TP n°1: Installation et premiers exercices

```
1) Installation
Connexion sur plafrim
ssh plafrim
Il faut créer un répertoire pour accueillir les sources d'ExaStamp et les Tps :
mkdir TPs_In_Situ
cd TPs_In_Situ
Il faut récupérer les sources ExaStamp avec la commande :
git clone /home/tcarrard/exaStamp.git
Puis, il faut lancer le script afin de configurer l'environnent (modules, path, ...) :
$HOME/TPs_In_Situ/exaStamp/scripts/configure-plafrim.sh
Taper Return pour accepter les défauts (chemins vers les répertoires de build et d'install), ensuite
source $HOME/build/setup-env.sh
salloc -proutage -n1 -c12 make -j24
A partir de ce moment, vous devez avoir un binaire du code ExaStamp appelé : xstampv2
Le binaire xstampv2 se trouve dans $HOME/build
1,5) Vérifier que vous avez l'outil vite sur votre station ou portable
Pour initialiser l'environement necessaire à l'execution de vite :
source ~mfaverge/cisd/env_vite.sh
2) Premiers tests sur plafrim (Exercice N°1)
Créer un répertoire Exercice1 dans Tps_In_Situ et copier le fichier tutorial_insitu_histo_par.msp
cd $HOME/Tps_In_Situ && mkdir Exercice1
cp exaStamp/data/samples/tutorial_insitu_histo_par.msp Exercice1/
Ce jeu de données va faire un calcul de DM avec un potentiel peu coûteux (Lennard-Jones) et une
analyse simple de type histogramme sur la valeur de l'énergie des atomes, parallélisée en OpenMP.
Première exécution en séquentiel:
cd $HOME/Tps_In_Situ/Exercice1
salloc -proutage -n1 -c1 /bin/env OMP_NUM_THREADS=1 \
$HOME/build/xstampv2 tutorial_insitu_histo_par.msp
Maintenant, on active la génération de trace vite en ajoutant --profiling-vite trace.vite
salloc -proutage -n1 -c1 /bin/env OMP_NUM_THREADS=1 $HOME/build/xstampv2 \
tutorial_insitu_histo_par.msp --profiling-vite trace.vite
```

Pour exécuter la simulation en parallèle sur 4 threads :

salloc -proutage -n1 -c4 /bin/env OMP_NUM_THREADS=4 \$HOME/build/xstampv2 \
tutorial_insitu_histo_par.msp --profiling-vite trace.vite

Exercices:

- 1 Modifier le « sample » de l'analyse histogram_energy dans le jeu de données tutorial_insitu_histo_par.msp
- 2 En observant les résultats obtenus dans les traces vite, que pouvez-vous dire sur l'utilisation de l'analyse histogram_energy ?
- 3 copier le fichier ../exaStamp/data/samples/tutorial_insitu_histo_seq.msp dans votre répertoire Exercice1 (il utilise une autre version de l'histogram histoseq_energy). Après une première exécution du jeu de données sans le modifier, regarder les sorties vite pour des exécutions séquentielles et parallèles. Augmenter le nombre de cœurs utilisés dans la commande salloc. Que Remarquez-vous ?

Vous pouvez vous aider avec l'option --profiling-summary true du code :

salloc -proutage -n1 -c4 /bin/env OMP_NUM_THREADS=4 \$HOME/build/xstampv2 \
tutorial_insitu_histo_seq.msp --profiling-vite trace.vite --profiling-summary

Si vous utilisez le jeu de données précédent qui utilise l'analyse **tutorial_insitu_histo_par.msp** est-ce le même comportement ?

2,5) Avant de modifier les sources

à partir de maintenant, vous allez modifier les sources. Il est donc nécessaire que chacun créée une branche nouvelle dans le dépôt GIT.

```
cd $HOME/Tps_In_Situ/exaStamp
git checkout -b enseirb-$USER # $USER sera remplacé par votre login
après chaque changement fructueux (qui compile et fonctionne)
git commit -am « ce que j'ai changé »
```

3) Regardons un jeu de données et parallélisation d'une analyse (Execice n°2)

Exercice: Parallélisons l'analyse histoseq_energy utilisée par le ficher de données **tutorial_insitu_histo_seq.msp**

Le fichier à modifier se trouve dans \$HOME/TPs_In_Situ/exaStamp/src/tutorial/histogram_seq.cpp

- 1 Première version parallèle de *histoseq_energy* pour cela ajouter les directives OpenMP adéquates et si nécessaire modifier le code source.
- 2 Compiler et exécuter le nouveau code sur 1 à 8 threads et vérifier que l'analyse s'exécute bien en parallèle.

4) Étude avec plusieurs analyses de type histogramme (Exercice N°3)

On utilise un nouveau fichier de données :

~/TPs_In_Situ/exaStamp/data/samples/tutorial_insitu_histo2_par_freq.msp

Maintenant copier ce fichier dans le répertoire Exercice1

Exercices:

- 1 Étudier le jeu de données. Combien d'analyses vont être exécutées et à quelles fréquences ? Vérifier votre hypothèse avec des traces vites.
- 2 Faites varier le nombre de threads. Que constatez-vous ?
- 3 Modifier la fréquence d'appel des analyses et éventuellement le nombre de *samples* et vérifier que les traces vite valident bien votre hypothèse.
- 4 Qu'est-ce qui peut perturber les mesures ?