	$\nu_1 = 1$ $\nu_2 = 1$	$\nu_1 = 2$ $\nu_2 = 0$
4	23	21	13	15
5	47	22	14	16
6	95	23	14	17
7	191	24	14	18
8	383	25	15	19

Tabelle 2.2: Anzahl der Iterationsschritte in Abhängigkeit der Anzahl der Level und Glättungsschritte.

sehr hohen Ordnung betrachten, die eine explizite Bildung der Lösungsmatrix aus Speichergründen nicht mehr zuließe. Durch Kombination des Niedrigranganasatzes mit dem ADI-Verfahren [15, 28] und dem Smith-Verfahren [25] wurde das schnell konvergierende Niedrigrangverfahren LR-Smith(l) (Cyclic Low Rank Smith Method) [17, 18] entwickelt. Dieses Verfahren benötigt eine Menge von l verschiedenen suboptimalen ADI-Parametern. Für den Fall eines reellen Spektrums der Koeffizientenmatrix, sowie einige Spezialfälle komplexer Spektren existieren approximationstheoretische Ansätze für dieses Problem, z.B. [6, 26, 27, 29, 30]. Der Nachteil dieser Ansätze ist, daß die Kenntnis gewisser Spektrumsgrenzen vorausgesetzt wird. In [17, 18] wird ein heuristischer Algorithmus für das ADI-Parameter-Problem vorgeschlagen, der sämtliche Informationen über die algebraischen Eigenschaften der Koeffizientenmatrix aus dem Arnoldi-Prozess bezieht. Die Kombination dieser Heuristik mit dem LR-Smith(l)-Verfahren liefert somit letztlich einen "Black-Box"-Löser für große, stabile Lyapunov-Gleichungen mit der Niedrigrangeigenschaft der rechten Seite. Darüber hinaus wird in [17, 18] anhand von zwei Beispielen gezeigt, daß die sorgfältige Integration von LR-Smith(l) in steuerungstheoretische Algorithmen auch die Komplexität des gesamten Verfahrens deutlich verbessern kann.

Die hohe Effizienz von LR-Smith(l) soll an drei Testbeispielen (TB) verdeutlicht werden. Die Testbeispiele 1 und 2 sind [11, Ex. 4.5 bzw. Ex. 4.1] entnommen, während das Testbeispiel 3 [14] aus der Chromatographie stammt. Die Testbeispiele besitzen die für Lyapunov-Gleichungen äußerst hohen Ordnungen 10000, 1200 bzw. 3600, was beispielsweise im ersten Fall einem Gleichungssystem mit 100 Millionen Unbekannten entspricht. Tabelle 2.3 gibt an, wieviele Iterationen und Flops jeweils benötigt wurden, um Näherungslösungen zu erzielen, deren relative Residuennormen kleiner sind als 10^{-3}, 10^{-6}, 10^{-9} bzw. 10^{-12}.

Insbesondere anhand des Testbeispiels 1, welches das größte der drei Beispiele ist, wird deutlich, daß LR-Smith(l) einen äußerst vielversprechenden Zugang zur Lösung sehr großer Lyapunov-Gleichungen darstellt. Vergleicht man die Testresultate mit Aufwandsschätzungen für die direkten Standardverfahren [1, 8], dann ergibt sich, daß letztere für dieses Beispiel ungefähr das 50000-fache an Rechenoperationen und das 140-fache an Speicherplatz benötigen würden!

	Iter. f. Res.normen				Flops für Residuennormen			
TB	10^{-3}	10^{-6}	10^{-9}	10^{-12}	10^{-3}	10^{-6}	10^{-9}	10^{-12}
1	10	20	30	90	8.5e+06	1.8e+07	2.8e+07	8.8e+07
2	20	40	120	210	4.2e+07	7.8e+07	2.2e+08	3.8e+08
3	22	55	99	>308	4.5e+08	1.0e+09	1.8e+09	>5.5e+09

Tabelle 2.3: Testergebnisse LR-Smith(l) .

Literaturverzeichnis

[1] R. Bartels and G. Stewart. Solution of the matrix equation $AX + XB = C$: Algorithm 432. *Comm. ACM*, 15:820–826, 1972.

[2] M. Bollhöfer. Algebraic domain decomposition. Preprint SPC 95_11, TU Chemnitz-Zwickau, Fak. f. Mathematik, März 1995.

[3] M. Bollhöfer. Algebraic domain decomposition. In O. Axelsson and B. Polman, editors, *Proceedings of the Conference on Algebraic Multilevel Iteration Methods with Applications*, pages 91–104, 1996.

[4] M. Bollhöfer. Algebraic domain decomposition. Dissertationsschrift, TU Chemnitz, Fak. f. Mathematik, März 1998.

