Задание

LU-разложение матрицы.

Необходимо вычислить LU-разложение квадратной матрицы: A = LU, где A -- матрица n x n, L -- нижняя треугольная матрица, с единичными элементами на диагонали, U -- верхняя треугольная матрица. Дополнительно нужно получить вектор перестановок строк p, где p[i] содержит номер строки с которой произошла перестановка на i-ой итерации.

Входные данные. На первой строке задано число n -- размер матрицы. В следующих n строках, записано по n вещественных чисел -- элементы матрицы. $n \leq 8 * 10^3$.

Выходные данные. Необходимо вывести на n строках, по n чисел -- элементы матриц L и U объединенные в одну матрицу. Далее записываются n элементов вектора перестановок p.

Пример:

Входной файл	Выходной файл
2 1 2 3 4	3.0000000000e+00 4.0000000000e+00 3.3333333333e-01 6.6666666667e-01 1 1
3 1 2 3 4 5 6 7 8 7	7.0000000000e+00 8.0000000000e+00 7.0000000000e+00 1.4285714286e-01 8.5714285714e-01 2.0000000000e+00 5.7142857143e-01 5.0000000000e-01 1.0000000000e+00 2 2 2

Программное и аппаратное обеспечение

Device: GeForce GT 545
Размер глобальной памяти: 3150381056
Размер константной памяти : 65536
Размер разделяемой памяти: 49152
Регистров на блок: 32768
Максимум потоков на блок: 1024
Количество мультипроцессоров : 3
OS: Linux Mint 20 Cinnamon
Редактор: VSCode

Метод решения

Поскольку в задании требуется получить объединенную матрицу C = L + U - E, то будем иттеративно от 0 до n делать шаг, состоящий из 4 частей:

1. Нахождение максимального по модулю элемента в i-ом столбце ниже главной диагонали, а также номер строки j в котором находиться этот элемент.
2. Замена i-ой и j-ой строки местами в матрице.
3. Деление всех элементов i-ого столбца на найденный максимальный элемент.
4. Применение ко всем оставшимся элементам матрицы ниже главной диагонали формулы: $u_{k,m} -= u_{k,i} * u_{i,m}$

Результат описанных действий — искомая матрица C.

Описание программы

Я написал 3 различных реализаций, позволяющих решить эту задачу. Рассмотрим самую простую из них:

На CPU мы выделяем память, считываем данные в **транспонированном виде** для упрощенного поиска минимума по столбцу с помощью иттераторов thrust после чего запускаем цикл от 0 до n-1, в котором последовательно выполняем выполняем описанные выше действия:

```
double* h_C = (double*) malloc(n * n * sizeof(double));
unsigned* h_p = (unsigned*) malloc(n * sizeof(unsigned));
double* d_C;
throw_on_cuda_error(cudaMalloc((void**) &d_C, sizeof(double) * n * n));

for(unsigned i = 0; i < n; ++i){
h_p[i] = i; // init of permutation vector
for(unsigned j = 0; j < n; ++j){
cin >> h_C[j*n + i];
}
}
throw_on_cuda_error(cudaMemcpy(d_C, h_C, sizeof(double) * n * n, cudaMemcpyHostToDevice));

for(unsigned i = 0; i < n - 1; ++i){

auto it_beg = thrust::device_pointer_cast(d_C + i*n);

auto max_elem = thrust::max_element(it_beg + i, it_beg + n, abs_comparator());

unsigned max_idx = max_elem - it_beg;
double max_val = *max_elem;
if(i != max_idx){
swap_lines<<<BLOCKS, THREADS>>>(d_C, n, i, max_idx);
h_p[i] = max_idx;
```

```
cudaThreadSynchronize();
}

gauss_step_L<<<BLOCKS, THREADS>>>(d_C, n, i, max_val);

cudaThreadSynchronize();

gauss_step_U<<<BLOCKS, THREADS>>>(d_C, n, i);
throw_on_cuda_error(cudaGetLastError());
}
```

Функция cudaThreadSynchronize нужна для синхронизации потоков, во избежание гонки потоков из разных функций. Код самих kernel не имеет никаких особенных деталей, кроме того, что для оптимизированного доступа к памяти соседние потоки обращаются к соседним элементам массива.

Однако при размере массива не кратном 256 данная реализация не раскрывает в полной мере преимущество объединения потоков, поэтому напишем другую реализацию, в которой дополним каждую строку до размера, кратного 256:

```
unsigned size = get_allign_size(n);
host_vector<double> h_C(size * n);
device_vector<double> d_C;
host_vector<unsigned> h_p(n);
```

Заметим, что для удобства можно использовать предоставляемые thrust контейнеры host_vector и device_vector, упрощающие работу с памятью в cuda.

Тогда в kernel потоки будут обращаться к таким участкам памяти, чтобы работало объединение запросов:

```
__global__ void gauss_step_U(double* C, unsigned n, unsigned size, unsigned col){
unsigned i_idx = threadIdx.x;
unsigned j_idx = blockIdx.x;

unsigned i_step = blockDim.x;
unsigned j_step = gridDim.x;
for(unsigned jndex = j_idx + col + 1; jndex < n; jndex += j_step){
unsigned idx0 = jndex*size;
double C_jc = C[idx0 + col];
unsigned index = i_idx + col + 1 - ((col + 1) & 255);
if(index > col && index < n){
//printf("[%d, %d] = %f\n", index, jndex, C[idx0 + index]);
C[idx0 + index] -= C[size*col + index] * C_jc;
//printf("[%d, %d] = %f\n", index, jndex, C[idx0 + index]);
}
for(index += i_step; index < n; index += i_step){
C[idx0 + index] -= C[size*col + index] * C_jc;
}
}
```

```
}
```

