ulm university universität
uulm

Fakultät für Mathematik und Wirtschafts-wissenschaften

Institut für Numerische Mathematik

Cache-optimierte QR-Zerlegung

Bachelorarbeit an der Universität Ulm

Vorgelegt von:
Florian Krötz
florian.kroetz@uni-ulm.de

Gutachter:
Dr. Michael Lehn
Dr. Andreas Borchert

Betreuer:
Dr. Michael Lehn

2018

Fassung 26. August 2018

Satz: PDF-LaTeX 2ε

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Als QR-Zerlegung bezeichnet man die Zerlegung der Matrix A in eine orthogonale Matrix Q und eine obere Dreiecksmatrix R.

$$A = Q \cdot R$$

In dieser Arbeit wird die Berechnung der QR-Zerlegung mittels Householder-Transformation betrachtet.

Neben der Householder-Transformation kann die QR-Zerlegung auch mittels Givens-Rotationen oder mit dem Gram-Schmidtschen Orthogonalisierungsverfahrens berechnet werden.

Die QR-Zerlegung bietet folgende Möglichkeiten:

- Gleichungssysteme mit schlechter Kondition lassen sich mittels QR-Zerlegung stabiler als mit dem Gausschen Eliminationsverfahren (LR-Zerlegung) lösen.
- Lösen von linearen Ausgleichsproblemen durch die Methode der kleinsten Fehlerquadrate.
- Berechnung von Eigenwerten einer Matrix mittels QR-Verfahren. Im QR-Verfahren ist die QR-Zerlegung eine Kernoperation, da in jedem Iterationsschritt eine QR-Zerlegung berechnet wird.

Weil die QR-Zerlegung bei den aufgezählten Problemen häufig verwendet wird, empfiehlt es sich, die Berechnung der OR-Zerlegung zu optimieren.

Um die Prozessorkapazität optimal zu nutzen, ist es sinnvoll, die QR-Zerlegung mit einem cache-optimierten Algorithmus zu berechnen. Dadurch ist es möglich, die angegebene Maximalleistung des Prozessors zu erreichen.

Cache-Optimierung

Der Cache ist ein schneller Datenspeicher. Daten, die vom Prozessor verarbeitet werden sollen, müssen immer zuerst in den Cache geladen werden. Der Zugriff auf Daten, die im RAM liegen, dauert sehr viel länger als der Zugriff auf Daten, die im Cache liegen. Aus diesem Grund ist es sinnvoll, die Algorithmen so zu gestalten, dass eine optimale Übertragung erfolgt.

Ziele der Cache-Optimierung:

- Mehrfaches Laden von Daten soll vermieden werden.
- Die Daten müssen in der Reihenfolge, in der sie verwendet werden, im RAM liegen.
- Sequentiell im RAM liegende Daten werden durch Prefetching effizient in den Cache geladen.

Prefetching ist die Eigenschaft des Prozessors, Zugriffsmuster auf den Speicher zu erkennen und vorherzusagen.

Intel MKL

Die Intel MKL (Math Kernel Library) [2] ist eine Bibliothek der Firma Intel, in welcher mathematische Funktionen enthalten sind. Die MKL implementiert diese Funktionen sehr effizient, damit der Prozessor die angegebene theoretische Maximalleistung erreichen kann.

In der MKL sind die beiden Programmbibliotheken BLAS (Basic Linear Algebra Subprogramms) und LAPACK (Linear Algebra Package) implementiert. Diese Funktionen aus der Teilmenge der linearen Algebra sind für die Berechnung der QR-Zerlegung elementar erforderlich.

BLAS enthält grundlegende und LAPACK weiterentwickelte Funktionen der linearen Algebra.

Ziel der Arbeit

Ein einfacher QR-Algorithmus wie man ihn aus Numerik 1 [6] kennt, erreicht auf modernen Prozessoren nicht die theoretische Maximalleistung. Ziel dieser Arbeit ist es, einen Algorithmus zu beschreiben, der die Prozessorkapazität besser nutzt und diesen Algorithmus an die BLAS-Schnitstelle anzupassen.

2 BLAS

Die Abkürzung BLAS steht für Basic Linear Algebra Subprograms. BLAS-Bibliotheken enthalten elementare Operationen der linearen Algebra.

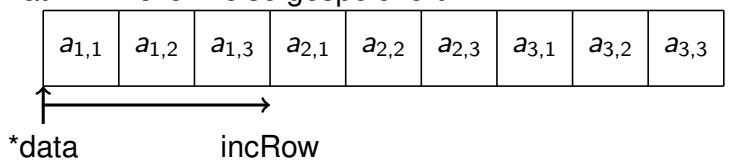
Hier werden einige Aspekte von BLAS beschrieben, die zur Berechnung der QR-Zerlegung notwendig sind.

2.1 Datenstruktur für Matrizen

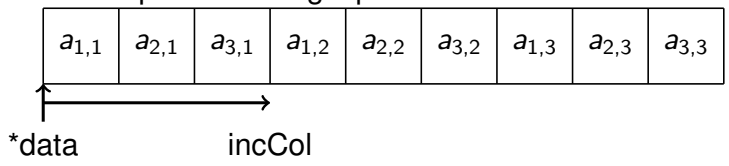
Vollbesetzte Matrizen werden bei BLAS entweder zeilen- oder spaltenweise abgespeichert. Das bedeutet, dass entweder die Zeilen- oder die Spalten der Matrix hintereinander im Speicher stehen.

$$A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3\times 3}$$

Matrix A Zeilenweise gespeichert:



Matrix A Spaltenweise gespeichert:



Eine Datenstruktur benötigt folgende Elemente:

- einen Zeiger auf eine Speicherfläche
- Information, ob die Matrix zeilen- oder spaltenweise gespeichert ist
- die Dimension der Matrix.

Eine derartige Datenstruktur könnte in C/C++ so aussehen.

```
1 struct Matrix {
2   double * data;
3   std::ptrdiff_t incRow, incCol;
4   std::size_t numRows, numCols;
5 }
```

Diese Datenstruktur ist für Matrixeinträge vom Type double. Die Variablen für die Speicherverwaltung (Zeile 3) sind vom Typ *ptrdiff_t* und die Variablen für die Dimensionsinformationen sind vom Typ *size_t*. *ptrdiff_t* und *size_t* sind Datentypen für ganze Zahlen. Die Datentypen unterscheiden sich folgendermaßen: *size_t* kann nur Werte darstellen die ≥ 0 sind, *ptrdiff_t* kann auch negative Werte darstellen. Negative Werte von *incRow* und *incCol* können nützlich sein, falls die Daten nicht aufsteigend sondern absteigend im Speicher liegen (siehe Beispiel) [10].

Für Intel-MKL-Routinen müssen die Matrizen zeilenweise gespeichert sein. Das bedeutet *incCol* ist gleich 1.

Beispiel

Angenommen, es wurde genügend Speicher für eine Matrix A belegt und die Werte 1 bis 25 liegen hintereinander im Speicher. Dann lässt sich die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 6 & 7 & 8 & 9 & 10 \\ 11 & 12 & 13 & 14 & 15 \\ 16 & 17 & 18 & 19 & 20 \\ 21 & 22 & 23 & 24 & 25 \end{pmatrix}$$

durch die folgende Datenstruktur repräsentieren.

```
1 struct Matrix A;
2 A.data = /*pointer to data*/;
3 A.numRows = 5;
4 A.numCols = 5;
5 A.incRow = A.numCols;
6 A.incCol = 1;
```

Die Matrix B soll den Matrixblock aus A darstellen, welcher in der zweiten Zeile und dritte Spalte beginnt. Zusätzlich soll der Block transponiert betrachtet werden. Die Matrix

$$B = \begin{pmatrix} 8 & 13 & 18 & 23 \\ 9 & 14 & 19 & 24 \\ 10 & 15 & 20 & 25 \end{pmatrix}$$

lässt sich mit folgender Datenstruktur repräsentieren.

```
1 struct Matrix B;
2 B.data = &A.data[ 1*A.incRow + 2*A.incCol ];
3 B.numRows = 3;
4 B.numCols = 4;
5 B.incRow = A.incCol;
6 B.incCol = A.incRow;
```

In Zeile 2 wird der Daten-Zeiger auf das Element der zweiten Zeile und dritten Spalte gesetzt. Um die Matrix zu transponieren, werden die Inkremente vertauscht. Dies geschieht in den Zeilen 5 und 6. In den Zeilen 3 und 4 werden die Matrix-Dimensionen richtig gesetzt.

Die Matrix C soll ein Beispiel für negative Inkremente sein. Sie nutzt denselben Datenspeicher wie die Matrizen A und B, in dem die Werte 1 bis 25 hintereinander im Speicher liegen. Die Matrix

$$C = \begin{pmatrix} 25 & 20 & 15 & 10 \\ 24 & 19 & 14 & 9 \\ 23 & 18 & 13 & 8 \end{pmatrix}$$

lässt sich mit folgender Datenstruktur repräsentieren.

```
1 struct Matrix C;
2 C.data = &B.data[ 2*B.incRow + 3*B.incCol ];
3 C.numRows = B.numRows;
4 C.numCols = B.numCols;
5 C.incRow = -B.incRow;
6 C.incCol = -B.incCol;
```

Der Daten-Pointer wurde auf das letzte Element der Matrix B gesetzt. Die Inkremente werden negativ von der Matrix B übernommen.

Matrizen wie B und C, die den selben Datenspeicher wie A nutzen, werden als Matrixview bezeichnet. [10]

2.2 Einige BLAS-Routinen

Im Folgenden werden einige BLAS-Routinen beschrieben, die bei der QR-Zerlegung benutzt werden. BLAS-Routinen werden nach folgendem Schema benannt: Der erste Buchstabe im Namen gibt an, für welchen Datentyp die Funktion implementiert wurde. Der Rest beschreibt die Funktion.
Beispiel *dgemm*: Das *d* zeigt, dass die Funktion für Doubles gilt und *gemm* steht für *general matrix matrix*. Die Funktion berechnet also das Matrix-Matrix Produkt für Matrizen, deren Einträge *doubles* sind.

