Revize 1

C2115
Praktický úvod do superpočítání

XII. lekce / Modul 2

Petr Kulhánek

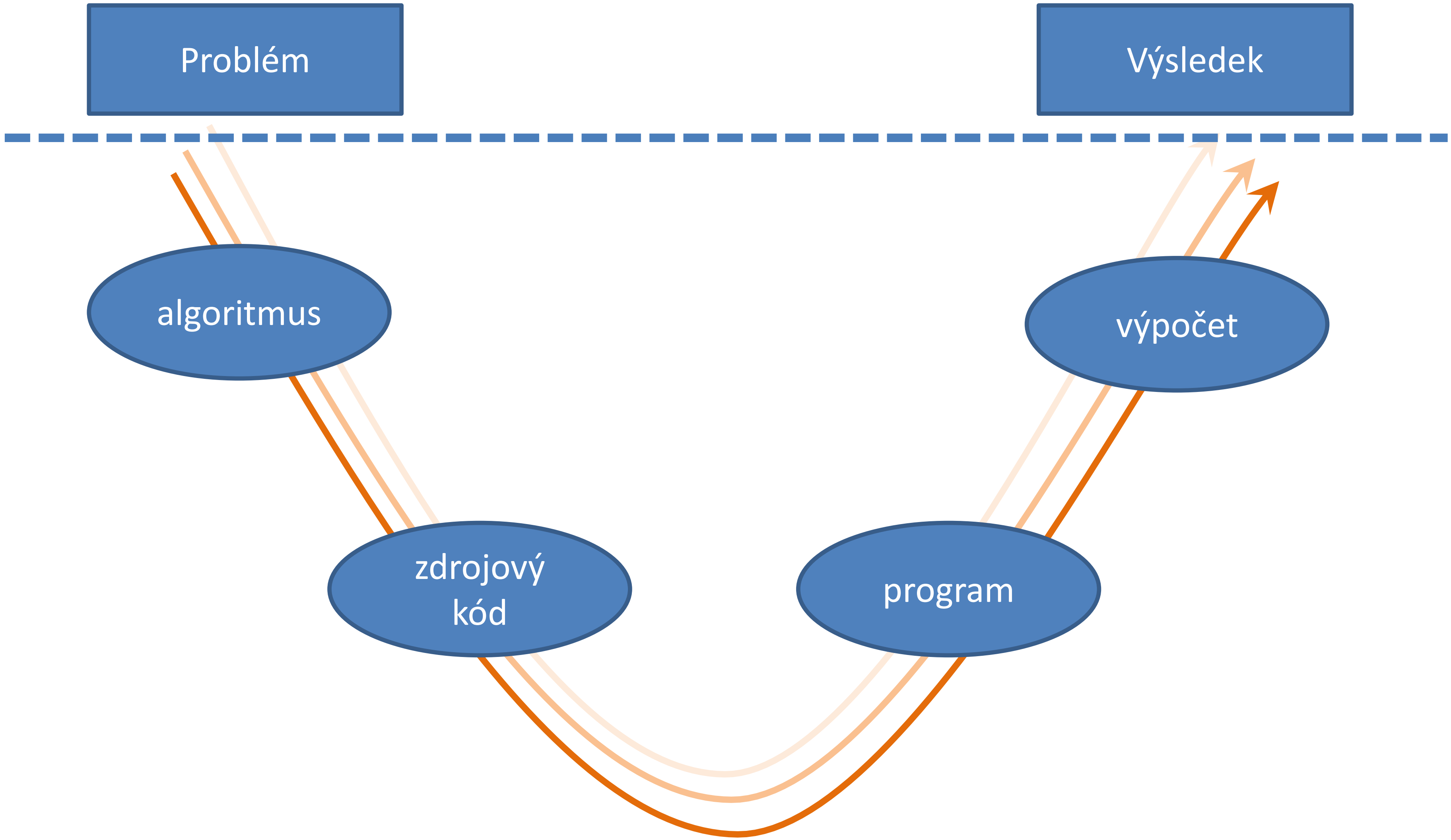
kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta,
Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-61137 Brno

