ulm university universität
uulm

Fakultät für Mathematik und Wirtschafts-wissenschaften

Institut für Numerische Mathematik

High Performance implementation of QR factorization

Bachelorarbeit an der Universität Ulm

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

Gutachter:
Dr. Michael Lehn
Dr. Un Leserlich

Betreuer:
Dr. Michael Lehn

2018

Fassung 16. April 2018

© 2018 Florian Krötz

Satz: PDF-LaTeX 2ε

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Für was brauch ich die QR?

Warum muss die schnell sein?

Was soll die Arbeit?

2 Intel MKL

Kapitel über die wichtigkeit der Intel MKL.

3 QR factorisation

3.1 QR-Zerlegung

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 $Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und einer oberen Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$

QR Anwendung oder so was

-LGS -Ausgleichsprobleme -QR-Verfahren

3.2 Householder Spiegelung

3.2.1 Householder Vector

3.2.2 Apply vector

$$H = I - \frac{vv'}{\tau} \tag{3.2}$$

$$HA_2 = A_2 - \frac{vv'}{\tau} A_2 \tag{3.3}$$

$$= A_2 - \frac{v}{\tau} * (v' * A_2) \tag{3.4}$$

3.3 LAPACK QR

Der von LAPACK benutzte Algorithmus [2]

$$H = I - \tau\omega\omega^T \tag{3.5}$$

$$\tau = \frac{\alpha - \beta}{\beta} \tag{3.6}$$

$$\alpha = A(i,i) \tag{3.7}$$

$$\beta = \text{sign}(\alpha)\left|\sqrt{\alpha^2 + \|x\|^2}\right| \tag{3.8}$$

$$x = A(i+1:m,i) \tag{3.9}$$

$$\omega = A(i+1:m,i) * \frac{1}{\alpha - \beta} \tag{3.10}$$

Algorithmus

```
householderVektor(Vektor v, alpha, tau)
  beta = sign(sqrt(alpha ^2 + norm(x)^2),alpha)
  tau = (alpha - beta) / beta
  scal(1/(alpha - beta), v)
```

```
tau=zeros(min(m,n))
for i = 0 : min(m,n)
  householderVektor(A(i+1:m,i), A(i,i), tau(i))
  if (i < n && tau != 0)
    AII = A(i,i)
    A(i,i)= 1
    A = A - tau *w(w'*A) // MV und rank1
    A(i,i) = AII
```

3.4 NUM1 Urban QR

Algorithmus aus Numerik 1

Mathe

$$H = I - 2\frac{\omega\omega^T}{\omega^T\omega} \tag{3.11}$$

$$\omega_1 = \frac{x - \alpha e_1}{x_1 - \alpha} \tag{3.12}$$

$$\alpha^2 = \|x\|^2 \tag{3.13}$$

Algorithmus

```
householderVektor(Vektor x, omega, beta)
  n = length(x)
  if n> 1
    sigma = x(2:end)'*x(2:end);
    if sigma==0
      beta = 0;
    else
      mu = sqrt(x(1)^2+sigma);
      if x(1)<=0
        tmp = x(1) - mu;
      else
        tmp = -sigma / (x(1) + mu);
      end
      beta = 2*tmp^2/(sigma + tmp^2);
      x(2:end) = x(2:end)/tmp;
    end
    v = [1;x(2:end)];
  else
    beta = 0;
    v = 1;
  end
```

```
for i = i:n
  housevector(A(i:m, i), w, beta)
  A(i:m,i:n) = (I(m-i+1) - beta * w * w')*A(i m,i:n)
  if i < m
    A(i + 1 : m, i) = w(2:m-i+1)
```

3.5 Unterschiede der Algorithmen

LAPCK hat das Tau
Vor und Nachteile oder so was

3.6 QR Blocked

Geblockte Alorighmus

$$H = I - VTV' \tag{3.14}$$
$$H' = I - VT'V' \tag{3.15}$$
$$H'A_2 = A_2 - VT'V'A_2 \tag{3.16}$$

Betrachte A geblockt

$$A = \left(\begin{array}{c|c} A_{0,0} & A_{0,\text{bs}} \\ \hline A_{\text{bs},0} & A_{\text{bs,bs}} \end{array}\right) \tag{3.17}$$

Berechne QR Zerlegung für Blöcke $A_{0,0}$ und $A_{\text{bs},0}$

$$\left(\frac{A_{0,0}}{A_{\text{bs},0}}\right) \leftarrow \left(\frac{Q_{0,0} \backslash R_{0,0}}{Q_{\text{bs},0}}\right) \tag{3.18}$$

Berechne $H(0)...H(bs)$ aus $Q_{0,0}$ und $Q_{bs,0}$ mit $H = I - V * T * V^T$.
Wende H^T auf $A_{0,\text{bs}}$ und $A_{0,\text{bs}}$ an.

$$\left(\frac{A_{0,\text{bs}}}{A_{0,\text{bs}}}\right) \leftarrow H^T \left(\frac{A_{0,\text{bs}}}{A_{0,\text{bs}}}\right) \tag{3.19}$$

Fahre mit $A_{0,\text{bs}}$ fort.

3.6.1 Calc Factor T larft

[1]

3.6.2 Apply H larfb

3.6.3 Iterativer Algorithmus

```
for i = 0 : n do
    QR = A;
    if i + ib > n then
        Calc T: H=I-VTV'
        Apply H: A=H'A
    end if
end for
```

3.6.4 Rekursiver Algorithmus

4 Implementierung und Benchmarks

Irgend was über die HPC Bibliothek

4.1 MKL Wraper

4.2 Benchmarks

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 }
```

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] 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