

### Задача 5.1.

Написать MPI-программу, которая находит минимум функции  $N=100001$  переменной:

$$\Phi(\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_{N-1}) = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} V_i \psi_i^2 dx + \sum_{i=0}^{N-2} \frac{(\psi_{i+1} - \psi_i)^2}{dx^2} dx}{\sum_{i=0}^{N-1} \psi_i^2 dx} .$$

Здесь  $dx = 0.0003$ ,

$$V_i = 0.988711109289910442560121 \cdot \left| i - \frac{N-1}{2} \right| \cdot dx .$$

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 на 1 процессоре должно составлять не более нескольких десятков секунд.

Количество верных знаков (верность знаков будет очевидна) должно равняться 8 штукам.

Учтите, что по ходу вычислений целесообразно 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. Найдите коэффициенты ускорения при запуске на разном (1 – 6) количестве процессоров.

## Задача 5.2.

Написать MPI-программу, которая находит минимум функции  $N=100001$  переменной:

$$\Phi(\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_{N-1}) = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} V_i \psi_i^2 dx + \sum_{i=0}^{N-2} \frac{(\psi_{i+1} - \psi_i)^2}{dx^2} dx}{\sum_{i=0}^{N-1} \psi_i^2 dx} .$$

Здесь  $dx = 0.0003$ ,

$$V_i = 1.005053236666709695626079 \cdot \left| i - \frac{N-1}{2} \right| \cdot dx .$$

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 на 1 процессоре должно составлять не более нескольких десятков секунд.

Количество верных знаков (верность знаков будет очевидна) должно равняться 8 штукам.

Учтите, что по ходу вычислений целесообразно 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. Найдите коэффициенты ускорения при запуске на разном (1 – 6) количестве процессоров.

### Задача 5.3.

Написать MPI-программу, которая находит минимум функции  $N=100001$  переменной:

$$\Phi(\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_{N-1}) = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} V_i \psi_i^2 dx + \sum_{i=0}^{N-2} \frac{(\psi_{i+1} - \psi_i)^2}{dx^2} dx}{\sum_{i=0}^{N-1} \psi_i^2 dx} .$$

Здесь  $dx = 0.0003$ ,

$$V_i = 1.021484423057431339642069 \cdot \left| i - \frac{N-1}{2} \right| \cdot dx .$$

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 на 1 процессоре должно составлять не более нескольких десятков секунд.

Количество верных знаков (верность знаков будет очевидна) должно равняться 8 штукам.

Учтите, что по ходу вычислений целесообразно 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. Найдите коэффициенты ускорения при запуске на разном (1 – 6) количестве процессоров.

#### Задача 5.4.

Написать MPI-программу, которая находит минимум функции  $N=100001$  переменной:

$$\Phi(\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_{N-1}) = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} V_i \psi_i^2 dx + \sum_{i=0}^{N-2} \frac{(\psi_{i+1} - \psi_i)^2}{dx^2} dx}{\sum_{i=0}^{N-1} \psi_i^2 dx} .$$

Здесь  $dx = 0.0003$ ,

$$V_i = 1.038004188342085304137061 \cdot \left| i - \frac{N-1}{2} \right| \cdot dx .$$

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 на 1 процессоре должно составлять не более нескольких десятков секунд.

Количество верных знаков (верность знаков будет очевидна) должно равняться 8 штукам.

Учтите, что по ходу вычислений целесообразно 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. Найдите коэффициенты ускорения при запуске на разном (1 – 6) количестве процессоров.

### Задача 5.5.

Написать MPI-программу, которая находит минимум функции  $N=100001$  переменной:

$$\Phi(\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_{N-1}) = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} V_i \psi_i^2 dx + \sum_{i=0}^{N-2} \frac{(\psi_{i+1} - \psi_i)^2}{dx^2} dx}{\sum_{i=0}^{N-1} \psi_i^2 dx} .$$

Здесь  $dx = 0.0003$ ,

$$V_i = 1.054612060083060331219203 \cdot \left| i - \frac{N-1}{2} \right| \cdot dx .$$

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 на 1 процессоре должно составлять не более нескольких десятков секунд.

Количество верных знаков (верность знаков будет очевидна) должно равняться 8 штукам.

Учтите, что по ходу вычислений целесообразно 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. Найдите коэффициенты ускорения при запуске на разном (1 – 6) количестве процессоров.

### Задача 5.6.

Написать MPI-программу, которая находит минимум функции  $N=100001$  переменной:

$$\Phi(\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_{N-1}) = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} V_i \psi_i^2 dx + \sum_{i=0}^{N-2} \frac{(\psi_{i+1} - \psi_i)^2}{dx^2} dx}{\sum_{i=0}^{N-1} \psi_i^2 dx} .$$

Здесь  $dx = 0.0003$ ,

$$V_i = 1.071307573322405999774862 \cdot \left| i - \frac{N-1}{2} \right| \cdot dx .$$

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 на 1 процессоре должно составлять не более нескольких десятков секунд.

Количество верных знаков (верность знаков будет очевидна) должно равняться 8 штукам.

Учтите, что по ходу вычислений целесообразно 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. Найдите коэффициенты ускорения при запуске на разном (1 – 6) количестве процессоров.

### Задача 5.7.

Написать MPI-программу, которая находит минимум функции  $N=100001$  переменной:

$$\Phi(\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_{N-1}) = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} V_i \psi_i^2 dx + \sum_{i=0}^{N-2} \frac{(\psi_{i+1} - \psi_i)^2}{dx^2} dx}{\sum_{i=0}^{N-1} \psi_i^2 dx} .$$

Здесь  $dx = 0.0003$ ,

$$V_i = 1.088090270386525578331080 \cdot \left| i - \frac{N-1}{2} \right| \cdot dx .$$

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 на 1 процессоре должно составлять не более нескольких десятков секунд.

Количество верных знаков (верность знаков будет очевидна) должно равняться 8 штукам.

Учтите, что по ходу вычислений целесообразно 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. Найдите коэффициенты ускорения при запуске на разном (1 – 6) количестве процессоров.

### Задача 5.8.

Написать MPI-программу, которая находит минимум функции  $N=100001$  переменной:

$$\Phi(\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_{N-1}) = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} V_i \psi_i^2 dx + \sum_{i=0}^{N-2} \frac{(\psi_{i+1} - \psi_i)^2}{dx^2} dx}{\sum_{i=0}^{N-1} \psi_i^2 dx} .$$

Здесь  $dx = 0.0003$ ,

$$V_i = 1.104959700697934973657999 \cdot \left| i - \frac{N-1}{2} \right| \cdot dx .$$

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 на 1 процессоре должно составлять не более нескольких десятков секунд.

Количество верных знаков (верность знаков будет очевидна) должно равняться 8 штукам.

Учтите, что по ходу вычислений целесообразно 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. Найдите коэффициенты ускорения при запуске на разном (1 – 6) количестве процессоров.