2.2.1 Matrix-Matrix Produkt (gemm)

Die Funktion *gemm* berechnet das Matrix-Matrix Produkt. Der Funktion werden die Matrizen A, B und C und die Skalare α und β übergeben. Außerdem werden zwei Flags übergeben, die anzeigen ob die Matrizen A und B transponiert zu betrachten sind.
Die Funktion berechnet

$$C \leftarrow \beta C + \alpha AB \tag{2.1}$$

Falls $\beta = 0$, wird die Matrix C zuerst mit Nullen initialisiert. Falls C Einträge hat, die NaN (*Not a Number*) sind, werden diese mit Nullen überschrieben [10].

2.2.2 Matrix-Vektor Produkt (gemv)

Die Funktion *gemv* berechnet das Matrix-Vektor Produkt. Der Funktion werden die Matrix A, die Vektoren x und y, und die Skalare α und β übergeben. Außerdem wird ein Flag übergeben, das anzeigt, ob die Matrix A transponiert werden soll.
Die Funktion berechnet

$$y \leftarrow \beta y + \alpha Ax \tag{2.2}$$

Falls $\beta = 0$, wird der Vektor y zuerst mit Nullen initialisiert. Falls y Einträge hat, die NaN (*Not a Number*) sind, werden diese mit Nullen überschrieben [10].

2.2.3 Rank1 update (ger)

Die Funktion *ger* berechnet ein dyadisches Produkt aus den Vektoren x und y, skaliert die daraus resultierende Matrix mit α und addiert das Ergebnis auf A.
Der Funktion werden die Matrix A, die Vektoren x und y und das Skalar α übergeben.
Die Funktion berechnet

$$A \leftarrow A + \alpha x y^T \tag{2.3}$$

2.2.4 Matrix-Matrix Produkt (trmm)

Die Funktion *trmm* berechnet das Matrix-Matrix-Produkt einer Dreiecksmatrix mit einer voll besetzten Matrix. Der Funktion werden die Dreiecksmatrix A, die Matrix B und das Skalar α übergeben. Außerdem werden Flags mit übergeben, die anzeigen, ob A eine obere oder untere Dreiecksmatrix ist, ob A eine strikte oder unipotente Dreiecksmatrix ist, ob A von links oder rechts auf B multipliziert werden soll und ob A transponiert werden soll. Diese Eigenschaften werden unten in $op(\cdot)$ zusammengefasst.
Die Funktion berechnet

$$B \leftarrow \alpha \cdot op(A) \cdot B \qquad \text{oder} \qquad B \leftarrow \alpha \cdot B \cdot op(A) \tag{2.4}$$

2.2.5 Matrix-Vektor Produkt (trmv)

Die Funktion *trmv* berechnet das Matrix-Vektor-Produkt für Dreiecksmatrizen. Die Funktion berechnet

$$x \leftarrow \alpha A x \tag{2.5}$$

Dreiecksmatrizen, die von den Funktionen *trmm* und *trmv* verarbeitet werden, sind quadratische Matrizen, von denen nur der obere oder der untere Dreiecksteil betrachtet wird. Das heißt, die Matrix liegt als quadratische Matrix im Speicher. Die Funktion beachtet nur die Einträge über oder unter der Diagonalen. Wird dem Algorithmus mit einem Flag angezeigt, dass er die Matrix als eine unipotente Dreiecksmatrix betrachten soll, dann werden die Diagonaleinträge im Speicher nicht beachtet, sondern vom Algorithmus als 1 angenommen [10].

3 QR-Zerlegung

3.1 Definition

Eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$ besitzt eine eindeutige QR-Zerlegung

$$A = QR \tag{3.1}$$

mit einer orthogonalen Matrix $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ und einer oberen Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$ [6].

Eine QR-Zerlegung kann mit einer Householder-Transformation berechnet werden.

3.1.1 Beispiel für eine Anwendung

Lösung eines Minimierungsproblems

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2^2 \tag{3.2}$$

mit Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $rang(A) = n < m$, für die eine QR-Zerlegung existiert. R besitzt die Gestalt

$$R = \left(\begin{array}{ccc} * & * & * \\ & * & * \\ & & * \\ \hline & 0 & \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \hat{R} \\ \hline 0 \end{array} \right)$$

$\hat{R}$ stellt eine obere Dreiecksmatrix dar. Damit kann man das Minimierungsproblem wie folgt mit $A = QR$ modifizieren

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2^2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Q^T(Ax - b)\|_2^2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Rx - Q^T b\|_2^2 \tag{3.3}$$

Eine Lösung des Gleichungssystems

$$\hat{R}x = Q^T b \tag{3.4}$$

ist auch eine Lösung des Minimierungsproblem (3.2). Da R eine Dreiecksmatrix ist, lässt sich (3.4) leicht durch Rückwärtseinsetzen lösen.

3.2 Householder-Transformation

Eine Matrix $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$

$$H = I - 2\frac{vv^T}{v^T v} \tag{3.5}$$

wird als Householder-Transformation und der Vektor $v \in \mathbb{R}^n$ als Householder-Vektor bezeichnet. I ist die Einheitsmatrix. Eine Householder-Transformation $H = I - 2\frac{vv^T}{v^T v}$ ist orthogonal und symmetrisch [6].
Die Householder-Transformation spiegelt den Vektor x auf die Achse x_1. Dazu multipliziert man H von links auf x

$$Hx = \alpha e_1 \tag{3.6}$$

mit dem Skalar $\alpha \in \mathbb{R}$ und e_1 als ersten kanonischen Einheitsvektor. Der Householder-Vektor steht senkrecht auf der Ebene, an welcher x gespiegelt wird.
Die Abbildung 3.1 veranschaulicht die Spiegelung des Vektors x an der gestrichelt eingezeichneten Ebene auf die Achse x_1.

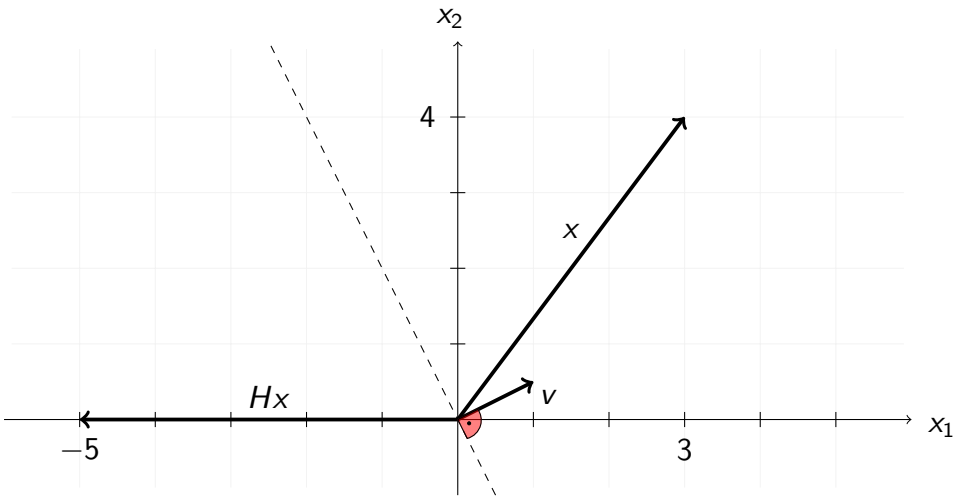


Abbildung 3.1: Beispiel Householder-Transformation mit $x = (3, 4)^T$

Beispiel

Rechnung zu Abbildung 3.1: Der Vektor $x = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$ soll auf die x_1 Achse gespiegelt werden.

Zuerst wird der Householder-Vektor v und der dazugehörige Faktor τ wie in Abschnitt 3.2.1 berechnet.

$$\begin{aligned} \|x\|_2 &= \sqrt{3^2 + 4^2} = 5 \\ \alpha &= -1 \cdot \text{sign}(x_1) \cdot \|x\|_2 = -5 \\ \tau &= \frac{\alpha - x_1}{\alpha} = \frac{-5 - 3}{-5} = \frac{8}{5} \\ v &= \frac{x - \alpha e_1}{x_1 - \alpha} = \frac{\begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -5 \\ 0 \end{pmatrix}}{3 - (-5)} = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 8 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0,5 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Nun wird H auf x angewandt, wie in Kapitel 3.2.1 beschrieben.

$$\begin{aligned} Hx = x - \tau v(v^T x) &= \begin{pmatrix}3\\4\end{pmatrix} - \frac{8}{5} \cdot \begin{pmatrix}1\\0,5\end{pmatrix} \cdot \left(\begin{pmatrix}1\\0,5\end{pmatrix}^T \cdot \begin{pmatrix}3\\4\end{pmatrix} \right) \\ &= \begin{pmatrix}3\\4\end{pmatrix} - \frac{8}{5} \cdot \begin{pmatrix}1\\0,5\end{pmatrix} \cdot 5 = \begin{pmatrix}3\\4\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}8\\4\end{pmatrix} \\ \iff Hx &= \begin{pmatrix}-5\\0\end{pmatrix} \end{aligned}$$

Der Vektor $x = \begin{pmatrix}3\\4\end{pmatrix}$ wurde mit dem Householder-Vektor $v = \begin{pmatrix}1\\0.5\end{pmatrix}$ auf die x_1 Achse gespiegelt.

3.2.1 Householder Vektor

Damit (3.6) gilt, wird der Vektor berechnet, indem man (3.5) in (3.6) einsetzt

$$\begin{aligned} Hx = x - 2\frac{vv^T}{v^T v}x = x - 2\underbrace{\frac{v^T x}{v^T v}}_{\lambda} v = x - \lambda v \stackrel{!}{=} \alpha e_1 \\ \implies v \in \text{span}\{x - \alpha e_1\} \end{aligned}$$

Setzt man $v = t(x - \alpha e_1)$ in $Hx = \alpha e_1$ (3.6) ein, dann erhält man

$$\begin{aligned} Hx =& x - \frac{2}{v^T v} v(v^T x) = x - 2\frac{v^T x}{v^T v} v \\ =& x - 2\frac{t(x-\alpha e_1)^T x}{t(x-\alpha e_1)^T t(x-\alpha e_1)} t(x-\alpha e_1) = x - 2\frac{(x-\alpha e_1)^T x}{(x-\alpha e_1)^T (x-\alpha e_1)}(x-\alpha e_1) \\ =& x - \frac{(x-\alpha e_1)^T x}{\|x-\alpha e_1\|_2^2}(x-\alpha e_1) \\ =& \underbrace{\left(1 - \frac{2(x-\alpha e_1)^T x}{\|x-\alpha e_1\|_2^2}\right)}_{\stackrel{!}{=}0} x + \alpha e_1 \underbrace{\frac{2(x-\alpha e_1)^T x}{\|x-\alpha e_1\|_2^2}}_{\stackrel{!}{=}1} \stackrel{!}{=} \alpha e_1 \end{aligned} \tag{3.7}$$

Damit (3.7) gilt, muss gelten

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{2(x-\alpha e_1)^T x}{\|x-\alpha e_1\|^2} \\ \Leftrightarrow (x-\alpha e_1)^T(x-\alpha e_1) &= 2x^T x - 2\alpha x_1 \\ \Leftrightarrow x^T x - 2\alpha x_1 + \alpha^2 &= 2x^T x - 2\alpha x_1 \\ \Leftrightarrow \alpha &= \pm\sqrt{x^T x} \end{aligned}$$

Das Vorzeichen von $\alpha = \pm\sqrt{x^T x}$ kann man frei wählen, um $v = x - \alpha e_1$ zu berechnen.

