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 31. Mai 2018

Satz: PDF-LaTeX 2ε

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Wozu dient die QR-Zerlegung?

Warum muss die QR-Zerlegung schnell sein?

1.1 Cache

1.2 Intel MKL

Kapitel über die Wichtigkeit der Intel MKL.

1.2.1 Anwendung der QR-Zerlegung

-LGS lösen
-Ausgleichsprobleme lösen
-QR-Verfahren Eigenwerte b erechnen.

2 BLAS

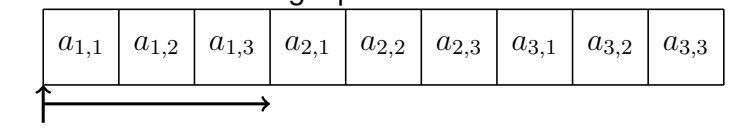
Die Abkürzung BLAS steht für Basic Linear Algebra Subprograms.

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.

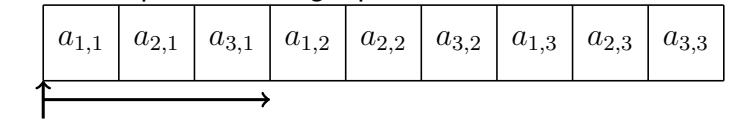
$$A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

Matrix A Zeilenweise gespeichert



*data incRow

Matrix A Spaltenweise gespeichert



*data incCol

Eine Datenstruktur benötigt folgende Elemente:

- einen Zeiger auf eine Speicherfläche
- Informationen ob die Matrix zeilen- oder spaltenweise gespeichert ist

- die Dimension der Matrix.

Eine derartige Datenstruktur könnte in C so aussehen.

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

Für Intel MKL Routinen müssen die Matrizen zeilenweise gespeichert sein.

2.2 Einige BLAS-Routinen

Im Folgenden werden einige BLAS-Routinen beschrieben, die bei der QR-Zerlegung benutzt werden. BLAS-Routinen werden meist nach folgendem Schema benannt. Der erste Buchstabe im Namen gibt an für welchen Datentype die Funktion implementiert wurde. Der Rest beschreibt die Funktion der Funktion.
Beispiel: „dgemm“, das d zeigt an die Funktion ist für Doubles und „gemm“ steht für „generel Matrix Matrix“, die Funktion berechnet also das Matrix-Matrix Produkt für Matrizen deren Einträge Doubles sind.

2.2.1 Matrix-Matrix Produkt (gemm)

Die „gemm“ Funktion berechnet das Matrix-Matrix Produkt. Der Funktion werden die Matrizen A, B und C und die Skalare α und β übergeben. Außerdem werden 2 Flags übergeben ob die Matrizen A und B transponiert werden sollen.
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 somit mit 0 überschrieben.

Blas tecnicla forum netlib

2.2.2 Matrix-Vector Produkt (gemv)

Die Funktion „gemv“ berechnet das Matrix-Vector Produkt. Der Funktion wird 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

$$y \leftarrow \beta y + \alpha A x \tag{2.2}$$

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

2.2.3 Rank1 update (ger)

Die Funktion „ger“ berechnet ein dyadische Produkt aus den Vektoren x und y, skaliert die daraus resultierende Matrix mit α und addiert das Ergebnis auf A.// Der Funktion wird 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 wird die Dreiecksmatrix A, die Matrix B und das Skalar α übergeben. Außerdem werden Flags mit übergeben die anzeigen ob A eine obere oder unter 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.
Die Funktion berechnet

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

2.2.5 Matrix-Vector Produkt (trmv)

Die Funktion berechnet das Matrix-Vector Produkt für Dreiecksmatrizen. Die Funktion berechnet

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

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 $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$ [3]

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

3.1.1 Beispiel

Lösung eines Minimierungsproblem

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

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

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

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

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

Also löst

$$Rx = Q^T b \tag{3.4}$$

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

3.2 Householder-Transformation

Sei $v \in \mathbb{R}^n$ ein Vektor dann wird die $n \times n$ Matrix

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

als Householder-Transformation und der Vektor v als Householder-Vektor bezeichnet. Eine Householder-Transformation $H = I - 2\frac{vv^T}{v^T v}$ ist orthogonal und symmetrisch. [3]
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]

