



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 19. August 2018

© 2018 Florian Krötz

Satz: PDF- \LaTeX 2 _{ϵ}

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	BLAS	3
2.1	Datenstruktur für Matrizen	3
2.2	Einige BLAS-Routinen	7
2.2.1	Matrix-Matrix Produkt (gemm)	7
2.2.2	Matrix-Vektor Produkt (gemv)	7
2.2.3	Rank1 update (ger)	8
2.2.4	Matrix-Matrix Produkt (trmm)	8
2.2.5	Matrix-Vektor Produkt (trmv)	8
3	QR-Zerlegung	10
3.1	Definition	10
3.1.1	Beispiel für eine Anwendung	10
3.2	Householder-Transformation	11
3.2.1	Householder Vector	13
3.2.2	Householder-Transformation anwenden	15
3.2.3	QR-Zerlegung mittels Householder-Transformationen	15
3.3	Geblockte QR-Zerlegung	18
3.3.1	Berechnung der Matrix T	20
3.3.2	Anwenden von $I - VTV^T$	21
3.3.3	Wahl der Blockgröße bs	24
4	Implementierung und Benchmarks	25
4.1	Bibliothek	25
4.1.1	Algorithmus	27
4.2	Fehlerschätzer	28
4.3	Benchmarks	28
4.3.1	Aufwand	28
4.3.2	FLOPS	29
4.3.3	Vorgehensweise	29

Inhaltsverzeichnis

4.3.4	Testsystem	29
4.4	Ergebnisse	30
4.4.1	Ungeblockter Algorithmus	30
4.4.2	Cache-optimierter Algorithmus	30
4.5	Fazit	33
A	Block Reflector	34
	Literaturverzeichnis	38

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 QR-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 vermeiden 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 Subprograms) 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.

2 BLAS

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

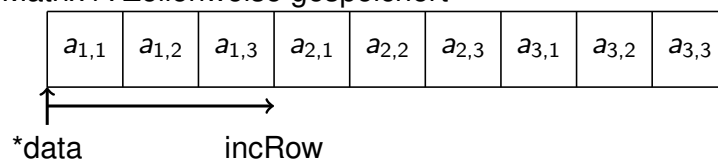
Hier werden einige Aspekte von BLAS beschrieben die zur Berechnung der QR-Zerlegung notwendig sind.

2.1 Datenstruktur für Matrizen

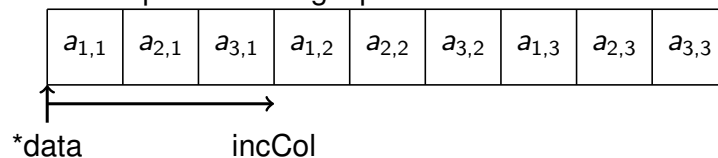
Vollbesetzte Matrizen werden bei BLAS entweder zeilen- oder spaltenweise abgespeichert. Das bedeutet, dass entweder die Zeilen- oder die Spalten der Matrix hintereinander im Speicher stehen.

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

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 Dimensions Informationen sind vom Typ `size_t`. `ptrdiff_t` und `size_t` sind Datentypen für Ganzzahlen. Der Unterschied zwischen den Datentypen ist `size_t` kann nur Werte darstellen die ≥ 0 sind, `ptrdiff_t` dann auch negative Werte darstellen. Negative Werte von `incRow` und `incCol` können nützlich sein, falls die Daten nicht auf Steigend 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 den selben 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 data-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, ob die Matrizen *A* und *B* transponiert zu betrachten sind.

Die Funktion berechnet

$$C \leftarrow \beta C + \alpha AB \quad (2.1)$$

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] Blas technical forum netlib

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

$$y \leftarrow \beta y + \alpha Ax \quad (2.2)$$

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.