Wählt man das Vorzeichen positiv, kann Auslöschung auftreten, falls x annähernd ein positives Vielfaches von e_1 ist.

LAPACK [9] vermeidet die Auslöschung, indem das Vorzeichen entgegengesetzt gewählt wird. Das bedeutet, dass x immer auf die gegenüberliegende Seite gespiegelt wird.

Im Skript von Numerik 1 [6] wird das Vorzeichen immer positiv gewählt:
$\alpha = |\sqrt{x^T x}| = \|x\|_2$. Eine mögliche Auslöschung im Fall $x_1 > 0$ wird hier durch die folgende Umformung vermieden.

$$v_1 = x_1 - \|x\|_2 = \frac{x_1^2 - \|x\|_2^2}{x_1 + \|x\|_2} = \frac{-(x_2^2 + \ldots + x_n^2)}{x_1 + \|x\|_2}$$

Um den Vektor v später auf der frei werdenden Diagonalen von A speichern zu können, wird er auf $v_1 = 1$ normiert. Dies geschieht mit

$$v = \frac{x - \alpha e_1}{x_1 - \alpha} \tag{3.8}$$

Mit der Normierung kann man den Faktor $\tau = \dfrac{2}{v^T v}$ berechnen. Setze dazu (3.8) in die Definition von τ ein.

$$\tau = \frac{2}{v^T v} = \frac{2(x_1-\alpha)^2}{(x-\alpha e_1)^T(x-\alpha e_1)} = \frac{2(x_1-\alpha)^2}{\underbrace{\|x\|_2^2}_{=\alpha^2} - 2\alpha x^T e_1 + \alpha^2} = \frac{2(x_1-\alpha)^2}{2\alpha(\alpha - x_1)} = \frac{\alpha - x_1}{\alpha}$$

Mit dem Faktor $\tau = \frac{2}{v^T v}$ kann man die Householder-Transformation schreiben als

$$H = I - 2\frac{vv^T}{v^T v} = I - \tau vv^T$$

Algorithmus 1 Householder-Vektor (LAPACK DLARFG)

Input: $x \in \mathbb{R}^n$

$\alpha = -1 \cdot \text{sign}(x_1)\|x\|_2$
$\tau = \frac{\alpha - x_1}{\alpha}$
$v = \frac{x - \alpha e_1}{x_1 - \alpha}$

Output: Householder-Vektor v, τ

3.2.2 Householder-Transformation anwenden

Ein aufwändiges Matrix-Matrix-Produkt kann bei der Anwendung einer Householder-Transformation $H = I - \tau vv^T$ auf die Matrix A umgangen werden, indem man geschickt klammert.

$$HA = (I - \tau vv^T)A = A - \tau(vv^T)A = A - \tau v(v^T A)$$

Statt eines Matrix-Matrix-Produkts muss man nur ein Matrix-Vektor-Produkt und ein dyadisches Produkt berechnen.

3.2.3 QR-Zerlegung mittels Householder-Transformationen

Um A in eine obere Dreiecksmatrix R zu transformieren, wird eine Folge von Householder-Transformationen auf A angewandt.

Zuerst wird aus der ersten Spalte der Matrix A ein Householder-Vektor berechnet, dann wird die Householder-Transformation auf die Matrix angewandt. Diese Householder-Transformation erzeugt Nullen in der ersten Spalte unterhalb des ersten Eintrags. Damit eine obere Dreiecksmatrix entsteht, wird als nächstes die Matrix A ohne die erste Zeile und Spalte betrachtet. Aus der ersten Spalte der neu betrachteten Matrix wird wieder ein Householder-Vektor berechnet. Dieser Vektor erzeugt

eine Householder-Transformation $\hat{H}$. Um diese Transformation auf A anwenden zu können setzt man:

$$H_1 = \left(\hat{H}_1\right) \quad , \quad H_2 = \left(\begin{array}{c|c} I_1 & 0 \\ \hline 0 & \hat{H}_2 \end{array}\right) \quad , \quad H_i = \left(\begin{array}{c|c} I_{i-1} & 0 \\ \hline 0 & \hat{H}_i \end{array}\right)$$

I_{i-1} bezeichnet die i–1-dimensionale Einheitsmatrix, $\hat{H}_i$ ist eine Householder-Transformation.

Diese Householder-Transformationen werden auf die Matrix angewandt. Fährt man nach diesem Schema immer weiter fort, entsteht eine obere Dreiecksmatrix.

$$H_1 A = \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \end{pmatrix} \quad , \quad H_2 H_1 A = \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & * & * \end{pmatrix}$$

So erhält man die Faktorisierung

$$R = H_{n-1} H_{n-2} \cdot \ldots \cdot H_1 A \Leftrightarrow A = (H_1 \cdot \ldots \cdot H_{n-1}) R \Rightarrow Q = H_1 \cdot \ldots \cdot H_{n-1}$$

Q ist das Produkt aller Householder-Transformationen. Diese Vorgehensweise führt zum Algorithmus 2.

Algorithmus 2 Ungeblockte Housholder-Transformation.
Zur übersichtlicheren Beschreibung des Algorithmus werden die Bezeichnungen A_i und $\hat{a}_i$ eingeführt. A_i zeigt auf einen Matrixblock der am i-ten Diagonalelement beginnt. $\hat{a}_i$ zeigt auf die i-te Spalte unterhalb der Diagonalen. Matrizen sind 0-indiziert notiert.

1: Input: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$
2: **for** i = 0,1,2,..., n-1 **do**
3: $(v_i, \tau_i) \leftarrow$ householdervektor($\hat{a}_i$)
4: $w \leftarrow v_i^T \cdot A_i$ (dgemv)
5: $A_i \leftarrow \tau \cdot v_i \cdot w + A_i$ (dger)
6: **if** i < m **then**
7: $\hat{a}_i \leftarrow v_i$
8: **end if**
9: **end for**
10: Output: A QR zerlegt, Vektor $\tau \in \mathbb{R}^n$

Der Algorithmus 2 überschreibt die Matrix A mit R. Aufgrund der Dreiecksstruktur von R, können unter der Diagonale die Householder-Vektoren gespeichert werden.

Die Householder-Vektoren haben die Form

$$v^{(j)} = (\underbrace{0, ..., 0}_{j-1}, 1, v_{j+1}^{(j)}, ..., v_m^{(j)})$$

Da die ersten $j - 1$ Einträge Null sind und der Vektor so normiert wurde, dass der Eintrag j gleich 1 ist, müssen die ersten j Einträge nicht gespeichert werden. Die Householder-Vektoren können somit unterhalb der Diagonalen gespeichert werden. Das geschieht im Algorithmus 2 in Zeile 7. Die Matrix A hat somit die Form

$$A = \begin{pmatrix} r_{1,1} & r_{1,2} & r_{1,3} \\ v_2^{(1)} & r_{2,2} & r_{2,3} \\ v_3^{(1)} & v_3^{(2)} & r_{3,3} \\ v_4^{(1)} & v_4^{(2)} & v_4^{(3)} \end{pmatrix}$$

Indem man Householder-Vektoren unterhalb der Diagonalen speichert, benötigt man keinen zusätzlichen Speicher für die Matrix Q.

Meistens ist es nicht notwendig, die Matrix Q explizit zu bestimmen, da man Q nur mit den Householder-Vektoren sehr effizient anwenden kann (siehe Abschnitt 3.2.2).

3.3 Geblockte QR-Zerlegung

Ein geblockter Algorithmus ist sinnvoll, um bei großen Matrizen den Cache optimal zu nutzen.

Im Folgenden wird ein geblockter Algorithmus beschrieben, wie er auch von LAPACK verwendet wird. Die entsprechende Funktion bei *LAPACK* heißt *DGEQRF* [8].

Die Idee beim geblockten Algorithmus ist, die Matrix A in Blöcke aufzuteilen, die geblockte QR-Zerlegung für die Blöcke zu berechnen und die dabei verwendeten Householder-Transformationen auf den Rest der Matrix anzuwenden.

Betrachte dazu die Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ als Blockmatrix, mit einer geeigneten Blockgröße bs (siehe Abschnitt 3.3.3).

$$A = \left(\begin{array}{c|c} A_{0,0} & A_{0,\mathrm{bs}} \\ \hline A_{\mathrm{bs},0} & A_{\mathrm{bs},\mathrm{bs}} \end{array}\right) \tag{3.9}$$

Die Abbildung 3.2 zeigt schematisch die Partitionierung von A.

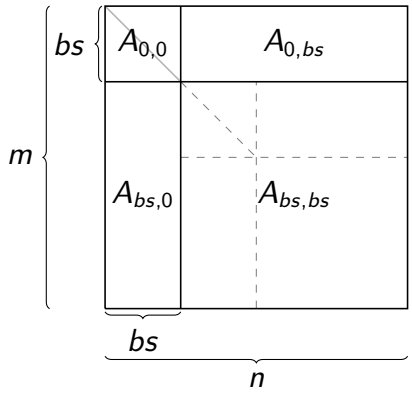


Abbildung 3.2: Aufteilung der Matrix A

Die Blockgröße bs wird so gewählt, dass die Geschwindigkeit der ungeblockten QR-Zerlegung für den Block $\left(\frac{A_{0,0}}{A_{\mathrm{bs},0}}\right)$ optimal ist (siehe Abschnitt 3.3.3).