[5] M. Bollhöfer and V. Mehrmann. Nested divide & conquer concepts for the solution of large sparse linear systems. Preprint SFB393/98_05, TU Chemnitz, Fak. f. Mathematik, 1998. in Vorbereitung.

[6] N. Ellner and E. Wachspress. Alternating direction implicit iteration for systems with complex spectra. *SIAM J. Numer. Anal.*, 28:859–870, 1991.

[7] U. Elsner. Graph partitioning: A survey. Preprint SFB 393/97_27, TU Chemnitz, 1997.

[8] S. Hammarling. Numerical solution of the stable, non-negative definite Lyapunov equation. *IMA J. Numer. Anal.*, 2:303–323, 1982.

[9] B. Hendrickson and R. Leland. A multilevel algorithm for partitioning graphs. Technical Report SAND93-1301, Sandia National Laboratories, 1993.

[10] B. Hendrickson and R. Leland. An improved spectral graph partitioning algorithm for mapping parallel computations. *SIAM J. Sci. Comp.*, 16(2):452–469, 1995.

[11] A. Hodel, K. Poolla, and B. Tenison. Numerical solution of the Lyapunov equation by the power iteration. *Linear Algebra Appl.*, 236:205–230, 1996.

[12] G. Karypis and V. Kumar. A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs. Technical Report 95–035, University of Minnesota, Dept. of Computer Science, 1995.

[13] B. Kernigan and S. Lin. An efficient heuristic procedure for partitioning graphs. *The Bell System Technical Journal*, 29(2):291–307, 1970.

[14] E. Kloppenburg and E. D. Gilles. Automatic control of the simulated moving bed process for C_8 aromatics separation using asymptotically exact input/output-linearization. *Journal of Process Control*, 1997. submitted for publication.

[15] D. Peaceman and H. Rachford. The numerical solution of elliptic and parabolic differential equations. *J. Soc. Indust. Appl. Math.*, 3:28–41, 1955.

[16] T. Penzl. A multi-grid method for generalized Lyapunov equations. Preprint SFB393/97_24, TU Chemnitz, 1997. Eingereicht zur Veröffentlichung bei Numerische Mathematik.

[17] T. Penzl. A cyclic low rank Smith method for large, sparse Lyapunov equations with applications in model reduction and optimal control, 1998. In Vorbereitung.

[18] T. Penzl. Numerische Lösung großer Lyapunov-Gleichungen. Dissertationsschrift, TU Chemnitz-Zwickau, Fak. f. Mathematik, 1998. In Vorbereitung.

[19] A. Pothen. Graph partitioning algorithms with applications to scientific computing. In D. E. Keyes, A. H. Sameh, and V. Venkatakrishnan, editors, *Parallel Numerical Algorithms*. Kluwer Academic Press, 1995.

[20] A. Pothen, H. Simon, and K.-P. Liou. Partitioning sparse matrices with eigenvectors of graphs. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 11(3):430–452, July 1990.

[21] I. Rosen and C. Wang. A multi-level technique for the approximate solution of operator Lyapunov and algebraic Riccati equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 32:514–541, 1995.

[22] U. Schrader. Convergence of asynchronous Jacobi-Newton-iterations. *Z. Angew. Math. Mech.*, 76(Suppl. 1):525–526, 1996. (Proceedings of ICIAM/GAMM 95, Numerical Analysis, Scientific Computing, Computer Science).

[23] U. Schrader. Convergence of asynchronous jacobi-newton-iterations. Preprint SFB393/97_03, TU Chemnitz-Zwickau, Februar 1997. Eingereicht zur Veröffentlichung bei Numerical Linear Algebra with Applications.

[24] U. Schrader. *Invers-isotone Diskretisierungen von Zwei-Punkt-Randwertaufgaben.* Dissertationsschrift, TU Chemnitz-Zwickau, Fak. f. Mathematik, 1998. In Vorbereitung.

[25] R. Smith. Matrix equation $XA + BX = C$. *SIAM J. Appl. Math.*, 16, 1968.

[26] G. Starke. Optimal alternating direction implicit parameters for nonsymmetric systems of linear equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 28:1431–1445, 1991.

[27] E. Wachspress. The ADI minimax problem for complex spectra. *Appl. Math. Lett.*, 1:311–314, 1988.

[28] E. Wachspress. Iterative solution of the Lyapunov matrix equation. *Appl. Math. Lett.*, 1:87–90, 1988.

[29] E. Wachspress. The ADI minimax problem for complex spectra. In D. Kincaid and L. Hayes, editors, *Iterative Methods for Large Linear Systems*, pages 251–271. Academic Press, San Diego, 1990.

[30] E. Wachspress. The ADI model problem, 1995.

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Ein Folgeprojekt ist beantragt, siehe den Neuantrag zu diesem Punkt.