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

$$A \leftarrow A + \alpha xy^T \quad (2.3)$$

2.2.4 Matrix-Matrix Produkt (trmm)

Die Funktion *trmm* berechnet das Matrix-Matrix-Produkt einer Dreiecksmatrix mit einer voll besetzten Matrix. Der Funktion wird 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

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

2.2.5 Matrix-Vektor Produkt (trmv)

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

$$x \leftarrow \alpha Ax \quad (2.5)$$

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

$$A = QR \quad (3.1)$$

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

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

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

$$R = \begin{pmatrix} * & * & * \\ & * & * \\ & & * \\ \hline & & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{R} \\ 0 \end{pmatrix}$$

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

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

Eine Lösung des Gleichungssystems

$$\hat{R}x = Q^T b \quad (3.4)$$

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

3.2 Householder-Transformation

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

$$H = I - 2 \frac{vv^T}{v^T v} \quad (3.5)$$

wird als Householder-Transformation und der Vektor $v \in \mathbb{R}^n$ als Householder-Vektor bezeichnet. 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

$$Hx = \alpha e_1 \quad (3.6)$$

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 .

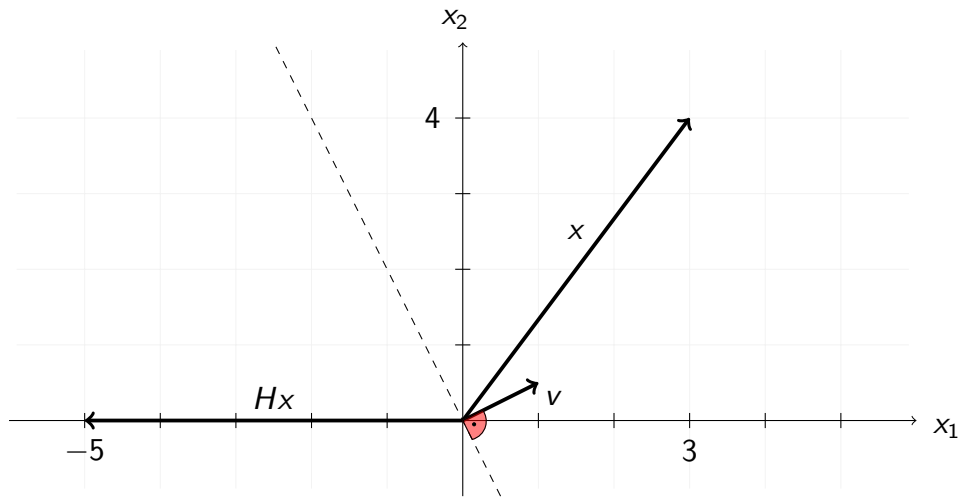


Abbildung 3.1: Beispiel Householder-Transformation mit $x = (3, 4)^T$

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 Vector

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

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

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 das letzte = (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.

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

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 $\tau = \frac{2}{v^T v}$ 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

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

Algorithmus 1 Housholder-Vector(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 Housholder-Transformation $H = I - \tau v v^T$ auf die Matrix A umgangen werden, indem man geschickt klammert.

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

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

3.2.3 QR-Zerlegung mittels Housholder-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 Housholder-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:

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

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

Diese Householder-Transformationen werden auf die Matrix angewandt. Führt 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

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

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

Algorithmus 2 Ungeblockte Householder-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  $i = 0, 1, 2, \dots, n-1$  do
3:    $(v_i, \tau_i) \leftarrow \text{householdervector}(\hat{a}_i)$ 
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

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

Da die ersten $j - 1$ Einträge Null sind und der Vektor so normiert wurde, dass der j Eintrag 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 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).

$$A = \begin{pmatrix} A_{0,0} & A_{0,bs} \\ A_{bs,0} & A_{bs,bs} \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

Die Abbildung 3.2 zeigt schematisch die Partitionierung von A .

