

Nokkrir punktar um Linux

Viðar Guðmundsson
Raunvísindastofnun



Samband við aðrar Linux eða Unix-vélar

Nota "secure shell"

```
ssh -X -C vidar@herdubreid.hi.is
```

Grafískt samband



Samþjöppun

Flutningur skráa

Örugg afritun

```
scp skra.txt vidar@herdubreid:Mappa/
```

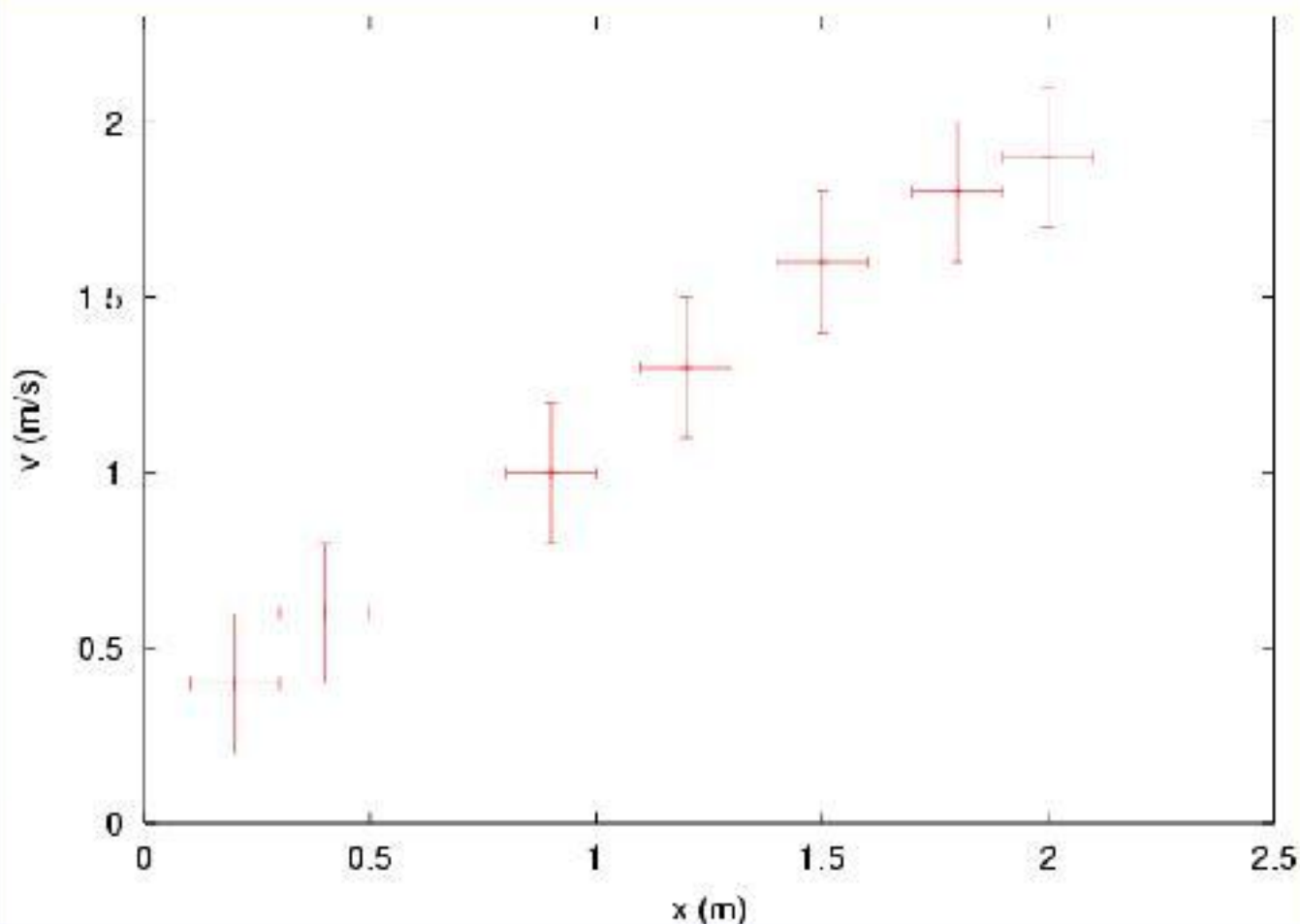
Örugg speglun

```
rsync -avzr --delete -e ssh Mappa/  
herdubreid:Mappa/
```