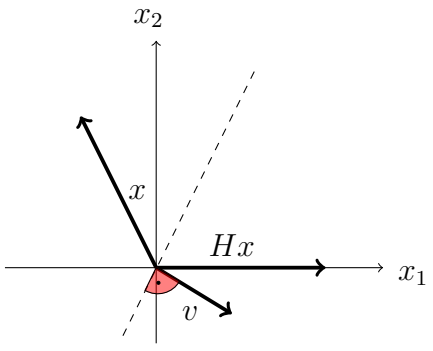


Abbildung 3.1: Beispiel Householder-Transformation mit $x = (-1, 2)^T$

Eine Householder-Transformation kann die eine Matrix A wie folgt transformieren.

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

So erhält man folgende Faktorisierung

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

Q ist also das Produkt aller Householder-Transformationen.

3.2.1 Householder Vector

Damit (3.6) gilt, muss der Vektor folgendermaßen berechnet werden.
Mit $Hx = x - 2\frac{vv^T}{v^T v}x = x - \lambda v \stackrel{!}{=} \alpha e_1$ folgt $v \in \text{span}\{x - \alpha e_1\}$. [3]
Die Definition des Vektors $v = t(x - \alpha e_1)$ wird in $Hx = \alpha e_1$ eingesetzt

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

Damit das Letzte $=$ gilt muss

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

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

Im Skript von Numerik 1 [3] 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.

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

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

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

Mit der Normierung kann man den Faktor $\tau = \frac{2}{v^T v}$ berechnen.

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

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

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

Das macht man, weil die Berechnung des Skalarprodukts relativ aufwändig ist. Da man das Skalarprodukt zur Berechnung des Householder-Vektors benötigt, kann man damit direkt den Faktor τ berechnen.

Algorithmus 1 Housholder-Vector(LAPACK DLARFG)

Input: $x \in \mathbb{R}^n$
$\alpha = -1 * \text{sign}(x_1)\|x\|_2$
$\tau = \frac{x_1 - \alpha}{\alpha}$
$v = \frac{x - \alpha e_1}{x_1 - \alpha}$
Output: Householder-Vektor v , τ

3.2.2 Householder-Transformation anwenden

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

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

Statt eines Matrix-Matrix-Produkts muss man nur ein Matrix-Vektor-Produkt und ein dyadisches Produkt berechnen. Das Matrix-Vektor-Produkt und das dyadische Produkt haben nur einen Aufwand von $O(n^2)$.

Das führt zum Algorithmus 2.

Algorithmus 2 Ungeblockte Housholder-Transformation

Input: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$
for i = 0 : n **do**
  (v_i, τ_i) $\leftarrow$ housevector($A(i : m, i)$)
  $w \leftarrow v^T * A(i : m, i : n)$ (dgemv)
  $A(i : m, i : n) \leftarrow \tau * v * w + A$ (dger)
  if i > m **then**
    $A(i + 1 : m, i) \leftarrow v(2 : m - i + 1)$
  end if
end for
Output: A QR zerlegt, Vektor $\tau \in \mathbb{R}^n$

Matizen sind 0 indizeiert notiert

Der Algorithmus 2 überschreibt die Matrix A mit R. Da R eine obere Dreiecksmatrix ist, werden unter der Diagonale die Housholder-Vektoren gespeichert. Da die Householder-Vektoren auf $v_1 = 1$ normiert wurden, muss das erste Element des Vektors nicht mit gespeichert werden. Die Householder-Vektoren können dadurch unterhalb der Diagonalen gespeichert werden. Die Matrix A hat also die Form

$$A = \begin{pmatrix} r_{1,1} & r_{1,2} & r_{1,3} \\ v_1 & r_{2,2} & r_{2,3} \\ v_1 & v_2 & r_{3,3} \\ v_1 & v_2 & v_3 \end{pmatrix}$$

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 auf von LAPACK verwendet wird. Die entsprechende Funktion bei LAPACK heißt „DGEQRF“ [4].