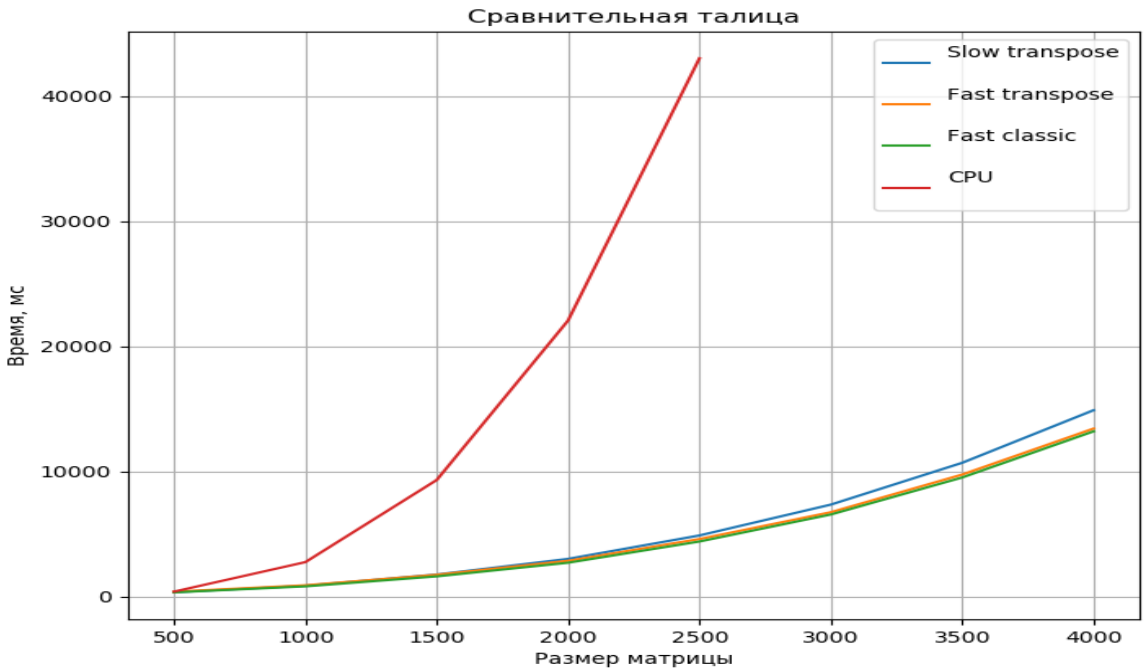
Также можно использовать держать матрицу не в транспонированном виде, что ускорит swap двух линий, однако усложнит поиск максимального элемента столбца с помощью средств cuda. Для решения этой задачи я использовал класс из официального github nvidia: straded_range и использовал следующий итератор:

```
strided_range<thrust::device_vector<double>::iterator> range(
d_C.begin() + i,
d_C.end(),
align
);
```

Такое размещение в памяти не только ускоряет перестановку на GPU, но и более кэш-дружелюбно на CPU.

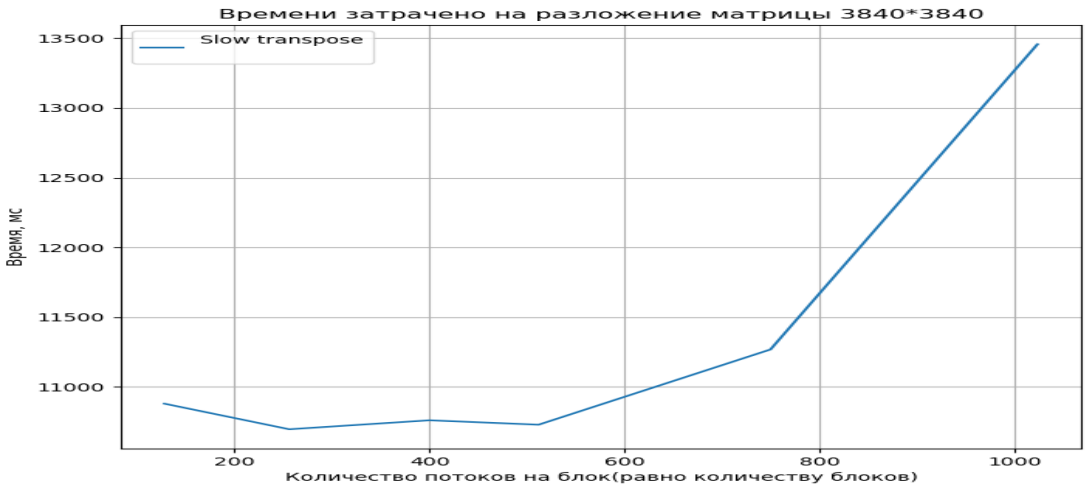
Результаты

Рассмотрим как зависит время выполнения от порядка матрицы в 3 разных реализациях:



Лучшей реализацией оказалась ускоренная реализация с транспонированной схемой хранения матрицы в памяти с небольшим отрывом от третей реализации. При этом аналогичная реализация на CPU быстро расходиться на графике с реализациями на GPU, поскольку имеет другой порядок сложности алгоритма.

Покажем как размерность сетки потоков влияет на производительность. В силу специфики алгоритма количество блоков равно количеству потоков в блоке:



На графике заметны небольшие падения производительности при количестве потоков, не кратном 256, поскольку в таком случае объединение запросов перестает работать, что увеличивает общее время выполнения.

Однако самое странное, это резкий рост времени выполнения программы при количестве потоков, больше 512, поскольку в таком случае размер массивва перестает делиться нацело на количество потоков, что заставляет простаивать часть потоков. В тоже время уходит больше времени на инициализацию потоков.