Vísindaleg gröf fyrir skýrslur og annað

Dæmi og upplýsingar um "gnuplot"

<http://hartree.raunvis.hi.is/~vidar/teaching.html>



Gott ps úttak
Skipanaskrár
Notað fyrir
birtingar

Excitation pulse

$$W(t) = V_t r^{|N_p|} \cos(N_p \phi) \exp(-sr^2 - \Gamma t) \sin(\omega_1 t) \sin(\omega t) \theta(\pi - \omega_1 t)$$

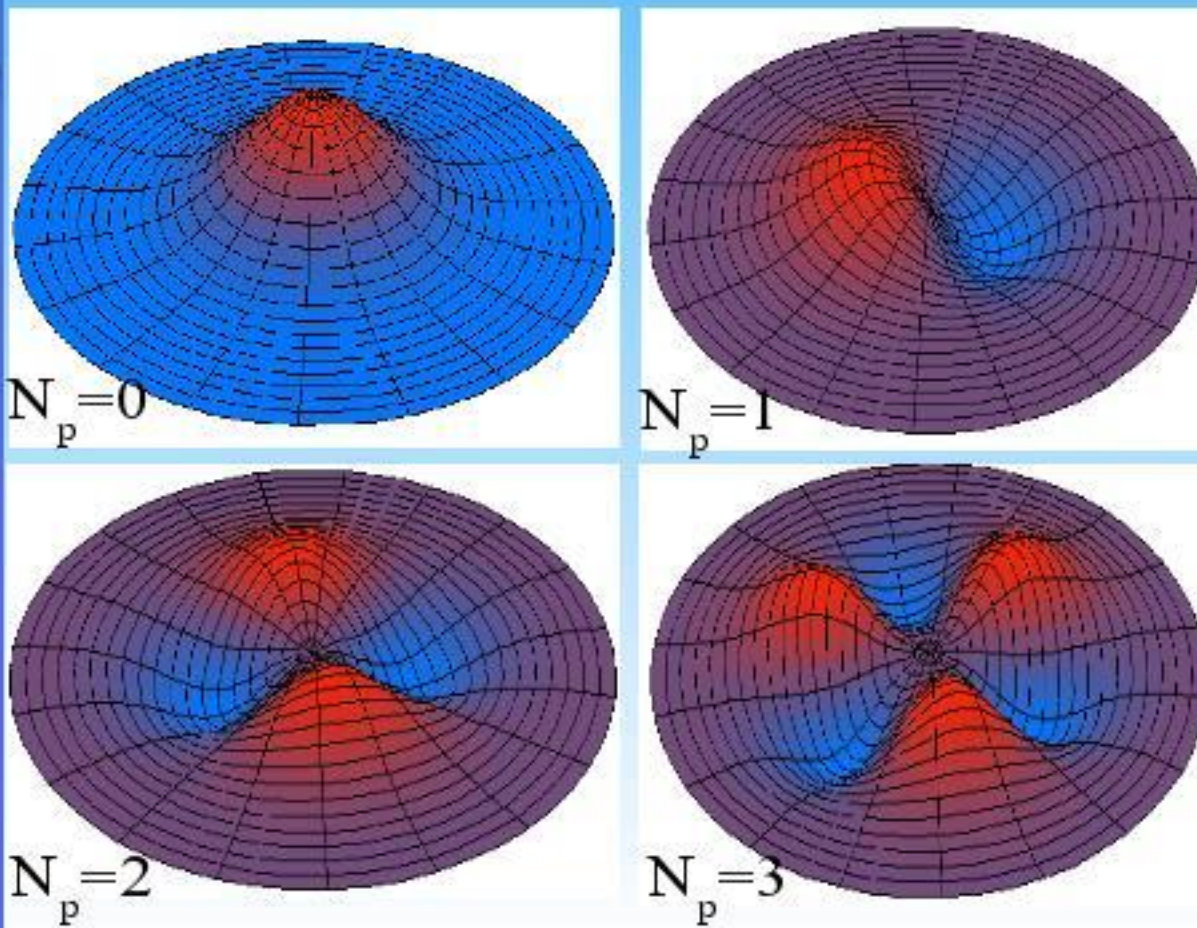
$$V_t a^{|N_p|} = 10^{-2} - 2 \text{ meV}$$

