# Cache-optimierte QR-Zerlegung Bachelor Kolloquium

Florian Krötz

Universität Ulm

15. Oktober 2018

#### Cache-optimierte QR-Zerlegung

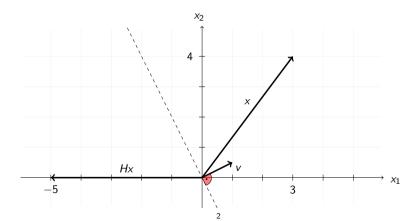
ightharpoonup A = QR

$$\left(\begin{array}{c} A \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} Q \end{array}\right) * \left(\begin{array}{c} Q \end{array}\right)$$

- QR-Zerlegung mittels Householder-Transformation
- Cache-optimierten Algorithmus implementieren
- Anwendungen:
  - ightharpoonup LGS Ax = b lösen mit QR
  - Lineares Ausgleichsproblem mittels kleinstes Fehlerquadrat
  - Kernoperation im QR-Verfahren

#### Householder-Transformation

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



#### Householder-Transformation

- Householder-Vektor berechnen
  - Normieren  $v_1 = 1$

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

Householder-Transformation anwenden

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

Vektor-Rechenoperationen und Vektor-Matrix-Rechenoperationen

$$ightharpoonup A = QR$$

$$H_1A = \left( egin{array}{ccccc} * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \end{array} 
ight)$$

$$H_1 = (\hat{H_1})$$
 ,  $H_2 = \begin{pmatrix} I_1 & 0 \\ \hline 0 & \hat{H_2} \end{pmatrix}$  ,  $H_i = \begin{pmatrix} I_{i-1} & 0 \\ \hline 0 & \hat{H_i} \end{pmatrix}$ 

$$ightharpoonup A = QR$$

$$H_2H_1A = \left( egin{array}{cccc} * & * & * & * & * \ 0 & * & * & * & * \ 0 & 0 & * & * & * \ 0 & 0 & * & * & * \end{array} 
ight)$$

$$H_1 = (\hat{H_1})$$
 ,  $H_2 = \begin{pmatrix} I_1 & 0 \\ \hline 0 & \hat{H_2} \end{pmatrix}$  ,  $H_i = \begin{pmatrix} I_{i-1} & 0 \\ \hline 0 & \hat{H_i} \end{pmatrix}$ 

$$ightharpoonup A = QR$$

$$H_3H_2H_1A = \left( egin{array}{cccc} * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \end{array} 
ight)$$

$$H_1 = (\hat{H_1})$$
 ,  $H_2 = \begin{pmatrix} I_1 & 0 \\ \hline 0 & \hat{H_2} \end{pmatrix}$  ,  $H_i = \begin{pmatrix} I_{i-1} & 0 \\ \hline 0 & \hat{H_i} \end{pmatrix}$ 

$$ightharpoonup A = QR$$

$$H_3H_2H_1A = \begin{pmatrix} r_{1,1} & r_{1,2} & r_{1,3} & r_{1,4} \\ v_2^{(1)} & r_{2,2} & r_{2,3} & r_{2,4} \\ v_3^{(1)} & v_3^{(2)} & r_{3,3} & r_{3,4} \\ v_4^{(1)} & v_4^{(2)} & v_4^{(3)} & r_{4,4} \end{pmatrix}$$

$$H_1 = (\hat{H_1})$$
 ,  $H_2 = \begin{pmatrix} I_1 & 0 \\ \hline 0 & \hat{H_2} \end{pmatrix}$  ,  $H_i = \begin{pmatrix} I_{i-1} & 0 \\ \hline 0 & \hat{H_i} \end{pmatrix}$ 

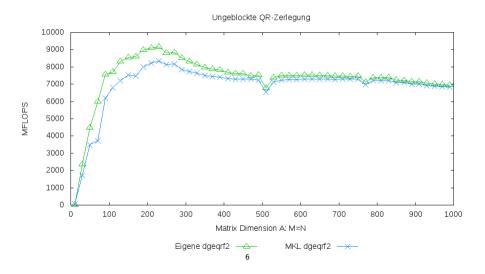
#### Benchmark

▶ Aufwand QR-Zerlegung mittels Householder-Transformation  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $m \ge n$ 

$$\#QR = n \cdot \left(\frac{23}{6} + m + \frac{n}{2} + n \cdot \left(m - \frac{n}{3}\right) + \frac{5}{6} + n \cdot \left(\frac{1}{2} + m - \frac{n}{3}\right)\right) = \mathcal{O}(n^2 m)$$

$$FLOPS = \frac{Aufwand}{\Delta t}$$

▶ Peak performance 25,6 GFLOPS auf dem Testsystem mit i5-3470-CPU



#### Mehrere Householder-Transformationen anwenden

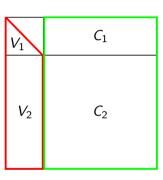
Ansatz

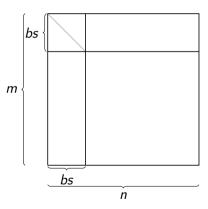
$$\hat{H} = H_1 H_2 ... H_k = I - VTV^T$$
 mit  $H_i = I - \tau_i v_i v_i^T$ 

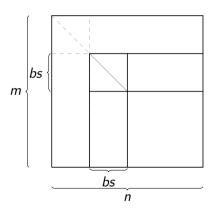
- ► Vektor-Matrix-Rechenoperationen
- Householder-Transformationen anwenden

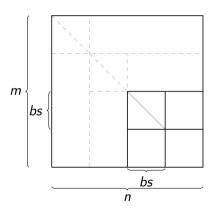
$$C \leftarrow \hat{H}C = C - VTV^TC$$

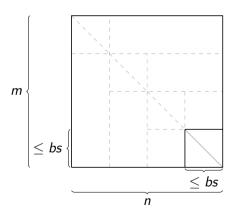
Matrix-Matrix-Produkte



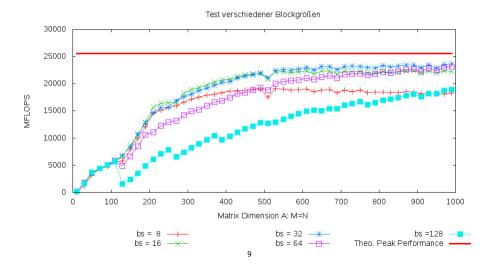


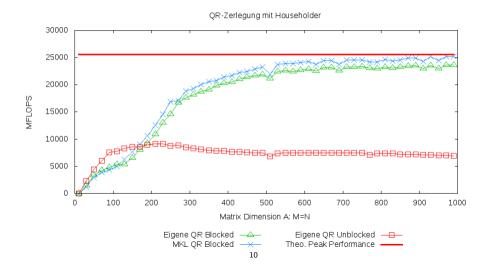






### Test verschiedener Blockgrößen





#### **Fazit**

- Der ungeblockte Algorithmus erreicht nicht die peak performance.
- Der eigene ungeblockte Algorithmus ist etwa 5% schneller als MKL.
- Geblockte Algorithmus erreicht fast die peak performance.
- Der geblockte Algorithmus dgeqrf der MKL ist etwas schneller. Der selbst implementierte Algorithmus erreicht bis zu 94% die Performance der MKL.
- Der geblockte Algorithmus ist um den Faktor 3 schneller als der ungeblockte.