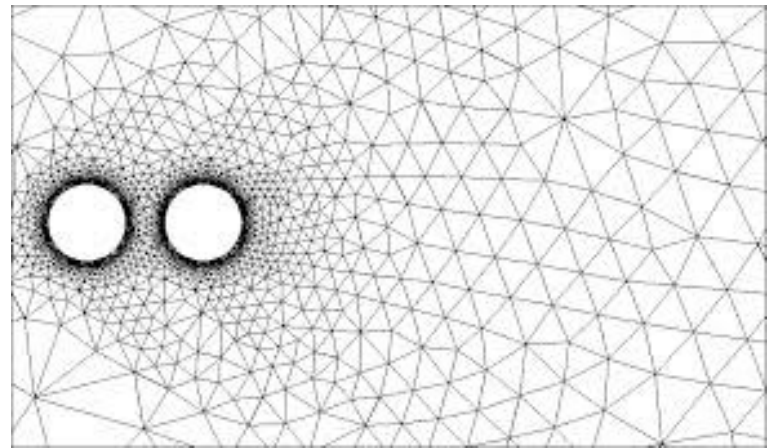
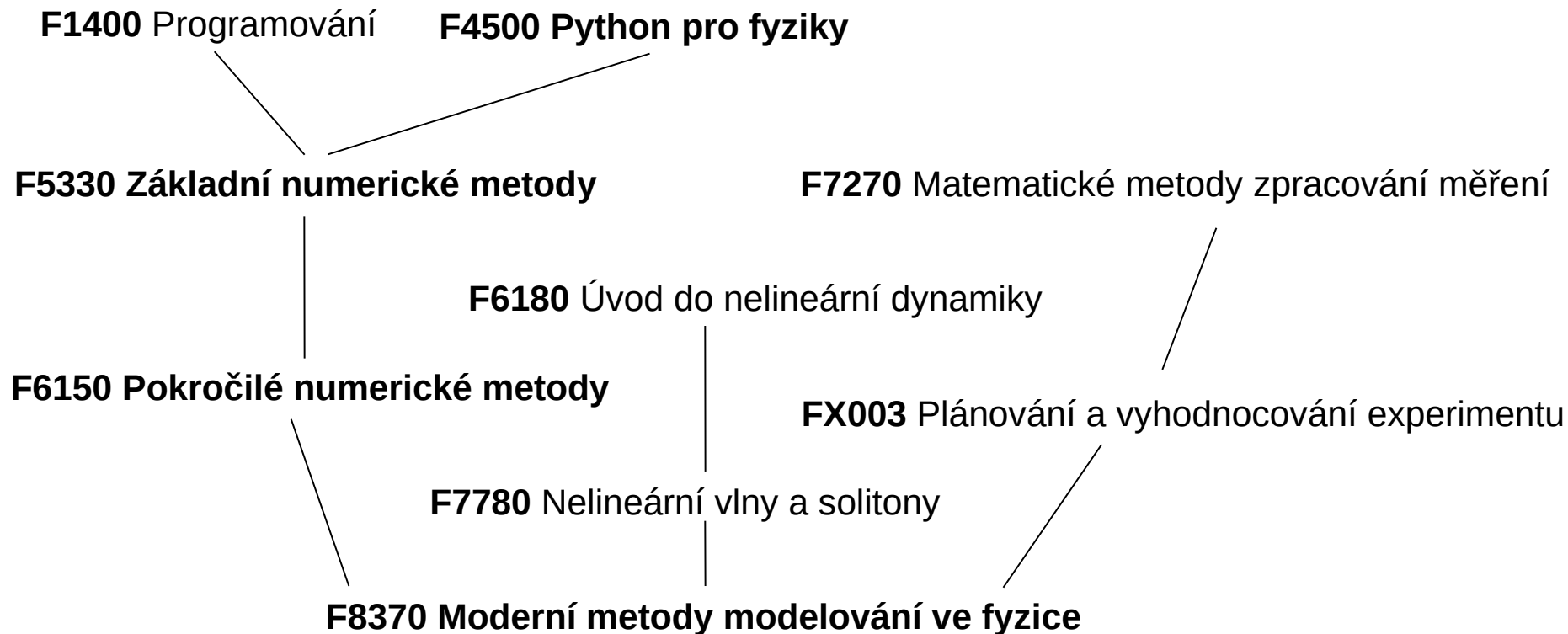


