inż. Kohlandt Dariusz

WFTiMS

Nr 123738

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.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | 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 |

* 1. 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 = 0,0038x2 - 0,1155x + 38,596. Taka zależność była spodziewana.
  2. 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.

1. Część druga obliczeń obejmuje już zaimplementowany zadany próg odcięcia (8.5 Ä).

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | 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 |

* 1. Analogicznie – wykres dla danych wraz ze wzorem funkcji. Zależność jest również kwadratowa - y = 0,003x2 - 0,0121x + 19,454.
  2. 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 | 277,7777778 |
| days | 11,57407407 |

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