



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 5. Juni 2018

© 2018 Florian Krötz

Satz: PDF- \LaTeX 2 _{ϵ}

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Cache	1
1.2	Intel MKL	1
1.2.1	Anwendung der QR-Zerlegung	1
2	BLAS	2
2.1	Datenstruktur für Matrizen	2
2.2	Einige BLAS-Routinen	3
2.2.1	Matrix-Matrix Produkt (gemv)	3
2.2.2	Matrix-Vector Produkt (gemv)	4
2.2.3	Rank1 update (ger)	4
2.2.4	Matrix-Matrix Produkt (trmm)	4
2.2.5	Matrix-Vector Produkt (trmv)	5
3	QR-Zerlegung	6
3.1	Definition	6
3.1.1	Beispiel	6
3.2	Householder-Transformation	7
3.2.1	Householder Vector	8
3.2.2	Householder-Transformation anwenden	10
3.3	Geblockte QR-Zerlegung	11
3.3.1	Berechnung der Matrix T	12
3.3.2	Anwenden von $I - VTV^T$ larfb	13
3.3.3	Iterativer Algorithmus	15
4	Implementierung und Benchmarks	16
4.1	Fehlerschätzer	16
4.2	MKL-Wrapper	17
4.3	Benchmarks	17
A	Quelltexte	18

B Block Reflector	19
B.0.1 Orthogonal	23
Literaturverzeichnis	24

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 berechnen.

2 BLAS

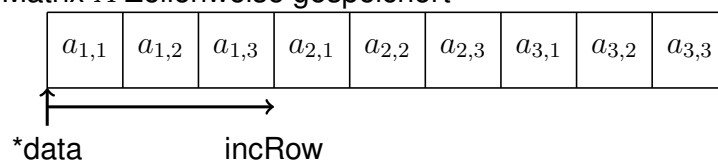
Die Abkürzung BLAS steht für Basic Linear Algebra Subprograms.

2.1 Datenstruktur für Matrizen

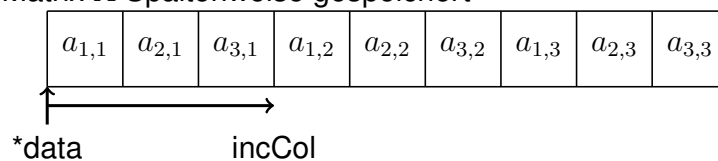
Vollbesetzte Matrizen werden bei BLAS entweder zeilen- oder spaltenweise abgespeichert. Das bedeutet, dass entweder die Zeilen- oder die Spalten der Matrix hintereinander im Speicher stehen.

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

Matrix A Zeilenweise gespeichert



Matrix A Spaltenweise gespeichert



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 „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 „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

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

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

Blas tecnica 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

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

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

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

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 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

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

2.2.5 Matrix-Vector Produkt (trmv)

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

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

3 QR-Zerlegung

3.1 Definition

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

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

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

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

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

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

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

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

Also löst

$$Rx = Q^T b \quad (3.4)$$

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

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

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

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

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]

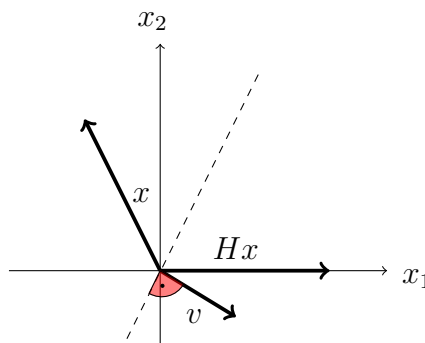


Abbildung 3.1: Beispiel Householder-Transformation mit $x = (-1, 2)^T$

Householder-Transformationen können die eine Matrix A wie folgt transformieren.

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

So erhält man folgende Faktorisierung

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

Q ist das Produkt aller Householder-Transformationen.

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.

3 QR-Zerlegung

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.

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

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

$$v = \frac{x - \alpha e_1}{x_1 - \alpha} \quad (3.7)$$

Mit der Normierung kann man den Faktor $\tau = \frac{2}{v^T v}$ berechnen. Setze dazu (3.7) in die Definition von τ ein.

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

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

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

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 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.

Das führt zum Algorithmus 2.

