

# 计算wave矩阵部分上从核

罗海文

12.13

# 之前的bug

- dist\_tab等数组参数传递问题——i\_point多加了1导致读到了dist\_tab等数组用不到的部分
- xmath和m\_slave同时链接的问题——不链接xmath

# 不链接xmath之后-h2o

luohaiwen_r_current: 5.9970428644637872	3144 luohaiwen_r_current:5.997043^M
luohaiwen_r_grid_min: 1.2499999684223440E-005^M	3145 luohaiwen_r_grid_min:0.000012
luohaiwen_r_current_chu_r_grid_min: 479763.44127694692 ^M	3146 luohaiwen_r_current_chu_r_grid_min:479763.441277^M
luohaiwen_log_r_current_chu_r_grid_min: 13.081048430730096	3147 luohaiwen_log_r_current_chu_r_grid_min:12.476649

从核

主核

计算 $\log(r\_current/r\_grid\_min)$ 。  
 $r\_current$ 、 $r\_grid\_min$ 、 $r\_current/r\_grid\_min$ 的结果一样  
但是计算完log后结果差的比较多

# 不链接xmath之后-RBD

程序在sum\_up部分退出,只报了exit\_code=14错误。

链接xmath, 把 $\log(r_{\text{current}}/r_{\text{grid\_min}})$ 改成 $(r_{\text{current}}/r_{\text{grid\_min}})$ 结果

	主核版本	从核版本
RBD 512	12.88	2.43

# 正在写-n\_compute\_atoms循环合并

```
for(int i_my_batch=0;i_my_batch<n_batches_work;i_my_batch++)
{
    for(i_point=0;i_point<n_points;i_point++)
    {
        prune_radial_basis();
        tab_local_geometry();
        tab_trigonom();
        tab_wave_ylm();
        evaluate_radial_functions();
        evaluate_waves();
    }
}
```

除了prune\_radial\_basis部分代码，其他函数都是n\_compute\_atoms的循环，可以将这些函数都合并，减少访存量（对于每一个point）：

dist\_tab:2xn\_compute\_atoms

dir\_tab:3xn\_compute\_atoms

atom\_index:3xn\_compute\_atoms

.  
. .  
.