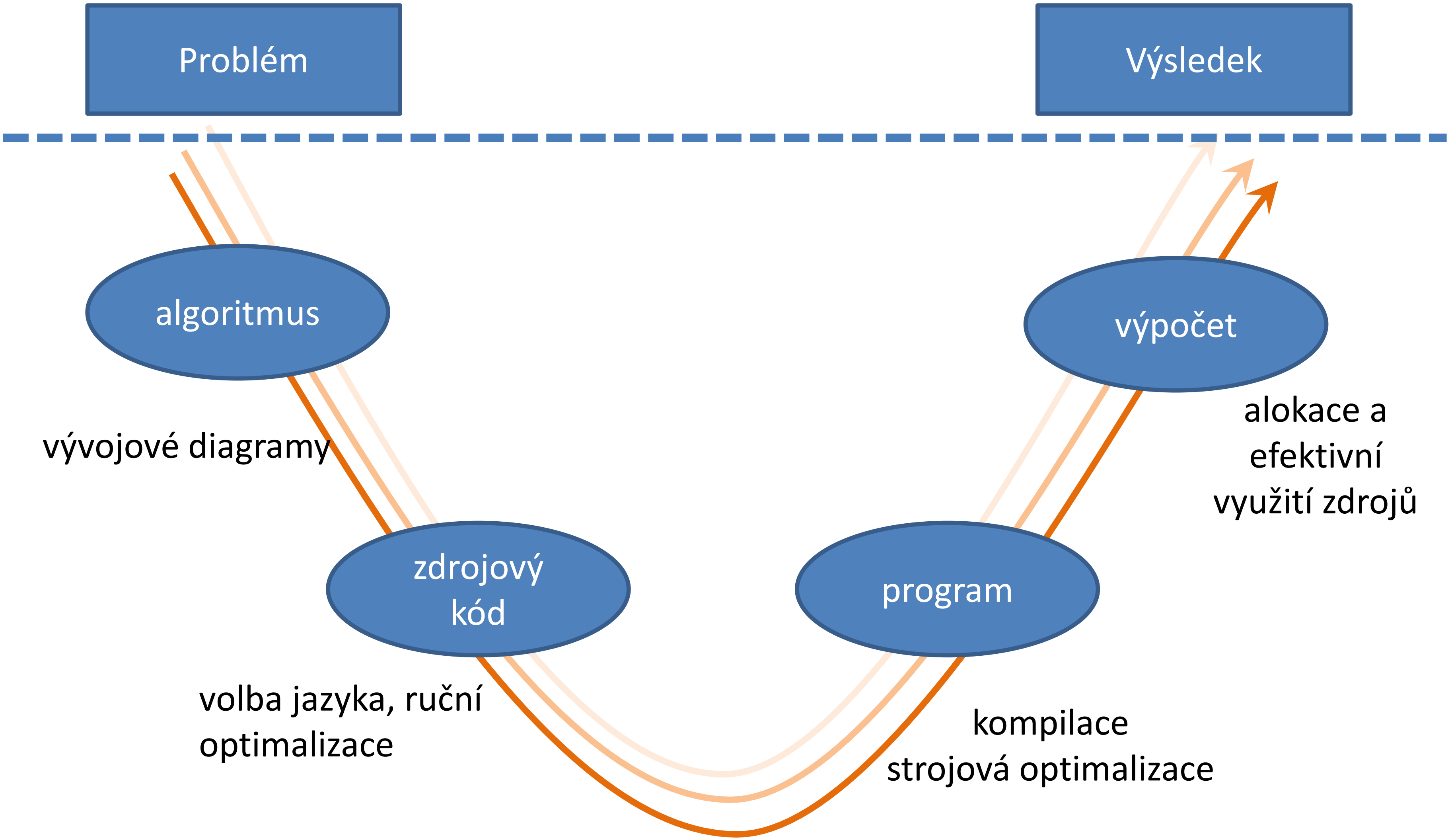
Od problému k výsledku

Od problému k výsledku ...