Für diesen Block wird die QR-Zerlegung mit dem ungeblockten Algorithmus (Algo-

rithmus 2) berechnet.

$$\left(\frac{A_{0,0}}{A_{\text{bs},0}}\right) \leftarrow \left(\frac{Q_{0,0}\backslash R_{0,0}}{Q_{\text{bs},0}}\right) \tag{3.10}$$

Im Block $A_{0,0}$ steht auf und über der Diagonalen $R_{0,0}$. Unterhalb der Diagonalen und im Block $A_{\text{bs},0}$ stehen die Householder-Vektoren.

Nun muss man die bei der ungeblockten QR-Zerlegung verwendeten Householder-Transformationen auf die restliche Matrix $\left(\frac{A_{0,\text{bs}}}{A_{\text{bs,bs}}}\right)$ anwenden.

Das Produkt mehrerer Householder-Transformationen kann geschrieben werden als:

$$\hat{H} = H_1 H_2 \cdots H_k = I - VTV^T \qquad \text{mit} \qquad H_i = I - \tau_i v_i v_i^T$$

[3]

Die Anwendung der Householder-Transformationen $\hat{H} = I - VTV^T$ auf $\left(\frac{A_{\text{bs,bs}}}{A_{\text{bs,bs}}}\right)$ erfolgt in zwei Schritten. Zuerst wird die Matrix T berechnet. Dann wird $\hat{H}^T$ auf $\left(\frac{A_{\text{bs,bs}}}{A_{\text{bs,bs}}}\right)$ angewandt.

$$\left(\frac{A_{0,\text{bs}}}{A_{bs,\text{bs}}}\right) \leftarrow \hat{H}^T \left(\frac{A_{0,\text{bs}}}{A_{bs,\text{bs}}}\right) \tag{3.11}$$

Der Block $A_{bs,\text{bs}}$ wird erneut aufgeteilt. Das ist in Abbildung 3.2 gestrichelt dargestellt. Dies wird solange fortgesetzt, bis $A_{bs,\text{bs}}$ gleich der Blockgröße ist.

So kommt man auf den geblockten Algorithmus 3.

Algorithmus 3 Geblockter Algorithmus
Die Matrix A wird im Algorithmus betrachtet wie in Abbildung 3.2. Die Matrix $T \in \mathbb{R}^{bs \times bs}$ ist ein Workspace, in dem die Matrix T wie in (3.12) gespeichert wird.

1: Input: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$
2: **while** A.numCols $\geq bs$ **do**
3: Berechne QR-Zerlegung von $\begin{pmatrix} A_{0,0} \\ A_{\text{bs},0} \end{pmatrix}$ mit Algorithmus 2
4: **if** A.numCols $> bs$ **then**
5: Berechne T aus $\begin{pmatrix} A_{0,0} \\ A_{\text{bs},0} \end{pmatrix}$ (siehe Abschnitt 3.3.1)
6: Wende $\hat{H}$ auf $\begin{pmatrix} A_{0,\text{bs}} \\ A_{\text{bs,bs}} \end{pmatrix}$ an (siehe Abschnitt 3.3.2)
7: **end if**
8: Betrachte $A_{\text{bs,bs}}$ als A
9: **end while**
10: **if** A.numCols $< bs$ **then**
11: Berechne QR-Zerlegung von A mit Algorithmus 2
12: **end if**

3.3.1 Berechnung der Matrix *T*

Die Matrix T wird in *LAPACK* von der Funktion *DLARFT* berechnet [7].

Sie bekommt eine Dreiecksmatrix $V \in \mathbb{R}^{m \times k}$, einen Vektor $\tau \in \mathbb{R}^k$ und eine Matrix $T \in \mathbb{R}^{k \times k}$ übergeben.

In der Dreiecksmatrix V stehen die Householder-Vektoren, im Vektor τ die zu den Householder-Vektoren gehörende τ_i.

Die Funktion berechnet eine obere Dreiecksmatrix T, so dass

$$H_1 H_2 ... H_k = I - VTV^T \qquad \text{mit} \qquad H_i = I - \tau_i v_i v_i^T \tag{3.12}$$

Warum und wie das Verfahren funktioniert, wird in [3] beschrieben.

Algorithmus 4
Der Algorithmus berechnet die Matrix T so, dass (3.12) gilt. Die untere Dreiecksmatrix V enthält die Householder-Vektoren. Der Vektor τ die dazugehörigen $\tau_i = \frac{2}{v_i^T v_i}$.
Hinweise zur Notation: Kleine Buchstaben bezeichnen einzelne Matrixeinträge (Beispiel: $v_{i,j}$ ist der Eintrag der i-ten-Zeile und j-ten Spalte der Matrix V). Die nach unten gestellten Indizes geben einen Block an, der betrachtet werden soll.
Beispiel: $V_{i:n,j:m}$ bezeichnet einen Block aus der Matrix V, der von der i-ten bis zur n-ten Zeile und von der j-ten bis zur m-ten Spalte geht.

1: Input $V \in \mathbb{R}^{k \times n}$,$\tau \in \mathbb{R}^k$,$T \in \mathbb{R}^{k \times k}$
2: **for** i = 0,1,2,..., k **do**
3: **if** τ_i == 0 **then**
4: $T_{1:i,i} = 0$
5: **else**
6: vii= $v_{i,i}$
7: $v_{i,i} = 1$
8: $T_{0:i,i} = -\tau_i \cdot V^T_{i:n-i,0:i} \cdot V_{i:n-i,i}$ (dgmv)
9: $v_{i,i} =$ vii
10: $T_{0:i,i} = T_{0:i,0:i} \cdot T_{0:i,i}$ (dtrmv)
11: $t_{i,i} = \tau_i$
12: **end if**
13: **end for**

Der Algorithmus 4 überschreibt die Matrix T folgendermaßen

$$T = \begin{pmatrix} \tau_1 & -\tau_1\tau_2(v_1^T v_2) & -\tau_1\tau_2\tau_3(v_1^T v_2 v_2^T v_3) + \tau_1\tau_3(v_1^T v_3) \\ 0 & \tau_2 & -\tau_2\tau_3(v_2^T v_3) \\ 0 & 0 & \tau_3 \end{pmatrix}$$

Beispiel mit $k = 3$

3.3.2 Anwenden von $I - VTV^T$

Die Anwendung der Householder-Transformationen auf eine Matrix C wird in LAPACK von der Funktion *LARFB* implementiert.

Die Funktion bekommt eine untere Dreiecksmatrix $V \in \mathbb{R}^{m \times k}$, eine obere Dreiecksmatrix $T \in \mathbb{R}^{k \times k}$ und eine Matrix $C \in \mathbb{R}^{m \times n}$ übergeben.

In der Dreiecksmatrix V stehen die Householder-Vektoren und T ist die zuvor berechnete Matrix. Die Matrix C wird aktualisiert, indem die Matrix $I - VTV^T$ von

rechts auf die Matrix C angewendet wird.

Ein weiterer Übergabeparameter gibt an, ob die Matrix $I - VTV^T$ transponiert werden soll. Die Funktion berechnet also

$$C \leftarrow \hat{H}^T C = C - VT^T V^T C \tag{3.13}$$

Der Zweck der Funktion ist es, die Householder-Transformationen, die bei der Berechnung der QR-Zerlegung für einen Block entstanden sind, auf die restliche Matrix anzuwenden. Die Abbildung 3.3 zeigt, wie die Matrix A für die Funktion partitioniert wird.

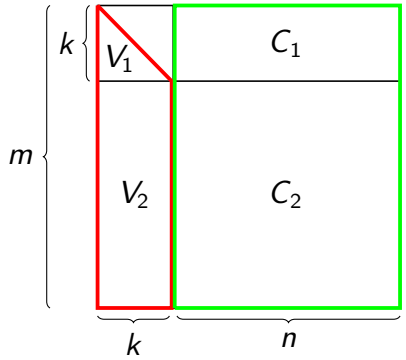


Abbildung 3.3: Partitionierung vom A für larfb

Falls $m > k$, werden die Matrizen V und C aufgeteilt in

$$V = \begin{pmatrix} V_1 \\ \hline V_2 \end{pmatrix} \text{ und } C = \left(\begin{array}{c} C_1 \\ \hline C_2 \end{array}\right) \tag{3.14}$$

Dabei wird V genau so geteilt, dass $V_1 \in \mathbb{R}^{k \times k}$ der quadratische Dreiecksteil der Matrix ist und $V_2 \in \mathbb{R}^{m-k \times k}$ der Rest der Matrix. Die Matrix C wird in $C_1 \in \mathbb{R}^{k \times n}$ und $C_2 \in \mathbb{R}^{m-k \times n}$ aufgeteilt. Die Aufteilung ist so gewählt, dass die Matrix-Matrix-Produkte $V_1 \cdot C_1$ und $V_2 \cdot C_2$ möglich sind.
Diese Aufteilung ist notwendig, da die BLAS-Funktion trmm (*matrix-matrix product where one input matrix is triangular*) nur für quadratische Dreiecksmatrizen implementiert ist.

Im Fall $m = k$ ist die Aufteilung nicht notwendig, da V quadratisch ist.

Mit folgender Umformung kommt man von (3.13) auf den Algorithmus 5 (Seite 23).

$$\begin{aligned} C &\leftarrow C - VTV^T C \\ C &\leftarrow C - \left(VTV^T C\right)^{TT} \\ C &\leftarrow C - \left(C^T V T^T V^T\right)^T \end{aligned}$$

Die Matrizen C und V werden wie in (3.14) aufgeteilt.

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} C_1 \\ \overline{C_2} \end{pmatrix} &\leftarrow \begin{pmatrix} C_1 \\ \overline{C_2} \end{pmatrix} - \left(\left(\begin{pmatrix} C_1 \\ \overline{C_2} \end{pmatrix}^T \cdot \begin{pmatrix} V_1 \\ \overline{V_2} \end{pmatrix} \cdot T \cdot \begin{pmatrix} V_1 \\ \overline{V_2} \end{pmatrix}^T \right)^T \right) \\ \begin{pmatrix} C_1 \\ \overline{C_2} \end{pmatrix} &\leftarrow \begin{pmatrix} C_1 \\ \overline{C_2} \end{pmatrix} - \left(\left(C_1^T | C_2^T \right) \cdot \begin{pmatrix} V_1 \\ \overline{V_2} \end{pmatrix} \cdot T \cdot \left(V_1^T | V_2^T \right) \right)^T \\ \begin{pmatrix} C_1 \\ \overline{C_2} \end{pmatrix} &\leftarrow \begin{pmatrix} C_1 \\ \overline{C_2} \end{pmatrix} - \left(\left(C_1^T \cdot V_1 + C_2^T \cdot V_2 \right) \cdot T \cdot \left(V_1^T | V_2^T \right) \right)^T \end{aligned}$$

$\left(C_1^T \cdot V_1 + C_2^T \cdot V_2\right)$ wird in Zeile 2–6 berechnet und das Ergebnis in W gespeichert. Die Matrix W ist eine Workspace-Matrix. In Zeile 7–11 wird $\left(C_1^T \cdot V_1 + C_2^T \cdot V_2\right) \cdot T$ berechnet, in dem T auf W multipliziert wird mit $W \leftarrow W \cdot T$.