F8370 Moderní metody modelování ve fyzice
jaro 2023

D. Hemzal



cf-online.com



F8380 Základy molekulového modelování a bioinformatiky
F1170, C9926,... **R. Vácha**

obsah – fixní část

metoda konečných diferencí (FD), 3 týdny
diskretizace derivace, okrajové podmínky (**Laplaceova rovnice**)
techniky ověřování řešení (r. *vedení tepla*)

metoda konečných prvků (FEM), 6 týdnů
problémy s vlastními hodnotami (*Schrödingerova r.*)
1D-3D formulace MKP: slabá formulace ODE, tvarové funkce, momentové integrály,
okrajové podmínky (*částice v potenciálové jámě*)
vyšší dívčí, FEM bricks
inverzní úloha (*Poissonova r.*)

přednáška: výklad jednotlivých metod s aplikací na typické úlohy, techniky kontroly výpočtu
cvičení: používání (volně šiřitelných) programových balíčků
(gmsht, superLU, petsc, slepc, redsvd, xsvit/gsvit...)

obsah – volitelná část

neuronové sítě, 2 týdny
perceptron, učení zpětným šířením chyby (*fitování spektrálních profilů*)
Hopfieldova síť, samoorganizující se mapy (Kohonen)

genetické algoritmy, 2 týdny
genotyp, selekce, křížení mutace, hvězdičková schemata

konečné diference v časové oblasti (FDTD), 2 týdny
difuze, Maxwellovy rovnice

diskrétní transformace, 2 týdny
DFT, vlnková transformace (vlnová rovnice)
harmonická syntéza v časové oblasti (*Helmholtzova rovnice*)

výpočetní architektura CUDA, 2 týdny
RCWA pro výpočet Maxwellových rovnic

soft algorithms

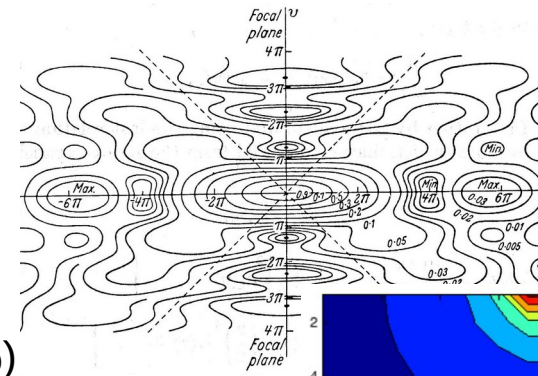
hands-on tutorials

podmínky k uzavření předmětu:

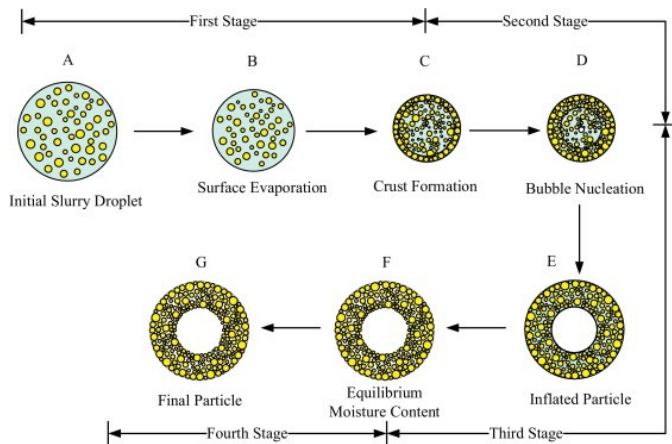
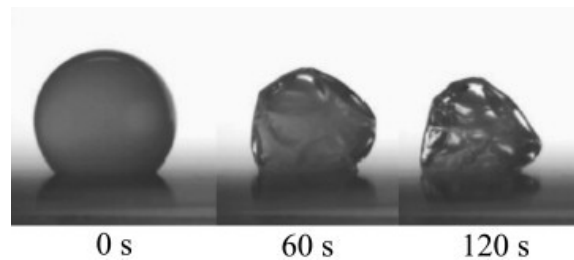
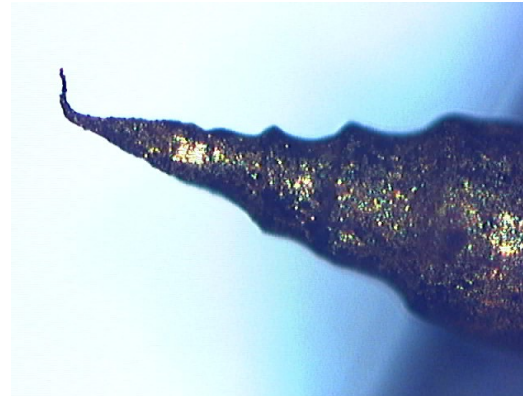
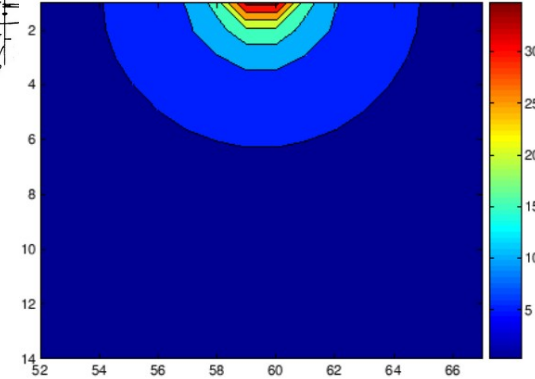
příprava simulačních dat pro publikaci

dostupná témata:

- ohřev vzorku při laserové excitaci
- FDTD simulace STM hrotu
- vysychání kapky
- ?



