

### Задача 1.1.

Написать MPI-программу, которая находит минимум функции N=25000 переменных:

$$\Phi(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N) = \frac{\sum_{i=1}^N r_i V_i \psi_i^2 dr + \sum_{i=1}^{N-1} \frac{r_i + r_{i+1}}{2} \frac{(\psi_{i+1} - \psi_i)^2}{2dr^2} dr}{\sum_{i=1}^N r_i \psi_i^2 dr}$$

где  $r_i = dr * i$ ,  $dr = 0.00025$ ,  $V_i = (1.1) * r_i^{1.23}$  (квантовомеханический смысл этой задачи должен быть очевиден). Производная функции  $\Phi$  по каждой из переменных  $\psi_i$  в точке минимума не должна превышать  $10^{-10}$ .

Время счета должно составлять не более нескольких десятков секунд.

Выходной файл должен содержать значение функции  $\Phi$  в точке минимума.

Учтите, что по ходу вычислений необходимо сохранять нормировку волновой функции (знаменатель функции  $\Phi$  должен быть равен 1 — это ускоряет сходимость).

Программа должна работать при запуске на произвольном количестве процессоров, а результаты должны отличаться (неассоциативность сложения) не более, чем в последнем знаке. Найти коэффициенты ускорения при запуске на разном количестве процессоров.

## Задача 1.2.

Написать MPI-программу, которая находит минимум функции N=25000 переменных:

$$\Phi(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N) = \frac{\sum_{i=1}^N r_i V_i \psi_i^2 dr + \sum_{i=1}^{N-1} \frac{r_i + r_{i+1}}{2} \frac{(\psi_{i+1} - \psi_i)^2}{2dr^2} dr}{\sum_{i=1}^N r_i \psi_i^2 dr}$$

где  $r_i = dr * i$ ,  $dr = 0.00025$ ,  $V_i = (1.2) * r_i^{1.23}$  (квантовомеханический смысл этой задачи должен быть очевиден). Производная функции  $\Phi$  по каждой из переменных  $\psi_i$  в точке минимума не должна превышать  $10^{-10}$ .

Время счета должно составлять не более нескольких десятков секунд.

Выходной файл должен содержать значение функции  $\Phi$  в точке минимума.

Учтите, что по ходу вычислений необходимо сохранять нормировку волновой функции (знаменатель функции  $\Phi$  должен быть равен 1 — это ускоряет сходимость).

Программа должна работать при запуске на произвольном количестве процессоров, а результаты должны отличаться (неассоциативность сложения) не более, чем в последнем знаке. Найти коэффициенты ускорения при запуске на разном количестве процессоров.

### Задача 1.3.

Написать MPI-программу, которая находит минимум функции N=25000 переменных:

$$\Phi(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N) = \frac{\sum_{i=1}^N r_i V_i \psi_i^2 dr + \sum_{i=1}^{N-1} \frac{r_i + r_{i+1}}{2} \frac{(\psi_{i+1} - \psi_i)^2}{2dr^2} dr}{\sum_{i=1}^N r_i \psi_i^2 dr}$$

где  $r_i = dr * i$ ,  $dr = 0.00025$ ,  $V_i = (1.3) * r_i^{1.23}$  (квантовомеханический смысл этой задачи должен быть очевиден). Производная функции  $\Phi$  по каждой из переменных  $\psi_i$  в точке минимума не должна превышать  $10^{-10}$ .

Время счета должно составлять не более нескольких десятков секунд.

Выходной файл должен содержать значение функции  $\Phi$  в точке минимума.

Учтите, что по ходу вычислений необходимо сохранять нормировку волновой функции (знаменатель функции  $\Phi$  должен быть равен 1 — это ускоряет сходимость).

Программа должна работать при запуске на произвольном количестве процессоров, а результаты должны отличаться (неассоциативность сложения) не более, чем в последнем знаке. Найти коэффициенты ускорения при запуске на разном количестве процессоров.

#### Задача 1.4.

Написать MPI-программу, которая находит минимум функции N=25000 переменных:

$$\Phi(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N) = \frac{\sum_{i=1}^N r_i V_i \psi_i^2 dr + \sum_{i=1}^{N-1} \frac{r_i + r_{i+1}}{2} \frac{(\psi_{i+1} - \psi_i)^2}{2dr^2} dr}{\sum_{i=1}^N r_i \psi_i^2 dr}$$

где  $r_i = dr * i$ ,  $dr = 0.00025$ ,  $V_i = (1.4) * r_i^{1.23}$  (квантовомеханический смысл этой задачи должен быть очевиден). Производная функции  $\Phi$  по каждой из переменных  $\psi_i$  в точке минимума не должна превышать  $10^{-10}$ .

Время счета должно составлять не более нескольких десятков секунд.

Выходной файл должен содержать значение функции  $\Phi$  в точке минимума.

Учтите, что по ходу вычислений необходимо сохранять нормировку волновой функции (знаменатель функции  $\Phi$  должен быть равен 1 — это ускоряет сходимость).

Программа должна работать при запуске на произвольном количестве процессоров, а результаты должны отличаться (неассоциативность сложения) не более, чем в последнем знаке. Найти коэффициенты ускорения при запуске на разном количестве процессоров.

### Задача 1.5.

Написать MPI-программу, которая находит минимум функции N=25000 переменных:

$$\Phi(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N) = \frac{\sum_{i=1}^N r_i V_i \psi_i^2 dr + \sum_{i=1}^{N-1} \frac{r_i + r_{i+1}}{2} \frac{(\psi_{i+1} - \psi_i)^2}{2dr^2} dr}{\sum_{i=1}^N r_i \psi_i^2 dr}$$

где  $r_i = dr * i$ ,  $dr = 0.00025$ ,  $V_i = (1.5) * r_i^{1.23}$  (квантовомеханический смысл этой задачи должен быть очевиден). Производная функции  $\Phi$  по каждой из переменных  $\psi_i$  в точке минимума не должна превышать  $10^{-10}$ .

Время счета должно составлять не более нескольких десятков секунд.

Выходной файл должен содержать значение функции  $\Phi$  в точке минимума.

Учтите, что по ходу вычислений необходимо сохранять нормировку волновой функции (знаменатель функции  $\Phi$  должен быть равен 1 — это ускоряет сходимость).

Программа должна работать при запуске на произвольном количестве процессоров, а результаты должны отличаться (неассоциативность сложения) не более, чем в последнем знаке. Найти коэффициенты ускорения при запуске на разном количестве процессоров.