

## Probabilidad aplicada 2015

Instructor: Ivan Guerrero

### Cálculo de valores promedio, varianza y desviación estandar

El objetivo de esta tarea será que Ustedes calculen cantidades importante en probabilidad como lo son el valor promedio, la varianza y la desviación estandar a partir de resultados “experimentales” de forma numerica utilizando una simulacion de dinamica molecular.

Para iniciar la sesion entren a la maquina bilbo:

```
ssh gpu0@bilbo
```

Ahi encontraran dos directorios PA2015\_GPU0 y PA2015\_GPU2

La maquina tiene dos tarjetas graficas una es la 0 y la otra la 2.

Entrando a cualquier directorio encontraran el archivo

```
time.hoomd
```

Lo que tendran que hacer es calcular el tiempo que tarda el programa en ejecutar una simulacion de dinamica molecular i) en precision simple con tarjetas graficas, ii) en precision doble con tarjetas grtaficas y iii) con precision doble en cpu, como funcion del numero de particulas.

Para cambiar el numero de particulas tendran que modificar el numero  $N = \text{numero\_de\_particulas}$  en el archivo time.hoomd

Para cambiar la semilla hay que modificar  $\text{seed} = 32000$  por un entero menor a 32000 positivo.

La idea es generar 20 corridas con una semilla diferente cada una para un numero dado de particulas.

El numero de particulas  $N$  en GPUs sera: 10, 100, 1000, 10000, 100000, 1000000 y 10000000.

El numero de particulas  $N$  en CPUs sera: 10, 100, 1000, 10000 y 100000.

Para aquellas corridas que tarden mas de una hora pueden generar solo 10 corridas.

Para obtener el tiempo usando precision simple en GPUs:

```
>time hoomds time.hoomd --gpu=0
```

lo cual generara una salida del tipo

```
real    0m3.026s
user    0m2.449s <== tiempo a reportar
sys     0m0.539s
```

Para obtener el tiempo usando precision doble en GPUs:

```
>time hoomdd time.hoomd --gpu=0
```

lo cual generara una salida del tipo

```
real    0m3.026s
user    0m2.449s <== tiempo a reportar
sys     0m0.539s
```

Para obtener el tiempo usando precision doble en CPUs:

```
>time hoomdd time.hoomd --mode=cpu
```

lo cual generara una salida del tipo

```
real    0m18.107s
user    0m17.991s <== tiempo a reportar
sys     0m0.084s
```

Los parametros usados en archivo inicial time.hoomd son:

N=10000, numero de particulas  
seed=32000, valor inicial de semilla

Una vez que terminen y tengan 20 (o 10) datos de tiempo como funcion de N con diferentes semillas, escribir un programan en fortran90 que lea estos datos, y genere el valor promedio, la varianza y la desviacion estandar.

Al final, tendran que generar tres archivos de texto (GPU simple, GPU doble, CPU doble) con cuatro columnas, en la primera ira el numero N de particulas, en la segunda el promedio de tiempo, en la tercera la varianza, y en la cuarta la desviacion estandar. La desviacion estandar es usualmente usada como la incertidumbre. Grafiquen el comportamiento del promedio del tiempo como funcion de N incluyendo la desviacion estandar como barras de error asociadas a la incertidumbre.