(60%)
(50%)
(30%)



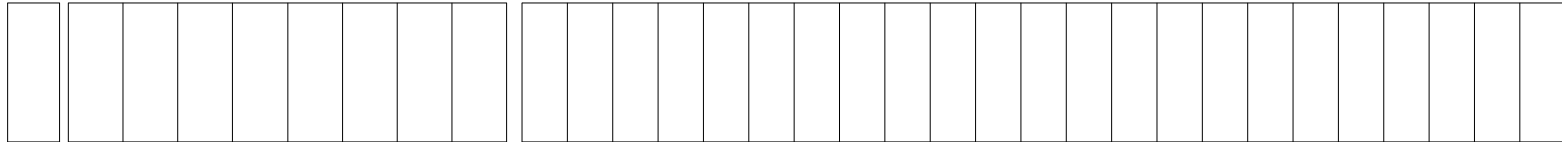
reprezentace reálného čísla v počítači

IEEE 754**single precision** - 4 bajty

bity: 31 30

23 22

0



znaménko

exponent

mantisa

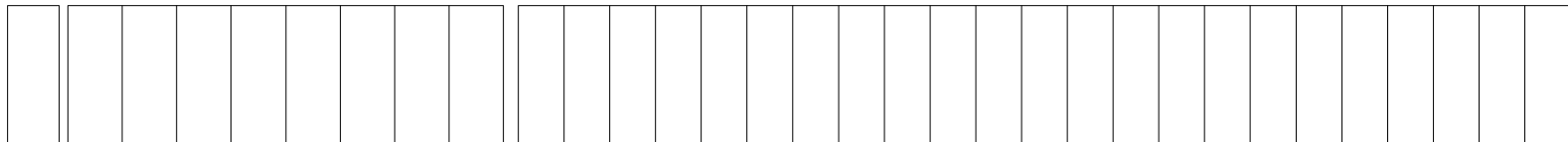
přesnost zápisu: lepší než 7 decimálních cifer
 přesnost výpočtu: cca **3 cifry**

double precision - 8 bajtů

bity: 63 62

52 51

0



znaménko

exponent

mantisa

přesnost zápisu: téměř 16 decimálních cifer
 přesnost výpočtu: cca **7 cifer**

quadruple precision...

spolehlivé řešení: **multiple precision arithmetic**

rozdělit čísla na menší části (zapsané v bázi q) a násobit odděleně
 – obětuje se počet součinů za získání libovolné přesnosti

(exponenty nehrají roli, mantisy lze vyjádřit jako celá čísla se zvoleným počtem míst)
 myšlenka **Karatsubova** postupu

$$x = x_k q^k + x_{k-1} q^{k-1} + \dots + x_2 q^2 + x_1 q + x_0$$

$$y = y_k q^k + y_{k-1} q^{k-1} + \dots + y_2 q^2 + y_1 q + y_0$$

$$xy = x_k y_k q^{2k} + (x_{k-1} y_k + x_k y_{k-1}) q^{2k-1} + \dots + (x_2 y_0 + x_1 y_1 + x_0 y_2) q^2 + (x_1 y_0 + x_0 y_1) q + x_0 y_0$$

příklad:

$$\begin{aligned} 1234 * 5678 &= (\mathbf{0*10000+12*100+34})(\mathbf{0*10000+56*100+78}) \\ &= (\mathbf{12*56})10000+(\mathbf{78*12+34*56})100+\mathbf{34*78} \end{aligned}$$

čísla jsou v tomto typu aritmetiky (**multiple precision**) celou dobu uloženy ve formě rozkladů a jsou definována pravidla pro operaci s těmito rozklady