$$a = 12.9 \text{ nm}, B = 0.8 \text{ T}$$

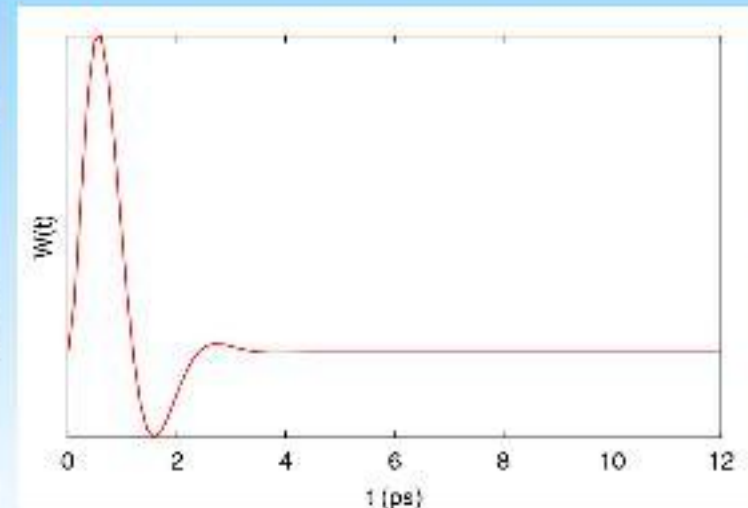
$$\Gamma = 2 \text{ ps}^{-1}, \quad a^2 s = 1.0 \text{ or } 0.0,$$

$$\hbar\omega_1 = 0.658 \text{ meV}, \quad \hbar\omega = 2.63 \text{ meV}$$

No imposed angular direction



Spatial, temporal



Time evolution

Nonequilibrium

Density operator
Time-evolution operator

Basis

Matrix equations

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho(t) = [H + W(t), \rho(t)]$$

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{T}(t) &= H(t)T(t) \\ -i\hbar \dot{T}^+(t) &= T^+(t)H(t) \end{aligned}$$

Crank-Nicholson

$$\rho(t + \Delta t) = T(\Delta t)\rho(t)T^+(\Delta t)$$

$$\left\{ 1 + \frac{i\Delta t}{2\hbar} H[\rho; t + \Delta t] \right\} T(\Delta t) \approx \left\{ 1 - \frac{i\Delta t}{2\hbar} H[\rho; t] \right\}$$

Possible self-consistency

Fortran

F77 -> "g77"

Frjálst "gnu"-forrit

F98 -> "ifc"

Akademískt leyfi frá
Intel fyrir Linux,
bestað fyrir Intel
örgjörva

Tölvueðlisfræði

<http://hartree.raunvis.hi.is/~vidar/Nam/TE/index.html>

MPI - samhliðavinnsla



nano = 16 vélar

Ný þyrping = 120 vélar

Eðlisfræði þéttefnis
Stjarneðlisfræði
Skammtaefnafræði
Hagnýtt stærðfræði
Vélaverkfræði

MPI - samhliðavinnsla

Með stýriskipunum í fortran og C er verki skipt milli tölva (örgjörva).

Líka er hægt að keyra 2 eða fleiri ímyndir sama forrits á eins örgjörva vél til reynslu

Hvað gerum við ekki þegar reiknitími telst í dögum, vikum, mánuðum

<http://hartree.raunvis.hi.is/~vidar/Rann/Nano/nano.html>