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 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ geblockt, mit einer geeigneten Blockgröße bs.

$$A = \left(\begin{array}{c|c} A_{0,0} & A_{0,\text{bs}} \\ \hline A_{\text{bs},0} & A_{\text{bs,bs}} \end{array} \right) \tag{3.7}$$

Die Abbildung 3.2 zeigt schematisch die Partitionierung von A.

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

Für diesen Block wird nun die QR-Zerlegung mit dem ungeblockten Algorithmus (Algorithmus 2) berechnet.

$$\left(\frac{A_{0,0}}{A_{\text{bs},0}} \right) \leftarrow \left(\frac{Q_{0,0} \backslash R_{0,0}}{Q_{\text{bs},0}} \right) \tag{3.8}$$

Im Block $A_{0,0}$ steht nun 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 ungeblocketn QR-Zerlegung verwendeten Housholder-Transformationen auf die Restliche Matrix $\left(\frac{A_{0,\text{bs}}}{A_{\text{bs,bs}}} \right)$ anwenden.

Man kann das Produkt mehrerer Householder-Transformationen schreiben als

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

[1]

Die Anwendung der Matrix $I - V * T * V^T$ auf $\left(\frac{A_{\text{bs,bs}}}{A_{\text{bs,bs}}} \right)$ erfolgt in 2 Schritten.

Zuerst wird von der Funktion „larft “ die Matrix T berechnet. Dann wird $I - V * T * V^T$ von der Funktion „larfb“ auf $\begin{pmatrix} A_{\text{bs,bs}} \\ \hline A_{\text{bs,bs}} \end{pmatrix}$ angewendet.

$$\begin{pmatrix} A_{0,\text{bs}} \\ \hline A_{bs,\text{bs}} \end{pmatrix} \leftarrow H^T \begin{pmatrix} A_{0,\text{bs}} \\ \hline A_{bs,\text{bs}} \end{pmatrix} \tag{3.9}$$

Der Block $A_{bs,\text{bs}}$ wird erneut aufgeteilt. Das ist in Abbildung 3.2 gestrichelt dargestellt.

Fahre solange fort bis $A_{bs,\text{bs}}$ gleich der Blockgröße ist.

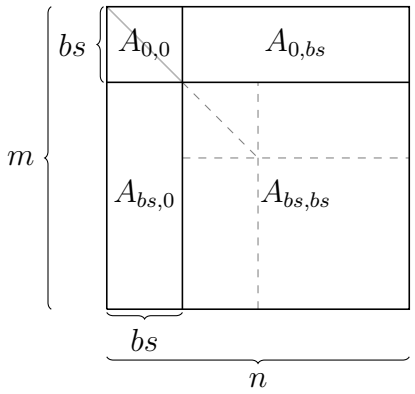


Abbildung 3.2: Partitionierung vom A

3.3.1 Berechnung der Matrix T

Die Funktion „larft“ berechnet die Matrix T.

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

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

Warum und wie das Funktoniert wird hier beschreiben [1].

3.3.2 Anwenden von $I - VTV^T$ larfb

Die Funktion „larfb “ wendet die Matrix $I - VTV^T$ auf eine Matrix C an.

Sie bekommt eine Dreiecksmatrix $V \in \mathbb{R}^{m \times k}$, eine 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, im Vektor τ die zu den Householder-Vektoren gehörende τ_i. Die Matrix C wird upgedatet indem die Block Reflector Matrix $H = C - VTV^T$ von rechts auf die Matrix C angewendet wird.

Ein weiterer Übergabeparameter gibt an ob die Block Reflector Matrix transponiert werden soll. Die Funktion berechnet also

$$C \leftarrow HC = C - VTV^TC \quad \text{oder} \quad C \leftarrow H^TC = C - VT^TV^TC$$

Die Abbildung 3.3 zeigt die Partitionierung der Matrix A für die Funktion larfb.
Falls $m > k$ werden die Matrizen V und C aufgeteilt in $V = \begin{pmatrix} V_1 \\ \hline V_2 \end{pmatrix}$ und $C = \left(\frac{C_1}{C_2}\right)$.
Dabei wird V genau so gewählt, dass $V_1 \in \mathbb{R}^{k \times k}$ der Dreiecksteil der Matrix und quadratisch 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 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.