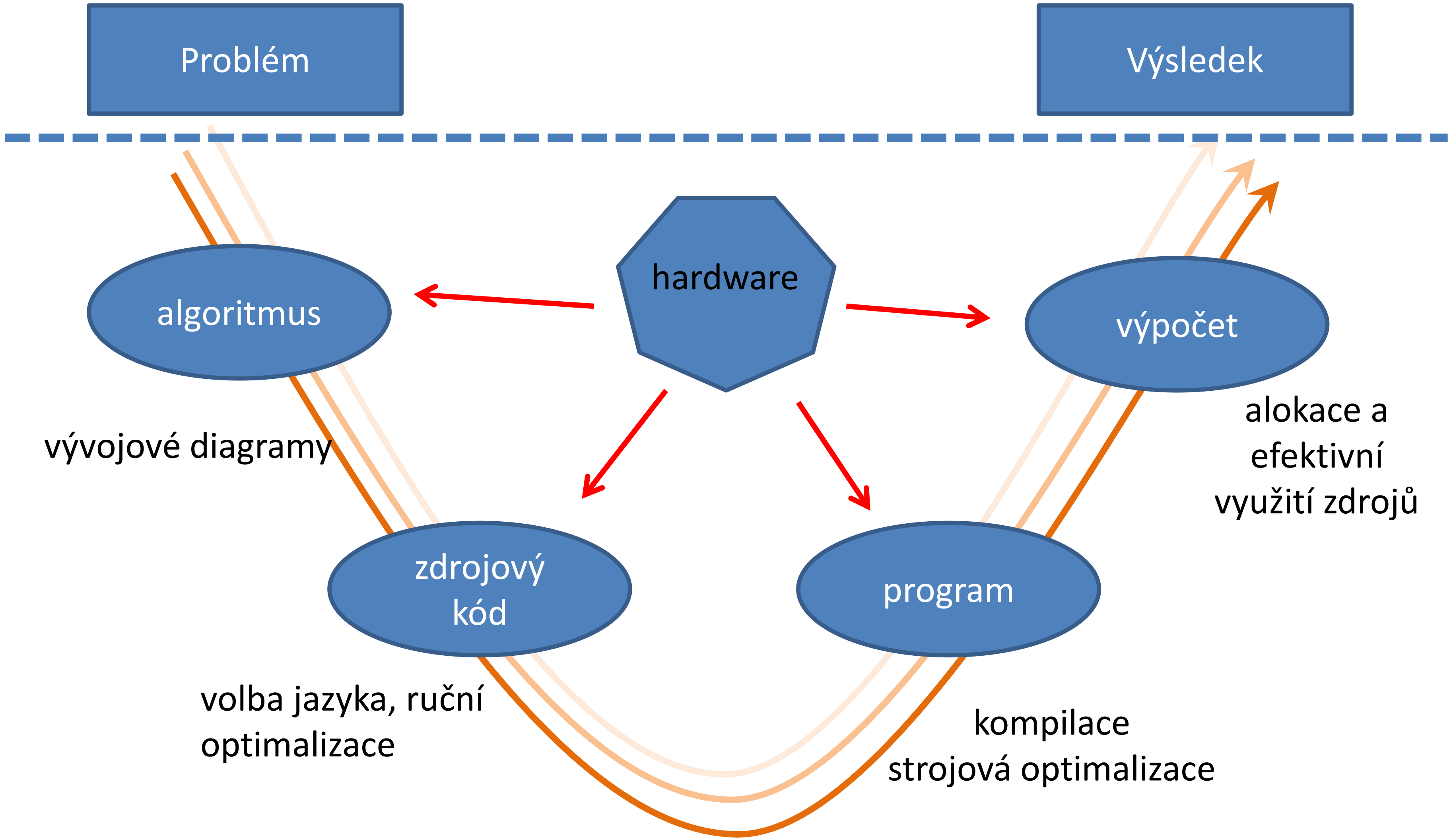
Od problému k výsledku ...



Od problému k výsledku ...

