

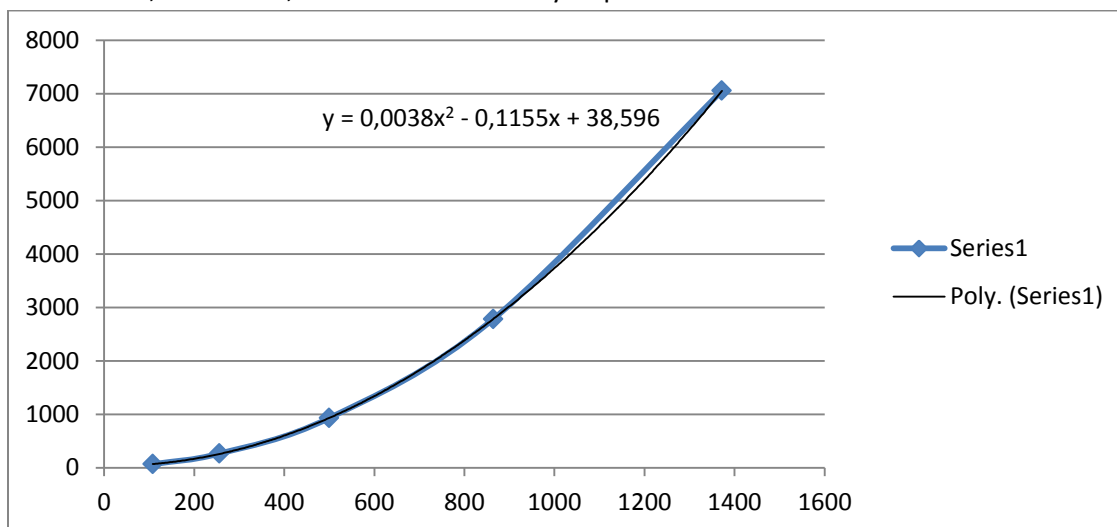
Nanotechnologia obliczeniowa – zestaw 5

1. Poniżej znajduje się tabela z całkowitymi czasami obliczeń przykładowych układów (pobranych ze strony). W tej części nie jest zaimplementowany jeszcze próg odcięcia. Czasy podane są w ms.

a.

	Zestaw 1	Zestaw 2	Zestaw 3	Zestaw 4	Zestaw 5
Kolejny czas	Total Time	Total Time	Total Time	Total Time	Total Time
1	73	269	923	2767	7184
2	74	276	934	2763	6992
3	63	260	926	2802	7058
4	60	262	940	2782	7015
5	62	260	934	2793	7010
Czas średni	66,4	265,4	931,4	2781,4	7051,8
Liczba atomów	108	256	500	864	1372

- b. Wygenerowany wykres dla powyższych danych. Na osi X znajdują się wartości liczby atomów, a na osi Y jest czas średni obliczeń w ms. Na wykresie znajduje się również dopasowana funkcja do wygenerowanego wykresu. Możemy zaobserwować kwadratową zależność ilości atomów do czasu wykonywania się symulacji - $y = 0,0038x^2 - 0,1155x + 38,596$. Taka zależność była spodziewana.



- c. Na podstawie otrzymanego wzoru funkcji oszacowałem długość symulacji dla 200 000 kroków i 10 000 atomów.

Jednostka	Czas
ms	1600000000
s	1600000
min	26666,66667
h	444,4444444
days	18,51851852

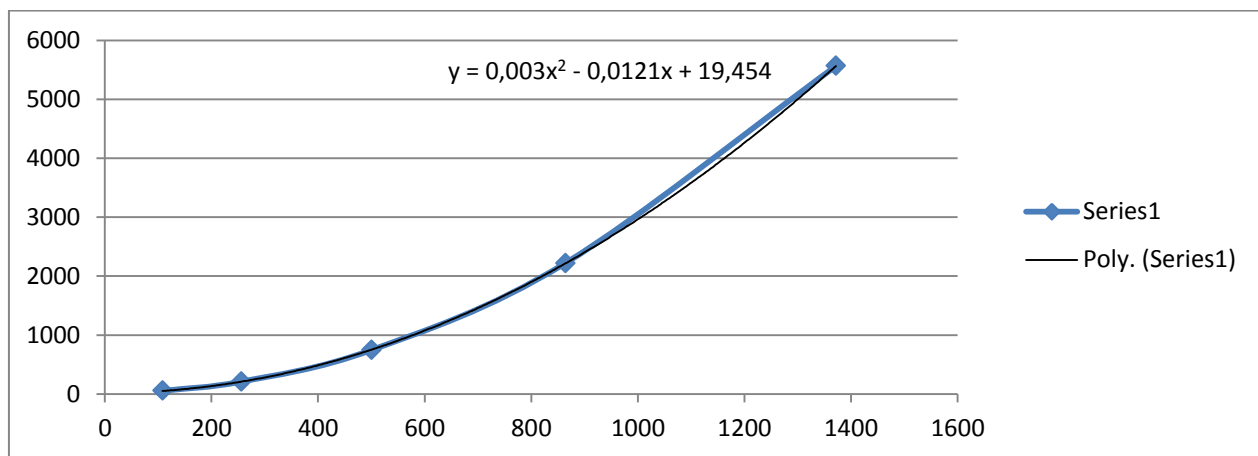
Czas symulacji (na jednym rdzeniu procesora core i5) to 18 i pół dnia.

2. Część druga obliczeń obejmuje już zaimplementowany zadany próg odcięcia (8.5 Å).

a.

	Zestaw 1	Zestaw 2	Zestaw 3	Zestaw 4	Zestaw 5
Kolejny czas	Total Time	Total Time	Total Time	Total Time	Total Time
1	58	212	747	2207	5577
2	54	211	751	2238	5557
3	52	208	757	2215	5590
4	55	211	739	2232	5498
5	50	213	738	2205	5597
Czas średni	53,8	211	746,4	2219,4	5563,8
Liczba atomów	108	256	500	864	1372

- b. Analogicznie – wykres dla danych wraz ze wzorem funkcji. Zależność jest również kwadratowa - $y = 0,003x^2 - 0,0121x + 19,454$.



c. Oszacowany czas dla 200 000 kroków i 10 000 atomów wyniósł 11 i pół dnia.

Jednostka	Czas
ms	1000000000
s	1000000
min	16666,66667
h	277,777778
days	11,57407407

Możemy zaobserwować, że wprowadzenie promienia odcięcia znacznie skraca czas symulacji (wzrost wynosi około 37%).