

11.29-12.06一周工作总结

罗海文

2021.12.06

H部分prune_sparse_from_density上从核并 dma优化并测试各种数据

512进程RBD	bwu	IPC	flops(Gflops)	浮点部件利用率
小kernel tab_atom	65%	0.36	4.6	0.19%
小kernel collect_batch	34%	0.57	0.004	
小kernel prune_density_from_sparse	17%	0.25	0.001	
小kernel prune_sparse_from_density	64%	0.45		
大kernel rho	28%	0.13	4	0.16%
大kernel H	26%	0.11	4.3	0.17%
64进程RBD	bwu	IPC	flops	
小kernel tab_atom	65%	0.38	4.6	0.19%
小kernel collect_batch	9%	0.64	0.0008	
小kernel prune_density_from_sparse	19%	0.23	0.004	
小kernel prune_sparse_from_density	65%	0.43		
大kernel rho	31%	0.14	4	0.16%
大kernel H	27%	0.12	4.3	0.17%

计算wave矩阵的循环上从核遇到的bug

- 1.xmath和从核数学库同时链接会导致计算log时出问题
- 2.dist_tab、dist_tab_sq、dir_tab参数传递有问题，未解决

计算wave矩阵的循环打表

```
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++)
    {
        .
        .
        .
        evaluate_waves();
    }
}
```

```
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++)
    {
        .
        .
        .
    }
}
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++)
    {
        evaluate_waves();
    }
}
```

```
integer,dimension(:),allocatable :: n_points
integer,dimension(:,:),allocatable :: n_compute_fns
integer,dimension(:,:),allocatable :: n_compute_atoms
integer,dimension(:,:,:),allocatable :: rad_index
integer,dimension(:,:,:),allocatable :: wave_index
integer,dimension(:,:,:),allocatable :: l_index
integer,dimension(:,:,:),allocatable :: l_count
integer,dimension(:,:,:),allocatable :: fn_atom
integer,dimension(:,:),allocatable :: n_zero_compute
integer,dimension(:,:,:),allocatable :: zero_index_point
real*8, dimension(:,:,:,:), allocatable :: ylm_tab!
real*8, dimension(:,:,:,:), allocatable :: one_over_dist_tab
real*8,dimension(:,:,:,:) ,allocatable:: radial_wave!
```

这些数组的空间扩大
 $n_my_batches_work * n_points$ 倍

(512进程)

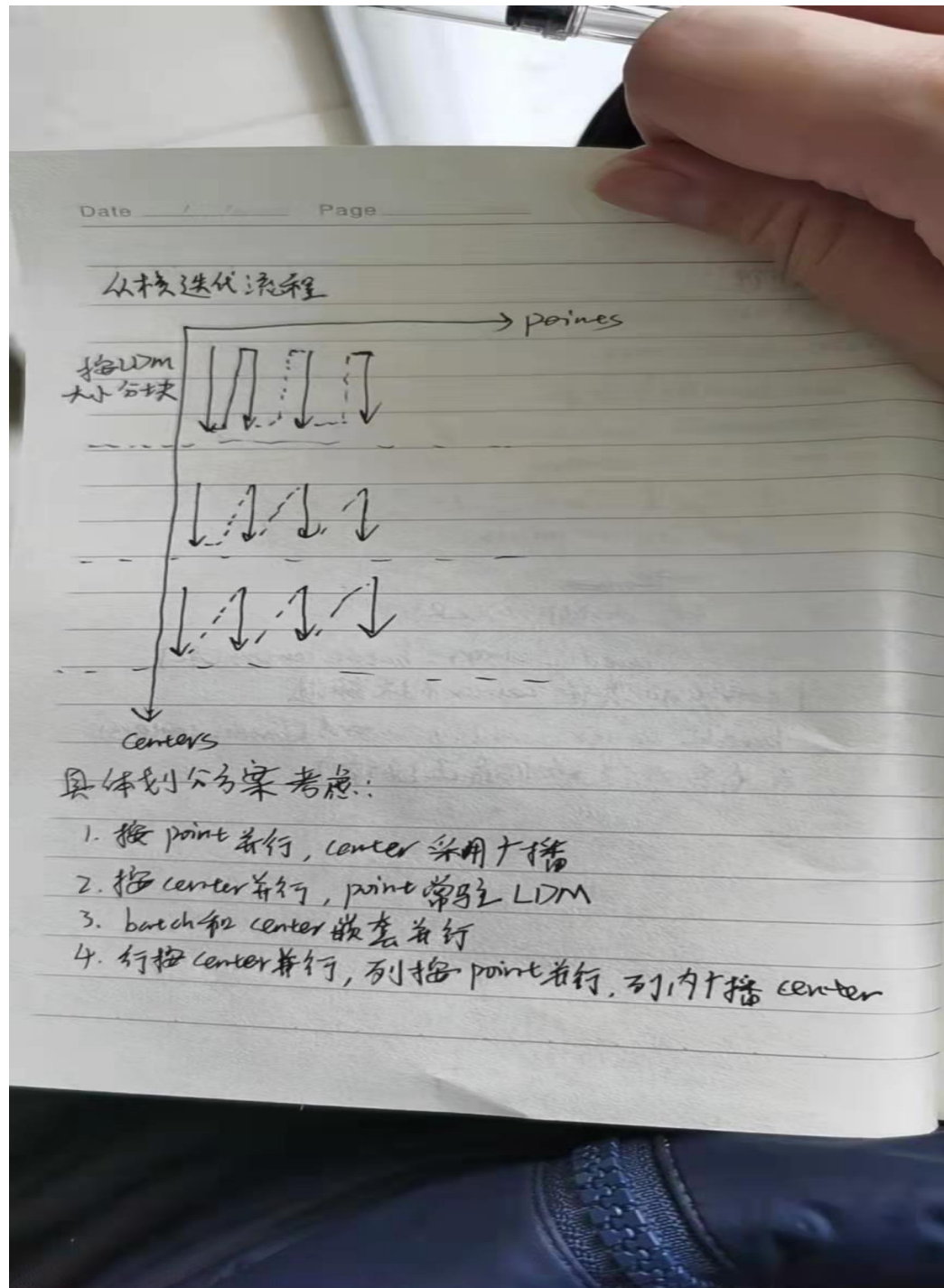
n_compute_atom: 20-40
n_max_compute_atoms:60
n_compute_atom_fns:170

访存优化-依赖数据先收集然后复用

- 1.每个batch对atom_radius_sq、species_center的访存都是一样的且不规则，先收集起来然后复用，并且保证了连续的访存
- 2.每次访问atom_index的访存模式都是atom_index(species_center(i_atom)), atom_index可以只保存这个值，使每次访问atom_index的时候不再访问species_center
- 3.减少i_basis_fns_inv(n_basis_fns,n_center)的空间为(n_basis_fns,n_compute_atoms)

划分方案

```
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++)
    {
        for(i_compute_atom=0; i_compute_atom<n_compute_atom; ++i_compute_atom)
        {
            .
            .
            .
        }
    }
}
```



CPSCf 预处理:

prune-basis-one.

prune-batch-lists:

box = batch 的包围盒

~~for each~~ batch-centers = \emptyset

for $c \in$ all centers:

if $\text{disc}(c, \text{box}) < R$:

for $p \in$ all points:

~~if~~

if $\text{disc}(p, c) < R$:

batch-centers = batch-centers $\cup \{c\}$

对 coord 和其他 center 相关数组:

batch-center-coord(:) = coord(batch-centers)

* (务必使数据真正连续)