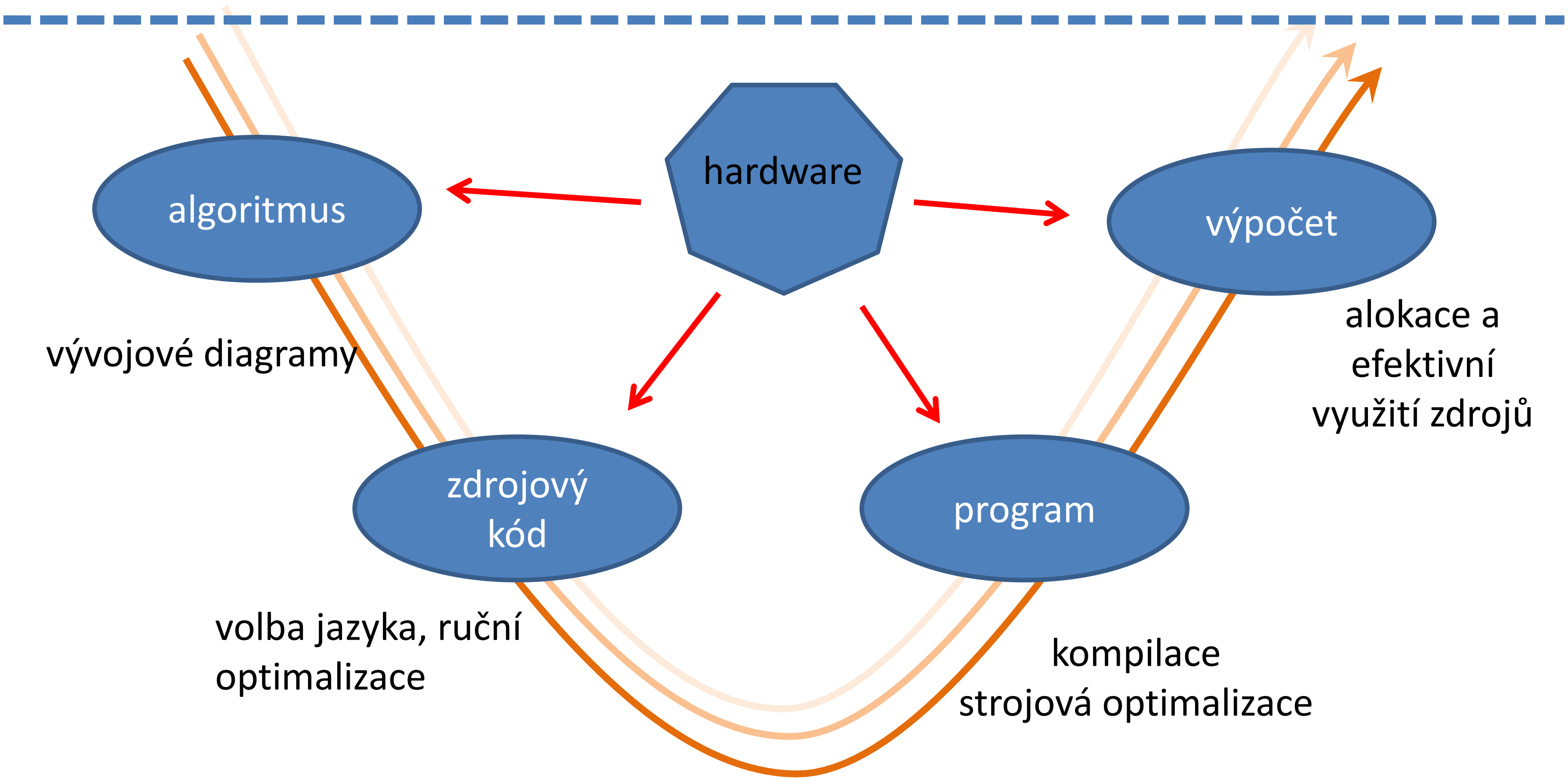


Od problému k výsledku ...