$$(C_1^T * V_1 * T * V_1^T)^T$$
$$V_1 * T^T * V_1^T * C_1$$

Dies führt zu den

Algorithmus 3 Block reflector anwenden

$W \leftarrow C_1^T$ (copy)
$W \leftarrow W * V_1$ (trmm)
if m > k **then**
  $W \leftarrow W + C_2^T * V_2$ (gemm)
end if
$W \leftarrow W * T^T$ or $W * T$ (trmm)
if m > k **then**
  $C_2 \leftarrow C_2 - V_2 * W^T$ (gemm)
end if
$W \leftarrow W * V_1^T$ (trmm)
$C_1 \leftarrow C_1 - W^T$

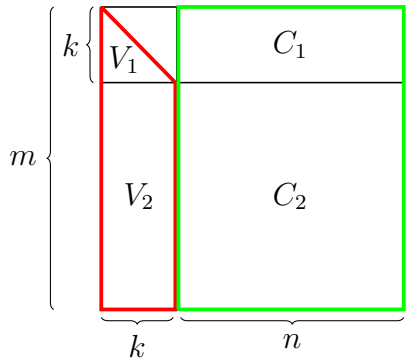


Abbildung 3.3: Partitionierung vom A für larfb

3.3.3 Iterativer Algorithmus

Algorithmus 4 Iterativer Algorithmus

for i = 0 : n **do**
  QR = A;
  if i + ib > n **then**
    Calc T: $H = I - VTV^T$
    Apply H: $A = H^T A$
  end if
end for

4 Implementierung und Benchmarks

Die verwendete Bibliothek wurde in der Vorlesung High Performance Computing 1 entwickelt [2].

Die Bibliothek ist in C++ geschrieben. Es sind Klassen für Matrizen und Vektoren implementiert, sowie einige BLAS-Routinen.

eventuell Beispiel

4.1 Fehlerschätzer

Es wurde der Fehlerschätzer von ATLAS verwendet. Nach Quelle Fragen!

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

$\|\cdot\|_i$ 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

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

ϵ ist auf dem Test-System $2.220446 \cdot 10^{-16}$

4.2 MKL-Wrapper

4.3 Benchmarks

peak performance einzeichnen

A Quelltexte

In diesem Anhang sind einige wichtige Quelltexte aufgeführt.

```
1 #include<stdio.h>
2 int main(int argc, char ** argv) {
3   printf("Hallo HPC \n");
4   return 0;
5 }
```

B Block Reflector

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 Housholder-Vektoren enthält und eine oberen Dreiecksmatrix $T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ [1]
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

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

Koeffizienten Vergleich

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

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

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

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

Mit Induktion kann man zeigen... siehe paper Im Paper wird gezeit wie man das verallgemeinern kann. Und weiter?

B.0.1 Orthogonal

Eine quadratische Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist orthogonal, dann gilt

$$QQ^T = Q^TQ = I$$

Produkt orthogonaler Matrizen ist orthogonal. Sei $A^{-1} = A^T, B^{-1} = B^T$

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1} = B^TA^T = (AB)^T$$

Die Househlder-Transformation $H = I - 2\frac{vv^T}{v^Tv}$ ist symmetrisch und orthogonal das heißt $H^{-1} = H^T$
Da vv^T symmetrisch ist ($(vv^T)^T = vv^T$), folgt

$$H^T = \left(I - 2\frac{vv^T}{v^Tv}\right)^T = I - 2\frac{vv^T}{v^Tv} = H$$

Orthogonalität

$$HH^T = \left(I - 2\frac{vv^T}{v^Tv}\right)\left(I - 2\frac{vv^T}{v^Tv}\right) = I - 2\frac{vv^T}{v^Tv} - 2\frac{vv^T}{v^Tv} + \underbrace{4\frac{vv^Tvv^T}{(v^Tv)^2}}_{=4\frac{(v^Tv)vv^T}{(v^Tv)^2}=4\frac{vv^T}{v^Tv}} = I$$

$\Rightarrow H = I - VTV^T$ und Q sind orthogonal

Literaturverzeichnis

[1] 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

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

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

[4] 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]

[5] 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]

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