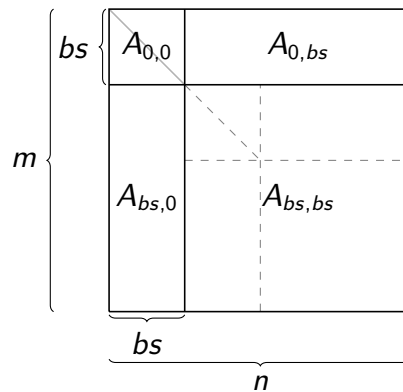


Abbildung 3.2: Aufteilung der Matrix A

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

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

rithmus 2) berechnet.

$$\begin{pmatrix} A_{0,0} \\ A_{bs,0} \end{pmatrix} \leftarrow \begin{pmatrix} Q_{0,0} \setminus R_{0,0} \\ Q_{bs,0} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

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

Nun muss man die bei der ungeblockten QR-Zerlegung verwendeten Householder-Transformationen auf die restliche Matrix $\begin{pmatrix} A_{0,bs} \\ A_{bs,bs} \end{pmatrix}$ anwenden.

Das Produkt mehrerer Householder-Transformationen kann geschrieben werden als:

$$H_1 H_2 \cdots H_k = I - V T V^T \quad \text{mit} \quad H_i = I - \tau_i v_i v_i^T$$

[3]

Die Anwendung der Householder-Transformationen $I - V * T * V^T$ auf $\begin{pmatrix} A_{bs,bs} \\ A_{bs,bs} \end{pmatrix}$ erfolgt in zwei Schritten. Zuerst wird die Matrix T berechnet. Dann wird $I - V * T * V^T$ auf $\begin{pmatrix} A_{bs,bs} \\ A_{bs,bs} \end{pmatrix}$ angewandt.

$$\begin{pmatrix} A_{0,bs} \\ A_{bs,bs} \end{pmatrix} \leftarrow H^T \begin{pmatrix} A_{0,bs} \\ A_{bs,bs} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

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

So kommt man auf den Algorithmus

Algorithmus 3 Geblockter Algorithmus

```
1: Input:  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 
2: for  $i = 0, 1, 2, \dots, n-1$  do
3:    $\text{qr\_unblk}(A_i, \tau_i)$  (Algorithmus 2)
4:   if  $i + ib \leq n$  then
5:      $\text{calc } T$  (Abschnitt 3.3.1)
6:      $\text{apply } H$  (Abschnitt 3.3.2)
7:   end if
8: end for
9: if  $i \leq \min(m, n)$  then
10:   $\text{qr\_unblk}(A_i, \tau_i)$  (Algorithmus 2)
11: end if
12: Output:  $A$  QR zerlegt, Vektor  $\tau \in \mathbb{R}^n$ 
```

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

$$H_1 H_2 \dots H_k = I - V T V^T \quad \text{mit} \quad H_i = I - \tau_i v_i v_i^T \quad (3.12)$$

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 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  $i = 0, 1, 2, \dots, k$  do
3:   if  $\tau_i == 0$  then
4:      $T_{1:i,i} = 0$ 
5:   else
6:      $v_{ii} = v_{i,i}$ 
7:      $v_{i,i} = 1$ 
8:      $T_{0:i,i} = -\tau_i \cdot V_{i:n-i,0:i}^T \cdot V_{i:n-i,i}$  (dgmV)
9:      $v_{i,i} = v_{ii}$ 
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

$$C \leftarrow HC = C - VTV^T C \quad \text{oder} \quad C \leftarrow H^T C = C - VT^T V^T C \quad (3.13)$$

Der Zweck der Funktion ist es, die Householder-Transformationen, die bei der Bereicherung 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.

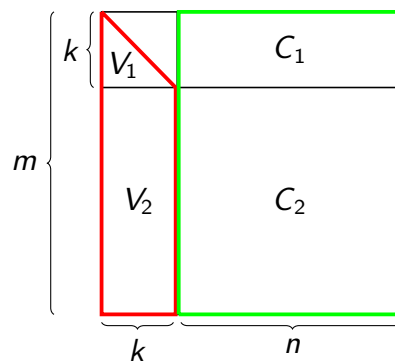


Abbildung 3.3: Partitionierung von A für `larfb`

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

$$V = \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad C = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

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 das Matrix-Matrix-Produkt $V_1 \cdot C_1$ und $V_2 \cdot C_2$ möglich ist.