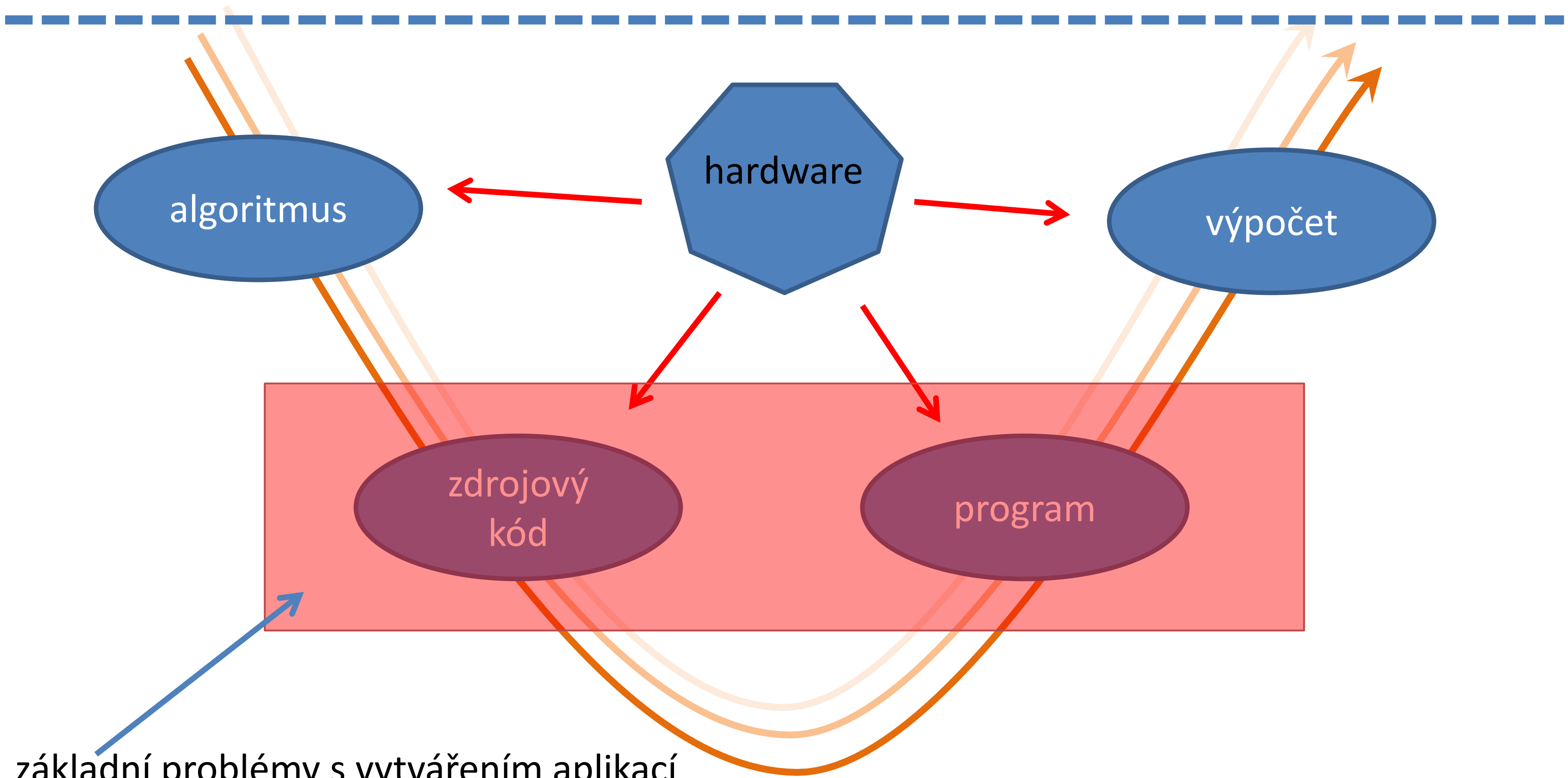
Od problému k výsledku ...

Při řešení problémů za použití výpočetní techniky (superpočítačů) je nutné **komplexně zhodnotit** celou řadu aspektů, které zahrnují i použitý hardware a jeho architekturu.



Probírané okruhy ...