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} C_1 \\ \overline{C_2} \end{pmatrix} &\leftarrow \begin{pmatrix} C_1 \\ \overline{C_2} \end{pmatrix} - \left(W \cdot \left(V_1^T | V_2^T \right) \right)^T \\ \begin{pmatrix} C_1 \\ \overline{C_2} \end{pmatrix} &\leftarrow \begin{pmatrix} C_1 \\ \overline{C_2} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} V_1 \\ \overline{V_2} \end{pmatrix} \cdot W^T \\ \Longrightarrow C_1 &\leftarrow C_1 - V_1 \cdot W^T \\ C_2 &\leftarrow C_2 - V_2 \cdot W^T \end{aligned}$$

C_1 wird in Zeile 15 und 16 berechnet. C_2 wird in Zeile 13 berechnet.

Algorithmus 5 $I - VTV^T$ auf C anwenden
Die Matrix $W \in \mathbb{R}^{n \times k}$ ist ein Workspace. Die Matrizen V und C werden geteilt in V_1, V_2 und C_1, C_2 wie oben beschrieben.

1: Input: $V \in \mathbb{R}^{m \times k}$, $T \in \mathbb{R}^{k \times k}$, $C \in \mathbb{R}^{m \times n}$
2: $W \leftarrow C_1^T$ (copy)
3: $W \leftarrow W * V_1$ (trmm)
4: **if** m > k **then**
5: $\quad W \leftarrow W + C_2^T * V_2$ (gemm)
6: **end if**
7: **if** trans **then**
8: $\quad W \leftarrow W * T^T$ (trmm)
9: **else**
10: $\quad W \leftarrow W * T$ (trmm)
11: **end if**
12: **if** m > k **then**
13: $\quad C_2 \leftarrow C_2 - V_2 * W^T$ (gemm)
14: **end if**
15: $W \leftarrow W * V_1^T$ (trmm)
16: $C_1 \leftarrow C_1 - W^T$

3.3.3 Wahl der Blockgröße *bs*

Ein Performancegewinn durch Verwendung des geblockten Algorithmus gegenüber dem ungeblockten Algorithmus wird erwartet, da bei der Anwendung der Householder-Transformation H auf eine Matrix, Matrix-Matrix-Produkte (*trmm* und *gemm*) verwendet werden. Der ungeblockte Algorithmus 2 verwendet dafür Matrix-Vektor-Produkte (*dgemv* und *dger*).

Matrix-Matrix-Produkte sind Blas-Level-3-Operationen und Matrix-Vektor-Produkte sind Blas-Level-2-Operationen. Durch die Verwendung von Blas-Level-3-Operationen ist man in der Regel schneller als mit Blas-Level-2-Operationen [5].

Die Blockgröße *bs* wurde experimentell bestimmt. Dazu wurden Benchmarks mit verschiedenen Blockgrößen durchgeführt (siehe Abbildung 4.2). Das Ergebnis dieser Benchmarks ist eine Blockgröße von 32 für den verwendeten Prozessor.

4 Implementierung und Benchmarks

In diesem Kapitel wird die Implementierung der in Kapitel 3 eingeführten Algorithmen zur Berechnung der QR-Zerlegung mittels Householder-Transformation beschrieben. Die verwendete Bibliothek, der Fehlerschätzer und die Benchmarks werden erläutert.

Die verwendete Bibliothek wurde in der Vorlesung High Performance Computing 1 entwickelt [5] und wird im folgenden HPC1-Bibliothek genannt.

Die Implementierung steht auf GitHub Verfügung [4].
Link: `https://github.com/Flousen/Bachelorarbeit`

4.1 Bibliothek

Die HPC1-Bibliothek ist in C++ geschrieben und stellt eine Schnittstelle zu den BLAS-Routinen der IntelMKL zur Verfügung. Das ermöglicht, die Algorithmen mit den BLAS-Routinen zu implementieren. Dabei wurde sich an der Implementierung LAPACK orientiert.

Die HPC1-Bibliothek enthält Klassen für Matrizen und Vektoren. Die Matrix-Klassen erlauben den Zugriff auf Matrixblöcke. Der folgende Code soll beispielhaft den Zugriff auf Matrixblöcke veranschaulichen.

```
1 GenerelMatrix<T> A(5,5);   // erzeugt Matrix-Objekt
2 init(A);   // Matrix mit Zufallszahlen initialisieren
3 printf("A   =\n");print(A); // Matrix ausgeben
4 printf("A22 =\n");print(A.block(2,2));
5 printf("A22T=\n");print(A.block(2,2).view(Trans::view));
```

Der Code erzeugt erzeugt zuerst eine 5×5 Matrix. Die Funktion *init* initialisiert die Matrix zeilenweise mit den Werten 1 bis 25. Diese Matrix wird dreimal ausgegeben. Zuerst die komplette Matrix (Zeile 3), dann ein Block der Matrix beginnend in der

dritten Zeile und der dritten Spalte. Als Letztes wird derselbe Matrix-Block noch transponiert betrachtet. Der Code kann die folgende Ausgabe erzeugen.

```
A    =
       1     2     3     4     5
       6     7     8     9    10
      11    12    13    14    15
      16    17    18    19    20
      21    22    23    24    25

A22  =
      13    14    15
      18    19    20
      23    24    25

A22T=
      13    18    23
      14    19    24
      15    20    25
```

MKL Wrapper

Um von der Bibliothek auf Blas-Routinen der MKL zugreifen zu können, benötigt man Wrapper, die die Schnittstelle zur MKL darstellen.

MKL-Blas-Routinen kennen keine Matrix- und Vektor-Klassen, wie es sie in der HPC1-Bibliothek gibt. Diese Funktionen bekommen Zeiger auf die Daten und Verwaltungsinfomationen als Variable übergeben. Die Wrapper extrahieren die Daten aus den Klassen und rufen damit die MKL-Funktionen auf.

Der folgende Code zeigt einen solchen Wrapper am Beispiel der Skalarprodukt-Funktion *dot*.

```
14 double
15 dot(MKL_INT n, const double *x, MKL_INT incx,
16     const double *y, MKL_INT incy)
17 {
18   return ddot(&n, x, &incx, y, &incy);
19 }
```

```
20
21 template <typename T, template<typename> class VectorX,
22                         template<typename> class VectorY,
23           Require< Dense<VectorX<T>>,
24                    Dense<VectorY<T>> > = true>
25 T
26 dot(const VectorX<T> &x, const VectorY<T> &y)
27 {
28   return dot(x.length(), x.data(), x.inc(),
29              y.data(), y.inc());
30 }
```

Die Funktion in den Zeilen 21–30 wird von der Bibliothek aufgerufen. In den Zeilen 28 und 29 werden die für die Funkton wichtigen Parameter aus den Klassen ausgelesen und damit die Wrapper-Funktion (Zeilen 14–19) aufgerufen. Die Wrapper-Funktion ruft die Blas-Funktion auf (Zeile 18).

4.2 Fehlerschätzer

Um zu testen, ob die QR-Zerlegung korrekt ist, ist ein Fehlerschätzer notwendig. Es wurde der Fehlerschätzer von ATLAS [1] verwendet.

$$err = \frac{\|A - QR\|_i}{\|A\|_i \cdot \min(m, n) \cdot \varepsilon} \tag{4.1}$$

$\|\cdot\|_i$ ist eine passende Norm. Die Matrizen Q und R sind die QR-Zerlegung der Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. ε ist die kleinste darstellbare Zahl.
Die QR-Zerlegung ist gut genug, falls der Fehler kleiner 1 ist: $err < 1$.

Als Norm wurde die Zeilensummennorm $\|\cdot\|_\infty$ gewählt. Diese ist für eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ gegeben durch

$$\|A\|_\infty = \max_{i=1,\ldots,m} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$$

Diese Norm wurde gewählt, da sie für zeilenweise gespeicherte Matrizen effizient berechnet werden kann.

4.3 Benchmarks

4.3.1 Aufwand

Der Aufwand zur Berechnung der QR-Zerlegung mittels Householder-Transformation einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$ ist bei ATLAS [1] angegeben mit

$$\#\text{QR} = n \cdot \left(\frac{23}{6} + m + \frac{n}{2} + n \cdot \left(m - \frac{n}{3} \right) + \frac{5}{6} + n \cdot \left(\frac{1}{2} + m - \frac{n}{3} \right) \right) \tag{4.2}$$

$\#$QR bezeichnet die Anzahl der Rechenoperationen, die zur Berechnung der QR-Zerlegung notwendig sind. Vereinfacht man (4.2), dann erhält man einen Aufwand von $\mathcal{O}(n^2 m)$.

4.3.2 FLOPS

FLOPS (*floating point operations per second*) geben an, wie viele Fließkomma-Operationen pro Sekunde ausgeführt werden.

$$\text{FLOPS} = \frac{\#}{\Delta t}$$

Δt bezeichnet die Zeit in Sekunden und $\#$ die Anzahl der Rechenoperationen, die zur Berechnung benötigt werden.

4.3.3 Vorgehensweise

Ein $m \times n$ Matrix wird mit gleichverteilten Zufallswerten aus $[-1, 1]$ initialisiert.

Die Matrix wird kopiert, um nach der Berechnung den Fehler schätzen zu können. Die QR-Zerlegung wird von der kopierten Matrix berechnet. Es wird die Zeit gemessen, welche für die Berechnung benötigt wird. Aus der Originalmatrix und der kopierten QR-zerlegten Matrix wird der Fehler berechnet, so wie in Abschnitt 4.2 beschrieben.