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 vom (3.13) auf Algorithmus 5

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

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

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

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

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

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:    $W \leftarrow W + C_2^T * V_2$  (gemm)
6: end if
7: if trans then
8:    $W \leftarrow W * T^T$  (trmm)
9: else
10:   $W \leftarrow W * T$  (trmm)
11: end if
12: if  $m > k$  then
13:   $C_2 \leftarrow C_2 - V_2 * W^T$  (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

algorithmus 4 nur Matrixprodukte

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 3 ausgegeben. Zuerst die komplette Matrix (Zeile 3), dann eine ein Block der Matrix beginnend in

der dritten Zeile und dritten Spalte. Als letztes wird der selbe 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 Verwaltungsinformationen 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 Funktion 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).

4.1.1 Algorithmus

Beispiel: Ungeblockte QR-Implementierung vom Algorithmus 2 (Seite 16)

```

1  size_t mn = std::min(m,n);
2  DenseVector<T> work(mn);
3  for (std::size_t i = 0; i < m
4  n; ++i){
5      householderVector(A(i,i), A.col(i+1,i),tau(i));
6      if (i < n && tau(i) != 0) {
7          All = A(i,i);
8          A(i,i) = 1;
9          mv(1, A.block(i,i+1).view(hpc::matvec::Trans::view),
10            A.col(i,i), 0, work.block(i+1));
11          rank1(-tau(i), A.col(i,i), work.block(i+1),
12              A.block(i,i+1));
13          A(i,i) = All;
14      }
15 }

```

Die anderen Algorithmen wurden analog implementiert, siehe Anhang.

4.2 Fehlerschätzer

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

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

$\|\cdot\|_i$ 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

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

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

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

$\#QR$ 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 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 16) 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*.

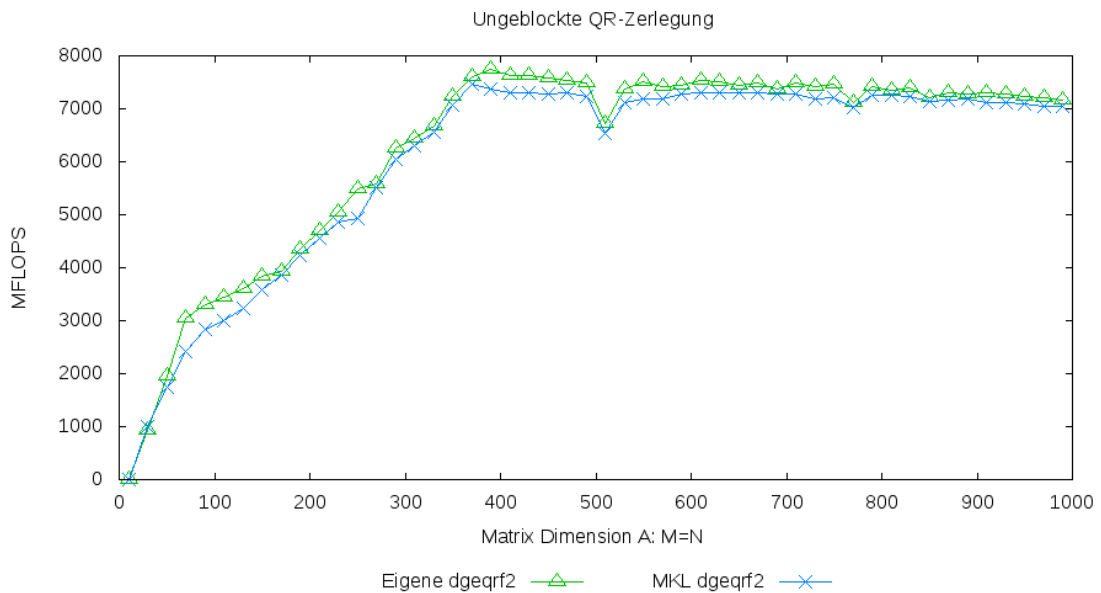


Abbildung 4.1: Benchmark ungeblockte QR-Zerlegung

4.4.2 Cache-optimierter Algorithmus

Die Abbildung 4.2 zeigt den Vergleich des Algorithmus 3 (Seite 20) mit verschiedenen Blockgrößen.