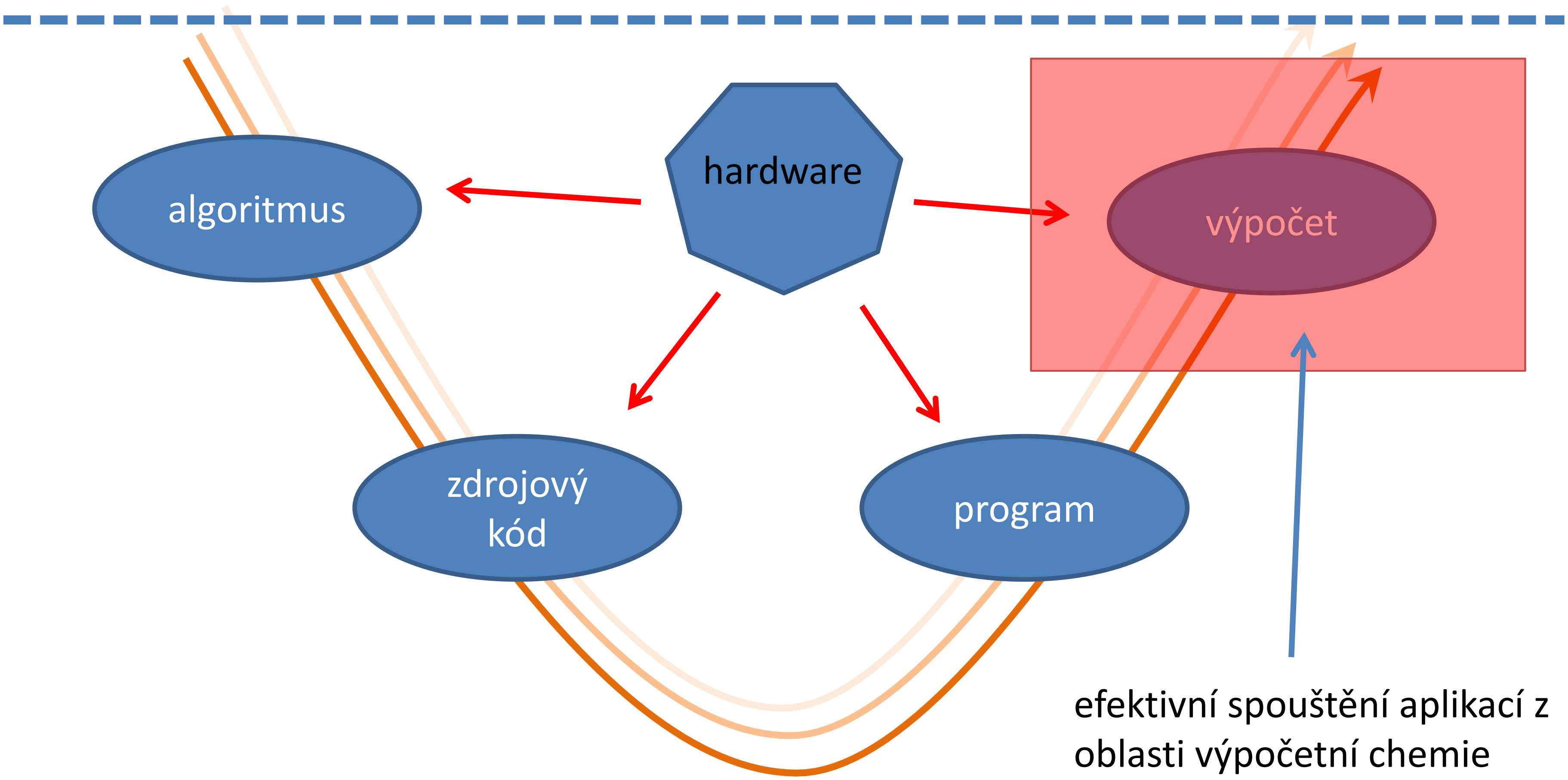
Při řešení problémů za použití výpočetní techniky (superpočítačů) je nutné **komplexně zhodnotit** celou řadu aspektů, které zahrnují i použitý hardware a jeho architekturu.



základní problémy s vytvářením aplikací pro náročné výpočty, paralelizace

Probírané okruhy ...

Při řešení problémů za použití výpočetní techniky (superpočítačů) je nutné **komplexně zhodnotit** celou řadu aspektů, které zahrnují i použitý hardware a jeho architekturu.



efektivní spouštění aplikací z oblasti výpočetní chemie (MetaCentrum, malé klastry)

Revize 2

C2115
Praktický úvod do superpočítání

12. lekce / Modul 2

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

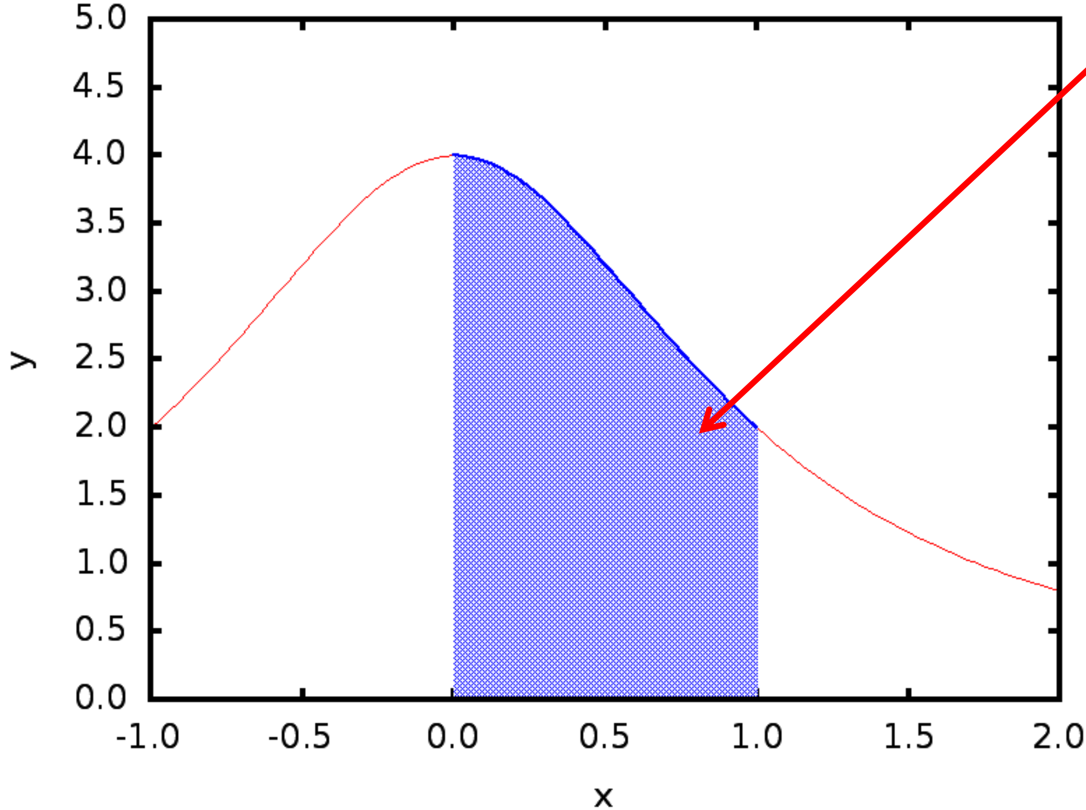
Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta,
Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-61137 Brno

