

# Obsah

<b>1 ÚVOD</b>	<b>4</b>
1.1 Co je to paralelní počítání?	4
1.2 Proč potřebujeme paralelní počítače?	4
1.3 Problémy spojené s vývojem paralelního počítání	5
1.4 Kdy se vyplatí paralelizace?	5
1.5 Závisí způsob paralelizace výpočtů na architektuře paralelních počítačů?	6
1.6 Rozdělení paralelních úloh z hlediska jejich spolupráce během výpočtu	8
1.7 SPMD úlohy a strategie paralelizace	10
<b>2 MPI</b>	<b>11</b>
2.1 Co je to MPI?	11
2.2 Vytvoření prostředí pro paralelní počítání	11
2.3 Program typu „Hello World“	12
2.4 Argumenty příkazů MPLSEND a MPLRECV	14
2.5 Více o MPLSEND a MPLRECV	15
2.5.1 Numerická integrace lichoběžníkovou metodou	15
2.5.2 Paralelní program pro numerickou integraci lichoběžníkovou metodou	16
2.6 Vstup a výstup v paralelních programech	18
2.6.1 Vstup z terminálu s použitím MPLSEND a MPLRECV	19
2.6.2 Vstup z terminálu s použitím MPLBCAST	21
2.6.3 Vstup z terminálu s použitím MPLPACK a MPLUNPACK	22
2.6.4 Vstup ze souboru	24
2.6.5 Srovnání jednotlivých metod	25
2.7 Příkazy MPLREDUCE a MPLALLREDUCE	25
2.8 Často používané MPI příkazy	28
2.8.1 Příkazy pro vytvoření a správu paralelního prostředí	28
2.8.2 Příkazy pro kolektivní komunikaci	29
2.8.3 Příkazy pro operace na proměnných distribuovaných na jednotlivých procesech	37
<b>3 APLIKACE</b>	<b>41</b>
3.1 Paralelní „tempering“	41
3.1.1 Částice v jednorozměrném silovém poli	41
3.1.2 Monte Carlo metoda	42
3.1.3 Metoda paralelního „temperingu“	47
3.2 Paralelní molekulární dynamika	56
3.2.1 Úvod	56
3.2.2 Paralelizace dvojnásobného cyklu v MD programu	56