Als Blockgrößen wurden die Zweierpotenzen $2^3 = 8$ bis $2^7 = 128$ getestet.

4 Implementierung und Benchmarks

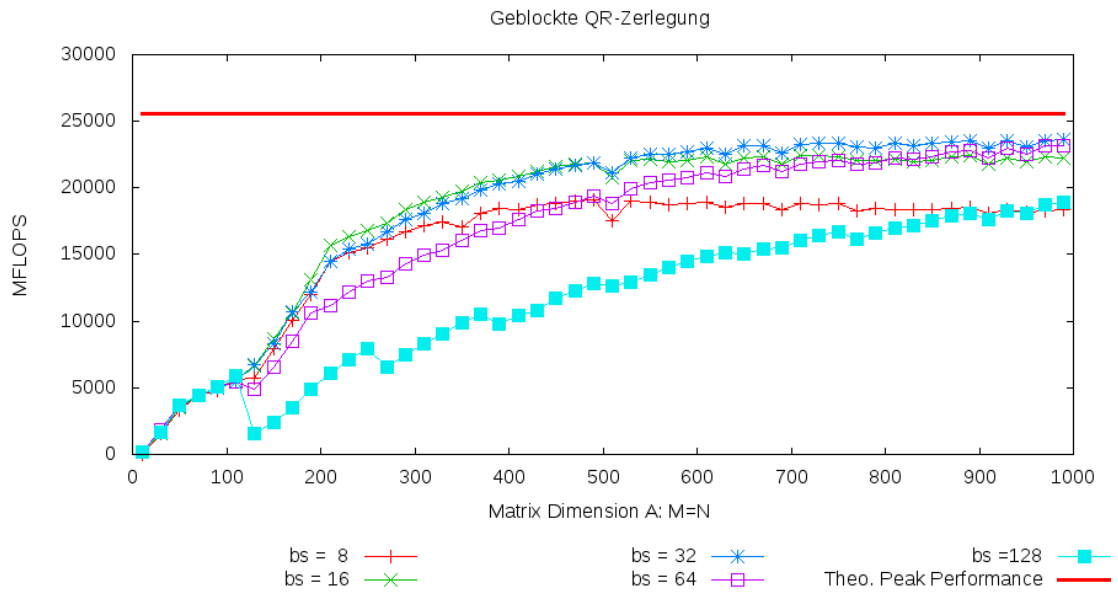


Abbildung 4.2: Benchmark geblockte QR-Zerlegung

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 besser.