Numerická integrace

Cvičení LIII.3

1. Napište program, který vypočte určitý integrál uvedený níže. K integraci použijte lichoběžníkovou metodu.

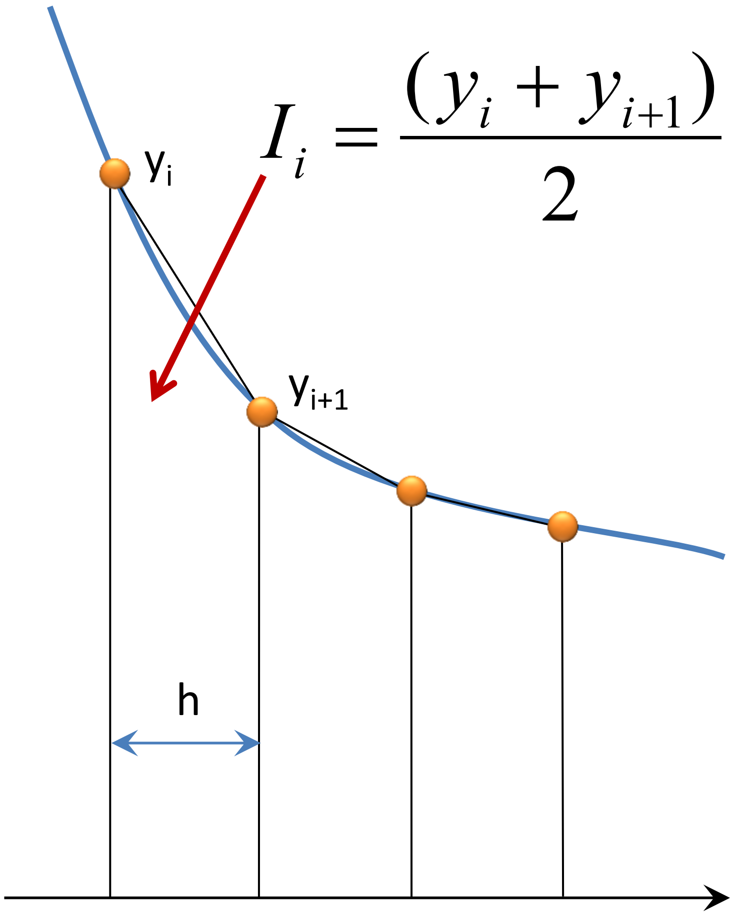
$$I = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$$



