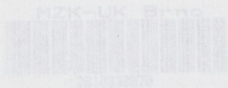


Obsah

1 ÚVOD	5
1.1 Co je to paralelní počítání?	5
1.2 Proč potřebujeme paralelní počítače?	5
1.3 Problémy spojené s vývojem paralelního počítání	6
1.4 Kdy se vyplatí paralelizace?	6
1.5 Závísí způsob paralelizace výpočtů na architektuře paralelních počítačů?	7
1.6 Rozdělení paralelních úloh z hlediska jejich spolupráce během výpočtu	10
1.7 SPMD úlohy a strategie paralelizace	11
2 MPI	13
2.1 Co je to MPI?	13
2.2 Vytvoření prostředí pro paralelní počítání	13
2.3 Program typu „Hello World“	14
2.4 Argumenty příkazů MPLSEND a MPLRECV	16
2.5 Více o MPLSEND a MPLRECV	17
2.5.1 Numerická integrace lichoběžníkovou metodou	17
2.5.2 Paralelní program pro numerickou integraci lichoběžníkovou metodou	18
2.6 Vstup a výstup v paralelních programech	20
2.6.1 Vstup z terminálu s použitím MPLSEND a MPLRECV	21
2.6.2 Vstup z terminálu s použitím MPLBCAST	23
2.6.3 Vstup z terminálu s použitím MPLPACK a MPLUNPACK	24
2.6.4 Vstup ze souboru	26
2.6.5 Srovnání jednotlivých metod	27
2.7 Příkazy MPIREDUCE a MPLALLREDUCE	27
2.8 Často používané MPI příkazy	30
2.8.1 Příkazy pro vytvoření a správu paralelního prostředí	30
2.8.2 Příkazy pro kolektivní komunikaci	31
2.8.3 Příkazy pro operace na proměnných distribuovaných na jednotlivých procesech	39
3 APLIKACE	43
3.1 Paralelní „tempering“	43
3.1.1 Částice v jednorozměrném silovém poli	43
3.1.2 Monte Carlo metoda	44
3.1.3 Metoda paralelního „temperingu“	49
3.2 Paralelní „tempering“ při modelování polymerů	57
3.2.1 Úvod	57
3.2.2 Konformace polymeru	58
3.2.3 Model polymeru	59
3.2.4 Rosenblutův Monte Carlo algoritmus	60
3.2.5 Rosenblutovo Monte Carlo a paralelní „tempering“	61



3.3	Paralelní molekulární dynamika	82
3.3.1	Úvod	82
3.3.2	Paralelizace	82
3.4	Paralelní Monte Carlo	93
3.4.1	Úvod	93
3.4.2	Hybridní Monte Carlo metoda	94
3.4.3	Paralelizace	95

2	MPI	97
2.1	Co je to MPI?	97
2.2	Vytvoření prostředí pro paralelní programy	97
2.3	Programy typu "Hello World"	97
2.4	Argumenty příkazů MPISEND a MPIRECV	97
2.5	Více o MPISEND a MPIRECV	97
2.5.1	Numarická interace libovolného modelu	97
2.5.2	Příklad programu pro numerickou interaci dimenzionovanou metodu	97
2.6	Vstup a výstup v paralelních programech	97
2.6.1	Vstup a terminální a použitím MPISEND a MPIRECV	97
2.6.2	Vstup a terminální a použitím MPIBCAST	97
2.6.3	Vstup a terminální a použitím MPIPACK a MPIUNPACK	97
2.6.4	Vstup ze souboru	97
2.6.5	Stvoření jednotlivých metod	97
2.7	Příkazy MPI REDUCE a MPI ALL REDUCE	97
2.8	Často používané MPI příkazy	97
2.8.1	Příkaz pro vytvoření a spuštění paralelního programu	97
2.8.2	Příkaz pro lokální komunikaci	97
2.8.3	Příkaz pro operaci na proměnných distribuovaných na jednotlivých procesech	97

3	APLIKACE	101
3.1	Paralelní tempering	101
3.1.1	Číslice v jednorozměrném silovém poli	101
3.1.2	Monte Carlo metoda	101
3.1.3	Metoda paralelního temperingu	101
3.2	Paralelní tempering "při modelování polymeru"	101
3.2.1	Úvod	101
3.2.2	Konformace polymeru	101
3.2.3	Model polymeru	101
3.2.4	Rozměrný Monte Carlo algoritmus	101
3.2.5	Rozměrný Monte Carlo a paralelní tempering	101