Aus den Matrix-Dimensionen wird die Anzahl der Rechenoperationen berechnet (Abschnitt 4.3.1). Aus der Anzahl der notwendigen Rechenoperationen und der gemessenen Zeit werden die FLOPS berechnet.

Es wurden jeweils Matrizen mit den Dimensionen 10×10 bis 1000×1000 getestet. Die Matrizen wurden in Zehnerschritten vergrößert.

4.3.4 Testsystem

Getestet wurde auf einem System mit einer Intel i5-3470-CPU mit 3,20 GHz. Auf der Architektur dieses Prozessors errechnet sich die theoretische Maximalleistung (*peak performance*) aus der Taktrate mal die Registerbreite mal 2.

Die CPU des Testsystems hat eine Taktrate von 3,20 GHz. Die AVX-Register haben eine Größe von 256 Bit. Darin haben 4 *double* Platz.

$$\text{Taktrate} \cdot \text{Registerbreite} \cdot 2 = 3,20\ \text{GHz} \cdot 4 \cdot 2 = 25,6\ \text{GFLOPS}$$

4.4 Ergebnisse

4.4.1 Ungeblockter Algorithmus

Die Abbildung 4.1 zeigt den Vergleich des selbst implementierten Algorithmus 2 (Seite 15) mit dem ungeblockten Algorithmus der MKL (*dgeqrf2*).

Ab einer Matrix-Dimension von 400×400 bleibt die Anzahl FLOPS gleichmäßig über 7 GFLOPS. Dieser Wert liegt weit unter 25,6 GFLOPS, der theoretischen *peak performance*.

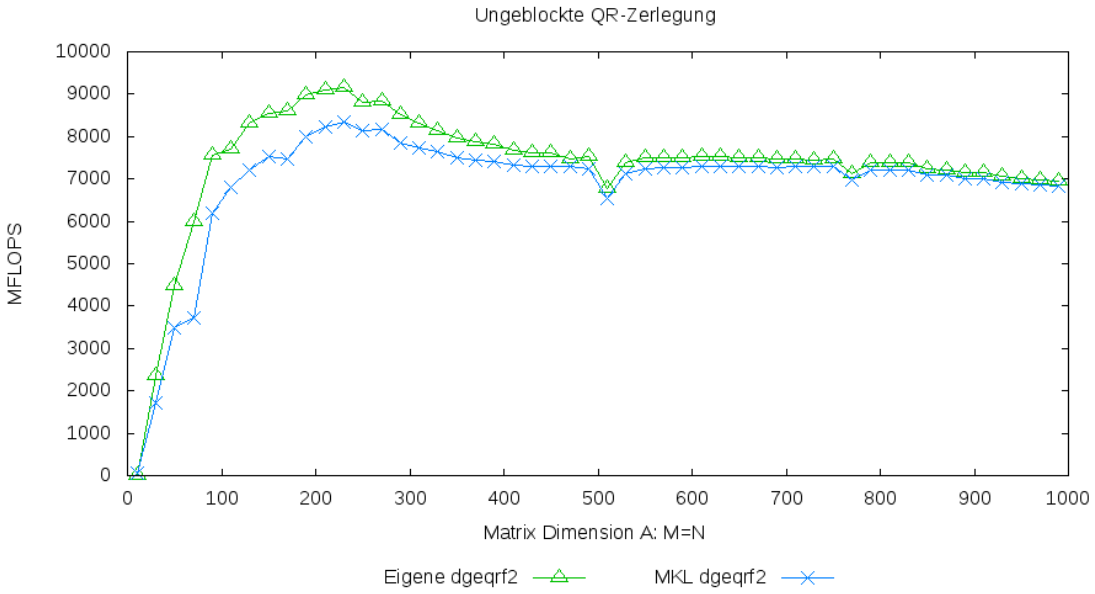


Abbildung 4.1: Benchmark ungeblockte QR-Zerlegung

4.4.2 Cache-optimierter Algorithmus

Die Abbildung 4.2 zeigt den Vergleich des Algorithmus 3 (Seite 19) mit verschiedenen Blockgrößen. Als Blockgrößen wurden die Zweierpotenzen $2^3 = 8$ bis $2^7 = 128$ getestet.

Die Blockgröße 8 pendelt sich ab der Matrix-Dimension 500 bei ca. 18 GFLOPS ein. Die Blockgröße 32 pendelt sich ab der Matrix-Dimension 500 bei ca. 23 GFLOPS ein. Die Blockgrößen 16 und 64 pendeln sich knapp unter den FLOPS der Blockgröße 32 ein. Die Blockgröße 128 liegt auf dem Intervall der getesteten Matrix-Dimensionen 0 bis 1000 unter den anderen Blockgrößen. Die FLOPS haben sich bei der Dimension 1000 noch nicht auf einem Niveau eingependelt, sondern steigen noch an. Es ist davon auszugehen, dass sich die FLOPS bei größeren Matrizen auch bei ca. 23 GFLOPS einpendeln.

Folglich wird die Blockgröße 32 gewählt, da durch diese Blockgröße am schnellsten die meisten FLOPS erreicht werden.

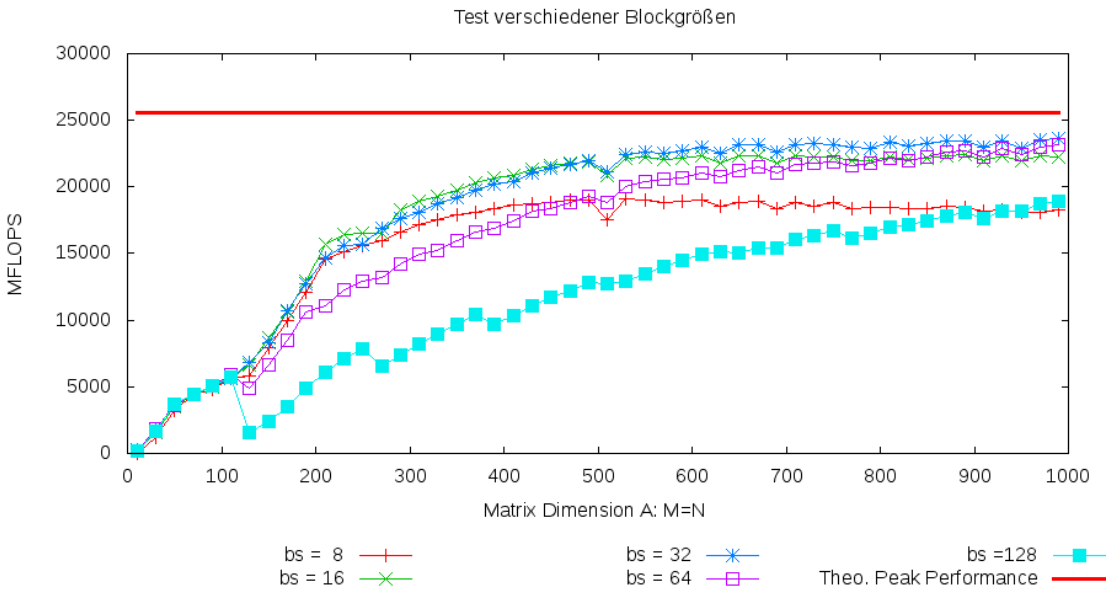


Abbildung 4.2: Benchmark geblockte QR-Zerlegung

Die Abbildung 4.3 zeigt den Vergleich des selbst implementierten Algorithmus 3 mit Blockgröße 32, mit dem Algorithmus *dgeqrf* aus der MKL. *dgeqrf* ist der cache-optimierte Algorithmus zur Berechnung der QR-Zerlegung.

Beide Implementierungen sind von der Performance sehr ähnlich und erreichen fast die *peak performance*. Dabei ist die Implementierung der MKL etwas schneller. Der selbst implementierten Algorithmus erreicht bis zu 94% die Performance der MKL.

Zusätzlich sind in der Abbildung 4.3 noch die Benchmark-Ergebnisse der ungeblockten Algorithmen eingezeichnet. Hier wird der Performancegewinn des geblockten Algorithmus deutlich.

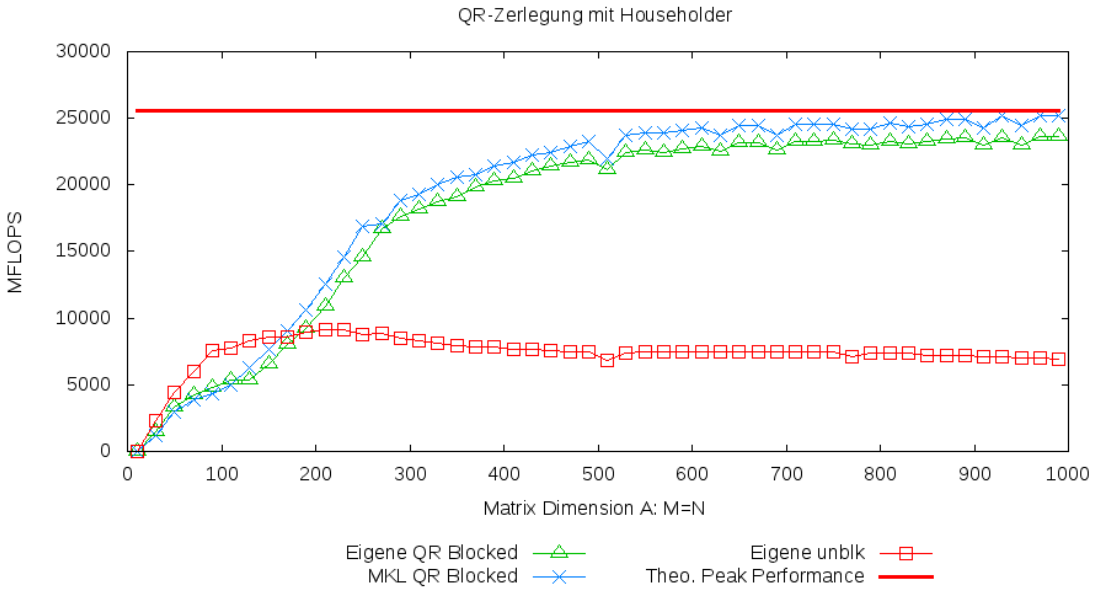


Abbildung 4.3: Benchmark geblockte QR-Zerlegung

4.5 Fazit

Die Benchmarktests erbrachten folgende Ergebnisse:

- Der ungeblockte Algorithmus beider Implementierungen erreicht nicht die *peak performance*.
- Der selbst programmierte ungeblockte Algorithmus ist etwa 5% schneller als der Algorithmus *dgeqrf2* der MKL.
- Der geblockte Algorithmus beider Implementierungen erreicht fast die *peak performance*.
- Der geblockte Algorithmus *dgeqrf* der MKL ist etwas schneller. Der selbst implementierten Algorithmus erreicht bis zu 94% die Performance der MKL.
- Der geblockte Algorithmus ist etwa um den Faktor 3 schneller als der ungeblockte Algorithmus.