určitý integrál je plocha pod křivkou v rozsahu integračních mezí

Lichoběžníková vs obdélníková metoda

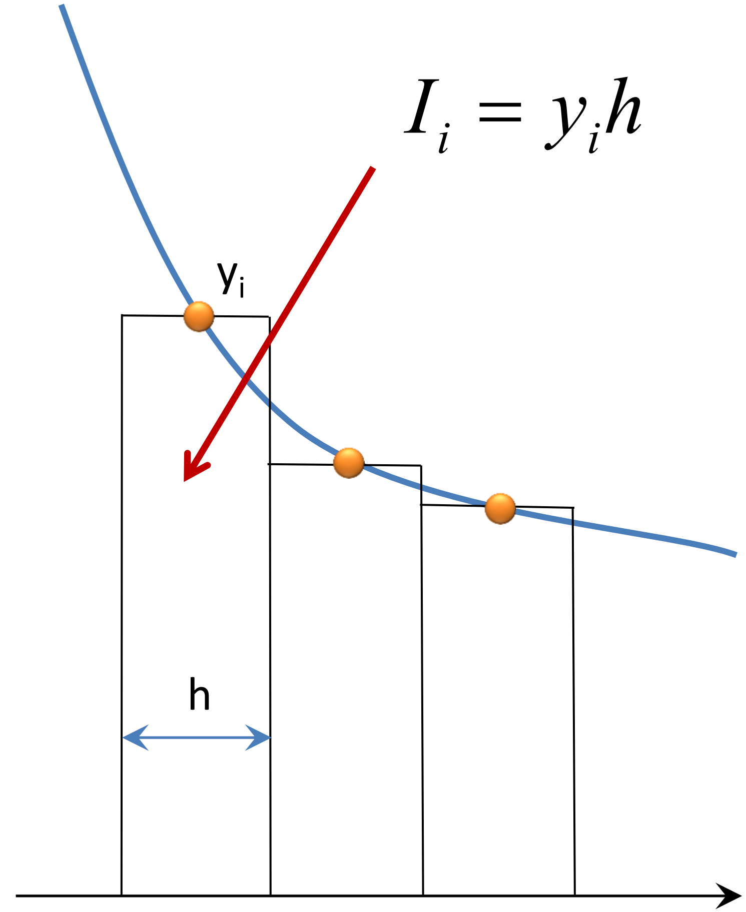
$$I_i = \frac{(y_i + y_{i+1})}{2} h$$



lichoběžníková metoda

numericky přesnější metoda

$$I_i = y_i h$$



obdélníková metoda

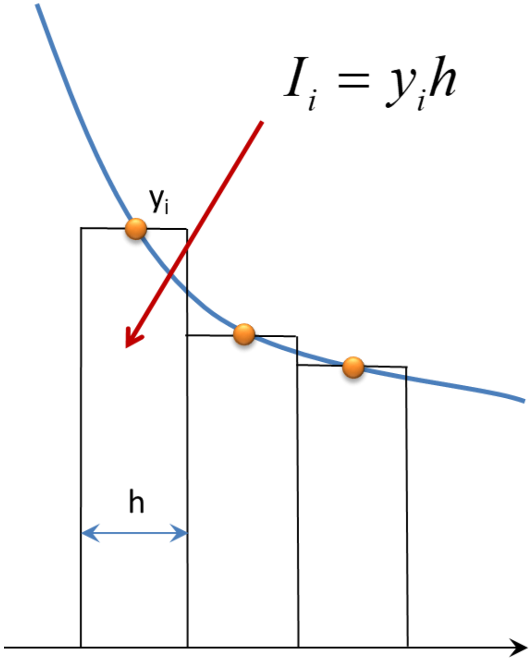
numericky méně přesná metoda
snadnější implementace a paralelizace

Sekvenční implementace

```
program integral

  implicit none
  integer(8)                :: i
  integer(8)                :: n
  double precision          :: rl,rr,h,v,y,x
  !--------------------------------------------------
  rl= 0.0d0
  rr= 1.0d0
  n = 2000000000
  h = (rr-rl)/n
  v = 0.0d0

  do i=1,n
    x = (i-0.5d0)*h + rl
    y = 4.0d0 / (1.0d0 + x**2)
    v = v + y*h
  end do

  write(*,*) 'integral = ',v

end program integral
```

$$I = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$$

obdélníková metoda



Cvičení M3.1

Zdrojové kódy:
/home/kulhanek/Documents/C2115/code/integral/single

1. Zkompilujte program **integral.f90** s optimalizací **-O3**
2. Určete dobu běhu aplikace potřebnou pro integraci funkce. K měření doby použijte program **/usr/bin/time**.
3. Čemu se rovná hodnota integrálu?
4. Jaký vliv má hodnota proměnné „n” (tj. velikost h) na přesnost výpočtu? K posouzení použijte programy **integral-errors_sp.f90** a **integral-errors_dp.f90**. Získané výsledky stručně diskutujte.