

# Zusammenfassung

In dieser Arbeit betrachten wir sequentielle und parallele Algorithmen zur schnellen Faktorisierung großer, dünn besetzter, positiv definitiver Matrizen mit reellen Koeffizienten. Aufgrund ihrer hohen praktischen Bedeutung stehen Algorithmen zur Berechnung einer „möglichst guten“ Pivotreihenfolge im Mittelpunkt der Arbeit.

Kapitel 1 motiviert die Betrachtung direkter Lösungsverfahren für dünn besetzte Gleichungssysteme. Während die Konvergenzgeschwindigkeit eines iterativen Verfahrens von den numerischen Eigenschaften der Koeffizientenmatrix  $A$  abhängt, wird die Effizienz eines direkten Verfahrens lediglich von der Besetzungsstruktur der Matrix  $A$  beeinflusst.

In Kapitel 2 stellen wir zunächst zwei elementare Verfahren zur Berechnung der Faktormatrix  $L$ ,  $A = LL^T$ , vor. Beide Verfahren sind numerisch äquivalent, d. h. sie führen die gleiche Anzahl von Multiplikations- und Additionsoperationen aus. Die Verfahren unterscheiden sich lediglich in der Reihenfolge der Operationen. Anschließend zeigen wir, wie der bei der Faktorisierung entstehende Fill-in graphentheoretisch beschrieben werden kann. Die grundlegende Idee besteht darin, die Auffüllung von  $A$  durch eine Folge von Eliminationsgraphen zu modellieren. Nahezu alle aus der Literatur bekannten Methoden zur Minimierung des Fill-in basieren auf dieser graphentheoretischen Beschreibung. Schließlich stellen wir die drei grundlegenden Ordering-Methoden vor. Es handelt sich um die Profil-, die Bottom-up- und die Top-down-Methode.

In Kapitel 3 untersuchen wir Ordering-Verfahren für Matrizen, deren Nichtnullstruktur einen gitterförmigen Graphen induziert. Diese Matrizen spielen in der numerischen Praxis eine große Rolle. Wir präsentieren eine leichte Modifikation des bekannten Nested-Dissection-Verfahrens von George. Durch diese Modifikation kann der bei der Faktorisierung eines  $n \times n$ -Gitters entstehende Fill-in um fast die Hälfte reduziert werden. Gleiches gilt für die Anzahl der Multiplikations- und Additionsoperationen, die zur Berechnung der Faktormatrix benötigt werden. Anhand einer genauen Analyse des modifizierten Nested-Dissection-Verfahrens zeigen wir, daß die Güte eines Orderings ganz entscheidend von der „Form“ der Gebiete abhängt, die im Laufe des Eliminationsprozesses entstehen.

In Kapitel 4 präsentieren wir ein neues Ordering-Verfahren für beliebige Graphen. Charakteristisch für das Verfahren ist eine enge Koppelung zwischen Bottom-up- und Top-down-Methoden. Dabei werden die im Rahmen eines Top-down-Verfahrens konstruierten Knotenseparatoren als Ränder der von einem unvollständigen Bottom-up-Ordering gebildeten Gebiete interpretiert. Die Motivation besteht darin, die Schwächen der einen Methode durch die Stärken der anderen auszuräumen. Dies geschieht in zwei Schritten: Zum einen benutzen wir Bottom-up-Techniken zur Konstruktion der Knotenseparatoren. Dazu entwickeln wir ein neuartiges Multilevel-Verfahren, bei dem spezielle Knotenauswahlstrategien zur Schrumpfung eines Graphen eingesetzt werden. Zum anderen benutzen wir die Knotenseparatoren als ein „Gerüst“ zur Generierung und Evaluierung eines weiten Spektrums von Bottom-up-Orderings. Aus diesem Spektrum kann dann das beste Ordering ausgewählt werden. Im Vergleich zu einem reinen Bottom-up-Algorithmus reduziert sich so die Anzahl der zur Berechnung von  $L$  benötigten Multiplikations- und Additionsoperationen um durchschnittlich 42 %. Da der Aufwand zur Berechnung von  $L$  den Aufwand zur Lösung eines Gleichungssystems dominiert, führt dies zu einer signifikanten Beschleunigung des direkten Lösungsverfahrens.

In Kapitel 5 beschreiben wir sequentielle und parallele Algorithmen zur Durchführung der symbolischen und numerischen Faktorisierung. Im sequentiellen Fall gehen wir insbesondere auf Techniken zur Steigerung der Cache- und Registereffizienz ein. Der von uns implementierte Faktorisierungsalgorithmus basiert auf der von Duff und Reid entwickelten Multifrontal-Methode. Um die von modernen Hochleistungsrechner bereitgestellte Floating-Point-Leistung voll nutzen zu können, benutzt der Faktorisierungsalgorithmus einen auf BLAS 3 Routinen basierenden numerischen Kern. Zur Parallelisierung unseres Faktorisierungsalgorithmus verwenden wir das von Gupta et al. vorgeschlagene zweidimensionale Mapping-Schema. Im parallelen Fall steht die Minimierung des Kommunikations-Overheads im Vordergrund. Anhand zweier Beispiele zeigen wir, daß die mit Hilfe des neuen Verfahrens berechneten Orderings auch für die parallele Faktorisierung geeignet sind und sehr gute Ergebnisse liefern.

In Kapitel 6 fassen wir die in dieser Arbeit vorgestellten Methoden zur effizienten Lösung dünn besetzter, positiv definiter Gleichungssysteme zusammen und diskutieren einige ungelöste Probleme.