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

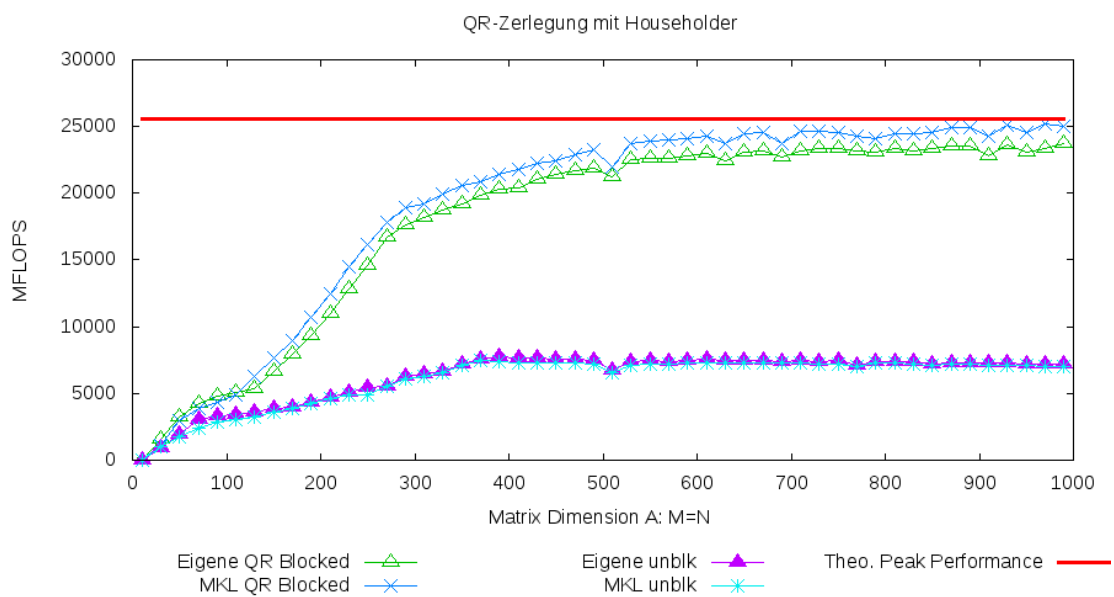


Abbildung 4.3: Benchmark geblockte QR-Zerlegung

4.5 Fazit

Die Benchmarktests erbrachten folgende Ergebnisse:

- Der ungeblockte Algorithmus beider Implementierungen erreicht nicht die *peak performance*.
- Der selbst programmierte ungeblockte Algorithmus ist etwas 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.

A Block Reflector

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

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

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:

$$\begin{aligned} H_{1,2} x &= (I - VTV^T)x = x - VTV^T x \\ &= x - (v_1, v_2) \begin{pmatrix} a & b \\ 0 & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1^T \\ v_2^T \end{pmatrix} x \\ &= x - (v_1, v_2) \begin{pmatrix} a & b \\ 0 & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1^T x \\ v_2^T x \end{pmatrix} \\ &= x - (v_1, v_2) \begin{pmatrix} av_1^T x + bv_2^T x \\ cv_2^T x \end{pmatrix} \\ &= x - v_1(av_1^T x + bv_2^T x) - v_2(cv_2^T x) \\ &= x - av_1 v_1^T x - bv_1 v_2^T x - cv_2 v_2^T x \end{aligned}$$

Koeffizientenvergleich

$$a = \tau_1$$

$$b = -\tau_1 \tau_2 (v_1^T v_2)$$

$$c = \tau_2$$

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

n=3

vorwärts:

$$\begin{aligned}
 H_1 H_2 H_3 x &= (I - \tau_1 v_1 v_1^T)(I - \tau_2 v_2 v_2^T)(I - \tau_3 v_3 v_3^T)x \\
 &= (I - \tau_1 v_1 v_1^T - \tau_2 v_2 v_2^T + \tau_1 v_1 v_1^T \tau_2 v_2 v_2^T)(I - \tau_3 v_3 v_3^T)x \\
 &= (I - \tau_1 v_1 v_1^T - \tau_2 v_2 v_2^T - \tau_3 v_3 v_3^T \\
 &\quad + \tau_1 v_1 v_1^T \tau_2 v_2 v_2^T + \tau_1 v_1 v_1^T \tau_3 v_3 v_3^T + \tau_2 v_2 v_2^T \tau_3 v_3 v_3^T \\
 &\quad - \tau_1 v_1 v_1^T \tau_2 v_2 v_2^T \tau_3 v_3 v_3^T)x \\
 &= x - \tau_1 v_1 v_1^T x - \tau_2 v_2 v_2^T x - \tau_3 v_3 v_3^T x \\
 &\quad + \tau_1 \tau_2 (v_1^T v_2) v_1 v_2^T x + \tau_1 \tau_3 (v_1^T v_3) v_1 v_3^T x + \tau_2 \tau_3 (v_2^T v_3) v_2 v_3^T x \\
 &\quad - \tau_1 \tau_2 \tau_3 (v_1^T v_2 v_2^T v_3) v_1 v_3^T x
 \end{aligned}$$

rückwärts:

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

Koeffizienten Vergleich

$$a = \tau_1$$

$$b = -\tau_1 \tau_2 (v_1^T v_2)$$

$$c = -\tau_1 \tau_2 \tau_3 (v_1^T v_2 v_2^T v_3) + \tau_1 \tau_3 (v_1^T v_3)$$

$$d = \tau_2$$

$$e = -\tau_2 \tau_3 (v_2^T v_3)$$

$$f = \tau_3$$

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

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

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