výhodou je možnost rekurze

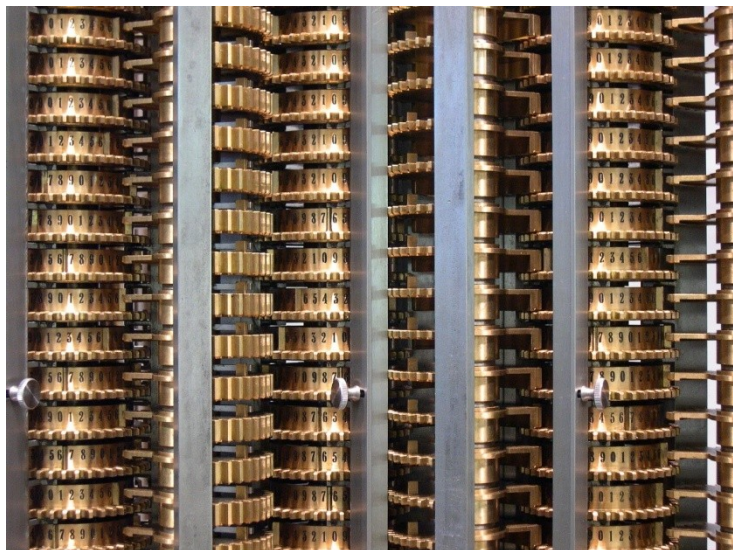
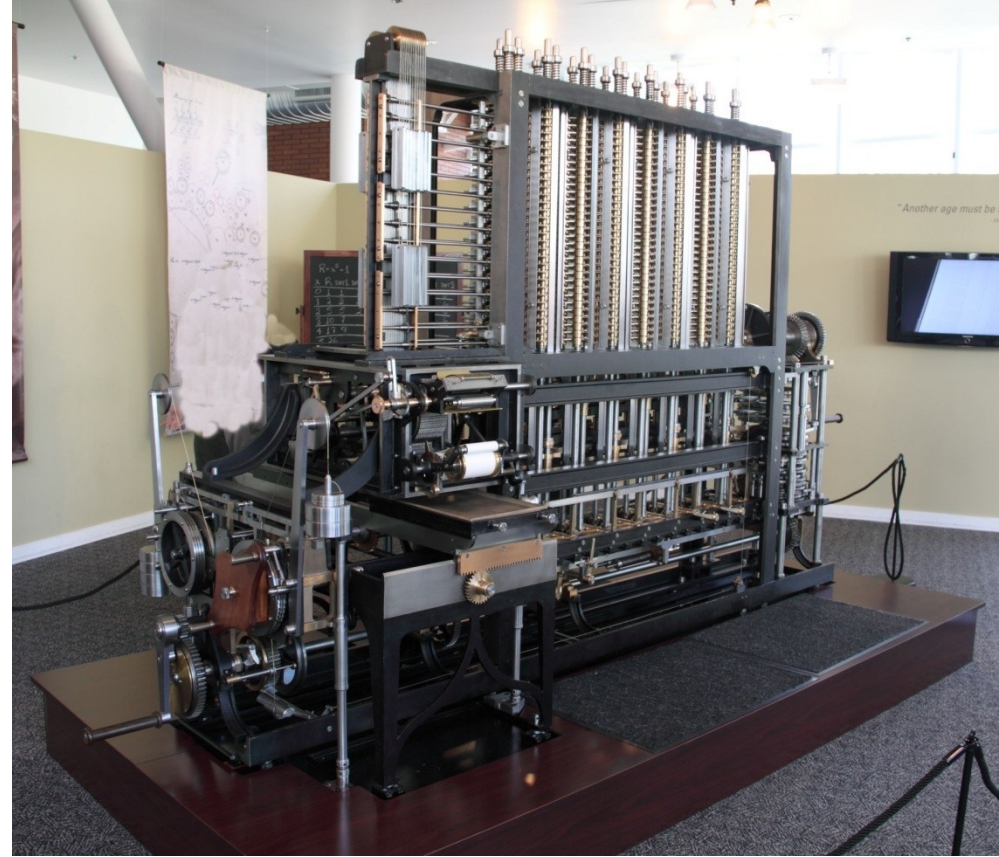
Karatsuba přidal ještě optimalizaci počtu součinů

konečná optimalizace: algoritmus **Tooma-Cooka** (řádu m, n)

nic nového pod Sluncem:

'Differential engine' Charlese Babbage, cca 1820

x	$p[n]$	$p_1=p[n+1]-p[n]$	$p_1[n+1]-p_1[n]$
0	2	-1	4
1	1	3	4
2	4	7	4
3	11		4



původní stroj:

osm sloupců po jedenatřiceti cifrách
složitý systém přenášení informací z nejvyšších bitů
odečítání realizováno jako přičítání záporného čísla

po konstrukci v 1991 podle původních plánů plně funkční

náročnost výpočtu – pro jednoduchost bereme součin a součet jako jednotku trvání : **1 FLOP**

přesnost výpočtu: **ULP** – unit in a last place

příklad: rozhraní CUDA pro výpočetní grafické karty NVIDIA

nVidia Common Runtime Component

operace	chyba [ULP]	rozsah	trvání	FLOP
$x+y, x*y$	0.5	celý	4	1
$1/x$	1	celý	36	9
$\text{sqrtf}(x)$	3	celý	32	8
$\text{errff}(x)$	4	celý	?	?
$\text{sinf}(x)$	2	-48039 .. 48039	32	8
	∞	$ x >10^7$		

single/double precision!

signálové procesory