Algorithmus 2 Ungeblockte Householder-Transformation

Input: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$
for $i = 0 : n$ **do**
 $(v_i, \tau_i) \leftarrow \text{housevector}(A(i : m, i))$
 $w \leftarrow v^T * A(i : m, i : n)$ (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 $\tau \in \mathbb{R}^n$

Matrizen sind 0 indiziert notiert

Dieser Algorithmus 2 überschreibt die Matrix A mit R . Aufgrund der Dreieckstruktur 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 wer-

den. Die Matrix A hat die Form

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

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 b_s .

$$A = \left(\begin{array}{c|c} A_{0,0} & A_{0,b_s} \\ \hline A_{b_s,0} & A_{b_s,b_s} \end{array} \right) \quad (3.8)$$

Die Abbildung 3.2 zeigt schematisch die Partitionierung von A .

Die Blockgröße b_s wird so gewählt das die Geschwindigkeit der ungeblockten QR-Zerlegung für den Block $\begin{pmatrix} A_{0,0} \\ A_{b_s,0} \end{pmatrix}$ optimal ist.

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

$$\begin{pmatrix} A_{0,0} \\ A_{b_s,0} \end{pmatrix} \leftarrow \begin{pmatrix} Q_{0,0} \backslash R_{0,0} \\ Q_{b_s,0} \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

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

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

Man kann das Produkt mehrerer Householder-Transformationen schreiben als

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

[1]

Die Anwendung der Matrix $I - V * T * V^T$ auf $\begin{pmatrix} A_{bs,bs} \\ A_{bs,bs} \end{pmatrix}$ 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 $\begin{pmatrix} A_{bs,bs} \\ A_{bs,bs} \end{pmatrix}$ angewendet.

$$\begin{pmatrix} A_{0,bs} \\ A_{bs,bs} \end{pmatrix} \leftarrow H^T \begin{pmatrix} A_{0,bs} \\ A_{bs,bs} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

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

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

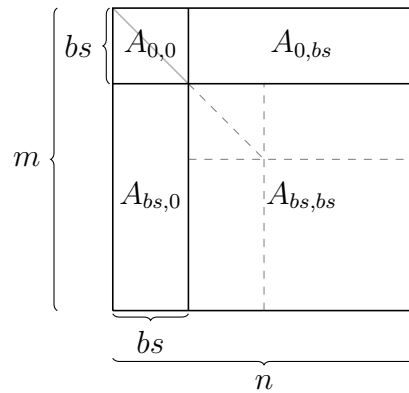


Abbildung 3.2: Partitionierung von A

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

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

Warum und wie das funktioniert 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 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, im Vektor τ die zu den Householder-Vektoren gehörende τ_i . Die Matrix C wird upgedatet indem die Block Reflector Matrix $H = I - VTV^T$ 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

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

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.

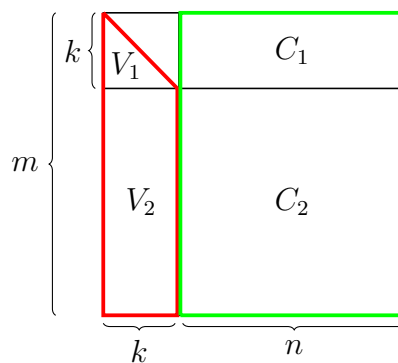


Abbildung 3.3: Partitionierung von A für larfb

Falls $m > k$ werden die Matrizen V und C aufgeteilt in $V = \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \end{pmatrix}$ und $C = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}$.

Dabei wird V genau so geteilt, dass $V_1 \in \mathbb{R}^{k \times k}$ der quadratisch 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 das 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.

$$C \leftarrow C - \underbrace{VT V^T C}_{V \cdot T \cdot V^T \cdot C}$$

$$(C^T \cdot V \cdot T^T \cdot V^T)^T$$

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)
 $C_1 \leftarrow C_1 - W^T$ 

```

3.3.3 Iterativer Algorithmus

Algorithmus 4 Iterativer Algorithmus

```
for  $i = 0 : n$  do  
   $QR = A$ ;  
  if  $i + i_b > n$  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.

Die Matrix-Klassen erlauben den zugriff auf Matrixblöcke.

eventuell Beispiel

4.1 Fehlerschätzer

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

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

$\|\cdot\|_i$ 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

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

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 $H_1 \cdot \dots \cdot H_n$ 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 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

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

Koeffizienten Vergleich

$$a = \tau_1$$

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

$$c = \tau_2$$

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

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.

B.0.1 Orthogonal

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

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

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

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

Die Householder-Transformation $H = I - 2\frac{vv^T}{v^T v}$ ist symmetrisch und orthogonal das heißt $H^{-1} = H^T$

Da vv^T symmetrisch ist $((vv^T)^T = vv^T)$, folgt

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

Orthogonalität

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

$\Rightarrow H = I - VTV^T$ 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