4.5.1 Ausblick

Der geblocke Algorithmus berechnet die QR-Zerlegung mittels Householder-Transformation annähernd mit *peak performance* und erreicht fast die Performance der MKL.

Aufgund der Erkenntnisse sind weiterführend folgende Fragestellungen interessant:

- Ist es möglich mit einem rekursiven geblockten Algorithmus die Performance der MKL zu erreichen oder sogar zu übertreffen?
- Welche Blas-Funktionen haben den größten Einfluss auf die Performance?

A Anhang

A.1 Berechnung der Matrix T

Das Produkt aus Householder-Transformationen $H_1 \cdot ... \cdot H_n$ lässt sich schreiben als

$$H_1 \cdot ... \cdot H_n = I - VTV^T$$

mit einer unteren Dreiecksmatrix $V \in \mathbb{R}^{m \times n}$, die die Householder-Vektoren enthält und eine obere Dreiecksmatrix $T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ [3]
Beweis:
n=2 vorwärts:

$$\begin{aligned} H_1 H_2 x &= (I - \tau_1 v_1 v_1^T)(I - \tau_2 v_2 v_2^T)x \\ &= (I - \tau_1 v_1 v_1^T - \tau_2 v_2 v_2^T + \tau_1 v_1 v_1^T \tau_2 v_2 v_2^T)x \\ &= x - \tau_1 v_1 v_1^T x - \tau_2 v_2 v_2^T x + \tau_1 \tau_2 v_1 (v_1^T v_2) v_2^T x \\ &= x - \tau_1 v_1 v_1^T x - \tau_2 v_2 v_2^T x + \tau_1 \tau_2 (v_1^T v_2) v_1 v_2^T x \end{aligned}$$

rückwärts:

$$\begin{aligned} H_{1,2} x = (I - VTV^T)x &= x - VTV^T x \\ &= x - (v_1, v_2) \begin{pmatrix} a & b \\ 0 & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1^T \\ v_2^T \end{pmatrix} x \\ &= x - (v_1, v_2) \begin{pmatrix} a & b \\ 0 & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1^T x \\ v_2^T x \end{pmatrix} \\ &= x - (v_1, v_2) \begin{pmatrix} a v_1^T x + b v_2^T x \\ c v_2^T x \end{pmatrix} \\ &= x - v_1 (a v_1^T x + b v_2^T x) - v_2 (c v_2^T x) \\ &= x - a v_1 v_1^T x - b v_1 v_2^T x - c v_2 v_2^T x \end{aligned}$$

Koeffizientenvergleich

$$
\begin{aligned}
a &= \tau_1 \\
b &= -\tau_1 \tau_2 (v_1^T v_2) \\
c &= \tau_2 \\
T &= \begin{pmatrix} \tau_1 & -\tau_1 \tau_2 (v_1^T v_2) \\ 0 & \tau_2 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

n=3
vorwärts:

$$
\begin{aligned}
H_1H_2H_3x = (I - \tau_1 v_1 v_1^T)(I - \tau_2 v_2 v_2^T)(I - \tau_3 v_3 v_3^T)x \\
=&(I - \tau_1 v_1 v_1^T - \tau_2 v_2 v_2^T + \tau_1 v_1 v_1^T \tau_2 v_2 v_2^T)(I - \tau_3 v_3 v_3^T)x \\
=&(I - \tau_1 v_1 v_1^T - \tau_2 v_2 v_2^T - \tau_3 v_3 v_3^T \\
&+ \tau_1 v_1 v_1^T \tau_2 v_2 v_2^T + \tau_1 v_1 v_1^T \tau_3 v_3 v_3^T + \tau_2 v_2 v_2^T \tau_3 v_3 v_3^T \\
&- \tau_1 v_1 v_1^T \tau_2 v_2 v_2^T \tau_3 v_3 v_3^T)x \\
=&x - \tau_1 v_1 v_1^T x - \tau_2 v_2 v_2^T x - \tau_3 v_3 v_3^T x \\
&+ \tau_1\tau_2 (v_1^T v_2) v_1 v_2^T x + \tau_1\tau_3 (v_1^T v_3) v_1 v_3^T x + \tau_2\tau_3 (v_2^T v_3) v_2 v_3^T x \\
&- \tau_1\tau_2\tau_3 (v_1^T v_2 v_2^T v_3) v_1 v_3^T x
\end{aligned}
$$

rückwärts:

$$
\begin{aligned}
H_{1,2,3}x = (I - VTV^T)x = x - VTV^T x \\
&= x - (v_1, v_2, v_3) \begin{pmatrix} a & b & c \\ 0 & d & e \\ 0 & 0 & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1^T \\ v_2^T \\ v_3^T \end{pmatrix} x \\
&= x - (v_1, v_2, v_3) \begin{pmatrix} a & b & c \\ 0 & d & e \\ 0 & 0 & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1^T x \\ v_2^T x \\ v_3^T \end{pmatrix} \\
&= x - (v_1, v_2, v_3) \begin{pmatrix} a v_1^T x + b v_2^T x + c v_3^T \\ d v_2^T x + e v_3^T \\ f v_3^T \end{pmatrix} \\
=&x - v_1(a v_1^T x + b v_2^T x + c v_3^T x) \\
&- v_2(d v_2^T x + e v_3^T x) \\
&- v_3(f v_3^T) \\
=&x - a v_1 v_1^T x - b v_1 v_2^T x - c v_1 v_3^T x \\
&- d v_2 v_2^T x - e v_2 v_3^T \\
&- f v_3 v_3^T
\end{aligned}
$$

Koeffizienten Vergleich

$$
\begin{aligned}
a =& \tau_1 \\
b =& -\tau_1\tau_2(v_1^T v_2) \\
c =& -\tau_1\tau_2\tau_3(v_1^T v_2 v_2^T v_3) + \tau_1\tau_3(v_1^T v_3) \\
d =& \tau_2 \\
e =& -\tau_2\tau_3(v_2^T v_3) \\
f =& \tau_3 \\
T = \begin{pmatrix} a & b & c \\ 0 & d & e \\ 0 & 0 & f \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \tau_1 & -\tau_1\tau_2(v_1^T v_2) & -\tau_1\tau_2\tau_3(v_1^T v_2 v_2^T v_3) + \tau_1\tau_3(v_1^T v_3) \\ 0 & \tau_2 & -\tau_2\tau_3(v_2^T v_3) \\ 0 & 0 & \tau_3 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Mit Induktion kann man zeigen... siehe paper Im Paper wird gezeigt wie man das verallgemeinern kann. [3]

A.2 Implementierung

Der komplette Code der Bibliothek und der Algorithmen steht in folgendem *git repository* auf GitHub Verfügung:
`https://github.com/Flousen/Bachelorarbeit`

Es ist eine Installation der Intel MKL erforderlich.

Der folgende Code ist im Repository zu finden unter: /src/hpc/mklblas/qr.hpp
Die Datei *qr.hpp* enthält folgende Funktionen:

- *householderVector*
  Die Funktion berechnet den Householder-Vektor.
- *qr_unblk*
  Die Funktion berechnet die QR-Zerlegung mittels Householder-Transformation, mit dem ungeblockten Algorithmus.
- *larft*
  Die Funktion berechnet die Matrix T die zur Anwendung mehrerer Householder-Transformationen notwendig ist (siehe Abschnitt 3.3.1).
- *larfb*
  Die Funktion wendet mehrere Householder-Transformationen auf eine Matrix an (siehe Abschnitt 3.3.2).
- *qr_blk*
  Die Funktion berechnet die QR-Zerlegung mittels Householder-Transformation, mit dem geblockten cache-optimierten Algorithmus.

```
1  #ifndef HPC_MKLBLAS_QR_HPP
2  #define HPC_MKLBLAS_QR_HPP
3
4  #include <cstddef>
5  #include <hpc/assert.hpp>
6  #include <hpc/matvec/traits.hpp>
7
8  // from intel mkl
9  #include <mkl_types.h>
10 #include <mkl_blas.h>
11
```

```
12
13 namespace hpc { namespace mklblas {
14
15 template <typename VectorV, typename Alpha, typename Tau,
16           Require< Dense<VectorV> > = true>
17 void
18 householderVector(Alpha &alpha, VectorV &&v, Tau &tau)
19 {
20   if (v.length() == 0) {
21     tau = Tau(0);
22     return;
23   }
24   double dotprod = hpc::mklblas::dot(v,v);
25   if (dotprod == ElementType<VectorV>(0)){
26     tau = Tau(0);
27   } else {
28     auto beta = -std::copysign(sqrt(alpha*alpha + dotprod),
         alpha);
29     tau = (beta - alpha) / beta;
30     hpc::mklblas::scal( 1/(alpha - beta), v);
31     alpha = beta;
32   }
33
34 }
35
36 template <typename MatrixA, typename VectorTau,
37           Require< Ge<MatrixA>, Dense<VectorTau> > = true>
38 void qr_unblk(MatrixA &&A, VectorTau &&tau)
39 {
40   using T = ElementType<MatrixA>;
41   T All = 0;
42   std::size_t m  = A.numRows();
43   std::size_t n  = A.numCols();
44   std::size_t mn  = std::min(m,n);
45   assert(tau.length() == n);
46
47   hpc::matvec::DenseVector<T> W(mn);
48   for (std::size_t i = 0; i < n; ++i){
```

```
49      hpc::mklblas::householderVector(A(i,i), A.col(i+1,i),tau
            (i));
50      if (i < n && tau(i) != T(0)) {
51        All = A(i,i);
52        A(i,i) = T(1);
53
54        hpc::mklblas::mv(T(1),
55          A.block(i,i+1).view(hpc::matvec::Trans::view),
56          A.col(i,i),
57          T(0),
58          W.block(i+1));
59
60        hpc::mklblas::rank1(-tau(i),
61          A.col(i,i),
62          W.block(i+1),
63          A.block(i,i+1));
64
65        A(i,i) = All;
66      }
67    }
68  }
69
70  // H = I - V * T * V'
71  template <typename MatrixV, typename VectorTau, typename
        MatrixT>
72  void
73  larft(MatrixV &&V, VectorTau &&tau, MatrixT &&T)
74  {
75    using TMV = ElementType<MatrixV>;
76
77    std::size_t k  = tau.length();
78    std::size_t n  = V.numRows();
79
80    if (n == 0){ return; }
81
82    for (std::size_t i = 0; i< k; i++){
83      if (tau(i) == 0){
84        hpc::mklblas::scal(TMV(0), T.col(0,i).dim(i));
```

```
85      } else {
86        auto VII = V(i,i);
87        V(i,i) = TMV(1);
88
89        // T(1:i-1,i) := - tau(i) * V(i:n,1:i-1)' * V(i:n,i)
90        hpc::mklblas::mv(-tau(i),
91            V.block(i,0).dim(n-i,i).view(hpc::matvec::Trans::
                view),
92            V.col(i,i),
93            TMV(0),
94            T.col(0,i).dim(i));
95
96        V(i,i) = VII;
97
98        // T(1:i-1,i) := T(1:i-1,1:i-1) * T(1:i-1,i)
99        hpc::matvec::mv(TMV(1),
100           T.block(0,0).dim(i,i).view(hpc::matvec::UpLo::
                Upper),
101           T.col(0,i).dim(i) );
102
103       T(i,i) = tau(i);
104     }
105   }
106 }
107
108 template <typename MatrixV, typename MatrixT, typename
      MatrixC>
109 void
110 larfb(MatrixV &&V, MatrixT &&T, MatrixC &&C, bool trans =
      false)
111 {
112   std::size_t m  = C.numRows();
113   std::size_t n  = C.numCols();
114   std::size_t k  = T.numCols();
115
116   trans = !trans;
117
118   using TMV = ElementType<MatrixC>;
```

```
119   hpc::matvec::GeMatrix<TMV> W(n,k);
120
121   // W := C' * V  =  (C1'*V1 + C2'*V2)
122   // W := C1'
123   for(std::size_t j = 0; j < k; ++j){
124     hpc::mklblas::copy(C.row(j,0), W.col(0,j));
125   }
126   // W := W * V1
127   hpc::mklblas::mm(TMV(1),
128       W,
129       V.dim(k,k).view(hpc::matvec::UpLo::LowerUnit)
130       );
131   if(m > k){
132     // W := W + C2'*V2
133     hpc::mklblas::mm(TMV(1),
134         C.block(k,0).view(hpc::matvec::Trans::view),
135         V.block(k,0),
136         TMV(1),
137         W);
138   }
139   // W :=  W * T
140   hpc::mklblas::mm(TMV(1),
141       W,
142       T.view(hpc::matvec::UpLo::Upper),
143       trans);
144   // C := C - V * W'
145   if(m > k){
146     // C2 := C2 - V2 * W'
147     hpc::mklblas::mm(TMV(-1),
148         V.block(k,0),
149         W.view(hpc::matvec::Trans::view),
150         TMV(1),
151         C.block(k,0));
152   }
153   // W := W * V1'
154
155   hpc::mklblas::mm(TMV(1),
156       W,
```

```
157       V.dim(k,k).view(hpc::matvec::UpLo::LowerUnit),
158       true);
159   // C1 := C1 - W'
160   for(std::size_t j = 0; j < k; j++){
161     for(std::size_t i = 0; i < n; i++){
162       C(j,i) -= W(i,j);
163     }
164   }
165
166 }
167
168 template <typename MatrixA, typename VectorTau
169           ,Require< Ge<MatrixA>, Dense<VectorTau> > = true>
170 void
171 qr_blk(MatrixA &&A, VectorTau &&tau)
172 {
173   using TMA = ElementType<MatrixA>;
174
175   std::size_t m  = A.numRows();
176   std::size_t n  = A.numCols();
177   std::size_t mn = std::min(m,n);
178
179   assert(tau.length() == mn);
180   std::size_t nb = 32 ;
181   std::size_t nx = 128 ;
182   std::size_t nbmin = 2 ;
183
184   hpc::matvec::GeMatrix<TMA> T(nb, nb, hpc::matvec::Order::
        ColMajor);
185   std::size_t i = 0;
186   if(nb >= nbmin && nb < mn && nx < mn){
187     for (i = 0; i < mn-nx; i+=nb){
188       std::size_t ib = std::min(mn-i+1, nb);
189       //hpc::mklblas::qr_unblk_ref(A.block(i,i).dim(m-i,ib),
              tau.block(i).dim(ib));
190       hpc::mklblas::qr_unblk(A.block(i,i).dim(m-i,ib), tau.
            block(i).dim(ib));
191
```

```
192         if ( i + ib <= n){
193           // Form the triangular factor of the block reflector
194           // H = H(i) H(i+1) . . . H(i+ib-1)
195
196           hpc::mklblas::larft(A.block(i,i).dim(m-i,ib),
197                   tau.block(i).dim(ib),
198                   T.dim(ib,ib));
199           // Apply H' to A(i:m,i+ib:n) from the left
200           hpc::mklblas::larfb(A.block(i,i).dim(m-i,ib),
201                  T.dim(ib,ib),
202                  A.block(i,i + ib).dim(m-i, n-i-ib),
203                  true);
204
205         }
206       }
207     }
208     if ( i <= mn){
209       hpc::mklblas::qr_unblk(A.block(i,i).dim(m-i,n-i), tau.
          block(i).dim(n-i));
210     }
211   }
212
213   template <typename MatrixA, typename VectorTau
214             ,Require< Ge<MatrixA>, Dense<VectorTau> > = true>
215   void
216   qr_blk_bs(MatrixA &&A, VectorTau &&tau, std::size_t bs = 32)
217   {
218     using TMA = ElementType<MatrixA>;
219
220     std::size_t m  = A.numRows();
221     std::size_t n  = A.numCols();
222     std::size_t mn = std::min(m,n);
223
224     assert(tau.length() == mn);
225     std::size_t nb = bs ;
226     std::size_t nx = 128 ;
227     std::size_t nbmin = 2 ;
228
```

```
229   hpc::matvec::GeMatrix<TMA> T(nb, nb, hpc::matvec::Order::
          ColMajor);
230   std::size_t i = 0;
231   if(nb >= nbmin && nb < mn && nx < mn){
232     for (i = 0; i < mn-nx; i+=nb){
233       std::size_t ib = std::min(mn-i+1, nb);
234       //hpc::mklblas::qr_unblk_ref(A.block(i,i).dim(m-i,ib),
              tau.block(i).dim(ib));
235       hpc::mklblas::qr_unblk(A.block(i,i).dim(m-i,ib), tau.
              block(i).dim(ib));
236
237       if ( i + ib <= n){
238         // Form the triangular factor of the block reflector
239         // H = H(i) H(i+1) . . . H(i+ib-1)
240
241         hpc::mklblas::larft(A.block(i,i).dim(m-i,ib),
242                             tau.block(i).dim(ib),
243                             T.dim(ib,ib));
244         // Apply H' to A(i:m,i+ib:n) from the left
245         hpc::mklblas::larfb(A.block(i,i).dim(m-i,ib),
246                             T.dim(ib,ib),
247                             A.block(i,i + ib).dim(m-i, n-i-ib),
248                             true);
249       }
250     }
251   }
252   if ( i <= mn){
253     hpc::mklblas::qr_unblk(A.block(i,i).dim(m-i,n-i), tau.
            block(i).dim(n-i));
254   }
255 }
256
257 } } // namespace mklblas, hpc
258
259 #endif // HPC_MKLBLAS_QR_HPP
```

Literaturverzeichnis

[1] *Automatically Tuned Linear Algebra Software (ATLAS)*. http://math-atlas.sourceforge.net/, . – [Online; zugegriffen 12-06-2018]

[2] INTEL: *Intel MKL*. https://software.intel.com/en-us/mkl, . – [Online; zugegriffen 16-07-2018]

[3] JOFFRAIN, Thierry ; LOW, Tze M. ; QUINTANA-ORTÍ, Enrique S. ; GEIJN, Robert van d. ; ZEE, Field G. V.: Accumulating Householder Transformations, Revisited. In: *ACM Trans. Math. Softw.* 32 (2006), Juni, Nr. 2, 169–179. http://dx.doi.org/10.1145/1141885.1141886. – DOI 10.1145/1141885.1141886. – ISSN 0098–3500

[4] KRÖTZ, Florian: *Implementierung*. https://github.com/Flousen/Bachelorarbeit,

[5] LEHN MICHAEL, Borchert A.: *Vorlesung High Performance Computing 1*. http://www.mathematik.uni-ulm.de/numerik/hpc/ws17/, 2017. – [Online; zugegriffen 31-05-2018]

[6] STEFAN A. FUNKEN, Karsten U.: *Einführung in die Numerische Lineare Algebra*. Ulm, Germany, 2016

[7] TENNESSEE, Univ. of California B. o. ; LTD.., NAG: *DLARFT forms the triangular factor T of a real block reflector H of order n, which is defined as a product of k elementary reflectors.* http://www.netlib.org/lapack/explore-3.1.1-html/dgeqrf.f.html#DGEQRF.1, 2006. – [Online; zugegriffen 12-06-2018]

[8] TENNESSEE, Univ. of California B. o. ; LTD.., NAG: *LAPACK blocked QR*. http://www.netlib.org/lapack/explore-3.1.1-html/dgeqrf.f.html, 2006. – [Online; zugegriffen 31-01-2018]

[9] TENNESSEE, Univ. of California B. o. ; LTD.., NAG: *LAPACK unblocked QR*. http://www.netlib.org/lapack/explore-3.1.1-html/dgeqr2.f.html, 2006. – [Online; zugegriffen 31-01-2018]

[10] TENNESSEE, University of: *BLAS Technical Forum*. `http://www.netlib.org/blas/blast-forum/`, 2001. – [Online; zugegriffen 03-06-2018]

Name: Florian Krötz Matrikelnummer: 884948

Erklärung

Ich erkläre, dass ich die Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Ulm, den .....

Florian Krötz