Estructuras electrónica de LiF dopado con Mg y Ti.

Guerda Massillon
Investigadora Titular A, TC, IFUNAM

Informe de actividades septiembre 2016-Enero 2017

Los cálculos necesarios en este proyecto son muy pesados y de larga duración. Para un mejor uso de los recursos, se han realizado pruebas de optimización para determinar el número de "core" óptimo para poder correr el programa. En las figuras 1 y 2 se muestran el tiempo por etapa obtenido por personas diferentes usando el mismo archivo de entrada.

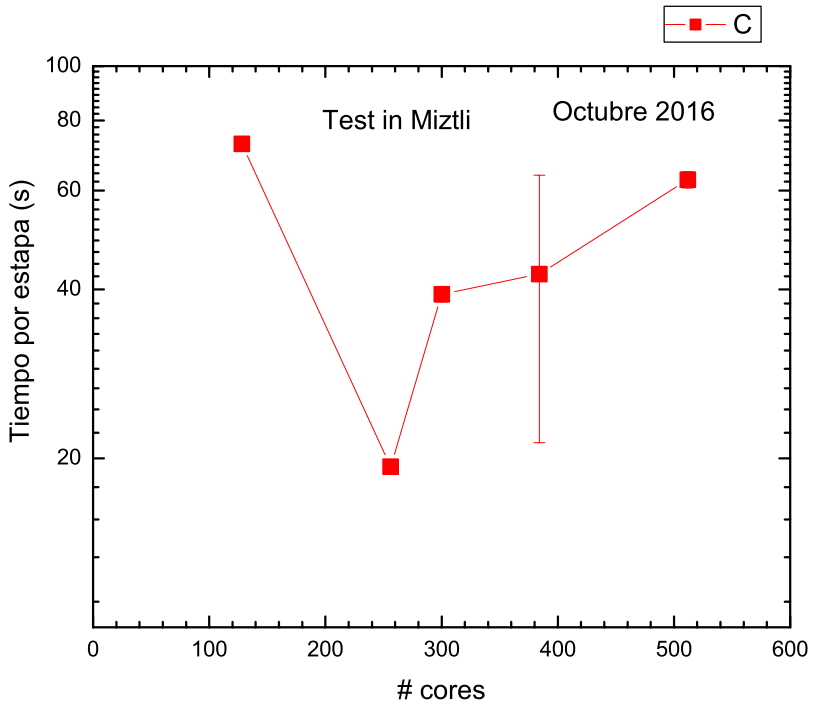

Figura 1. Tiempo por etapa como función de numero de cores utilizados. Estos cálculos se hicieron desde el IFUNM usando una laptop.

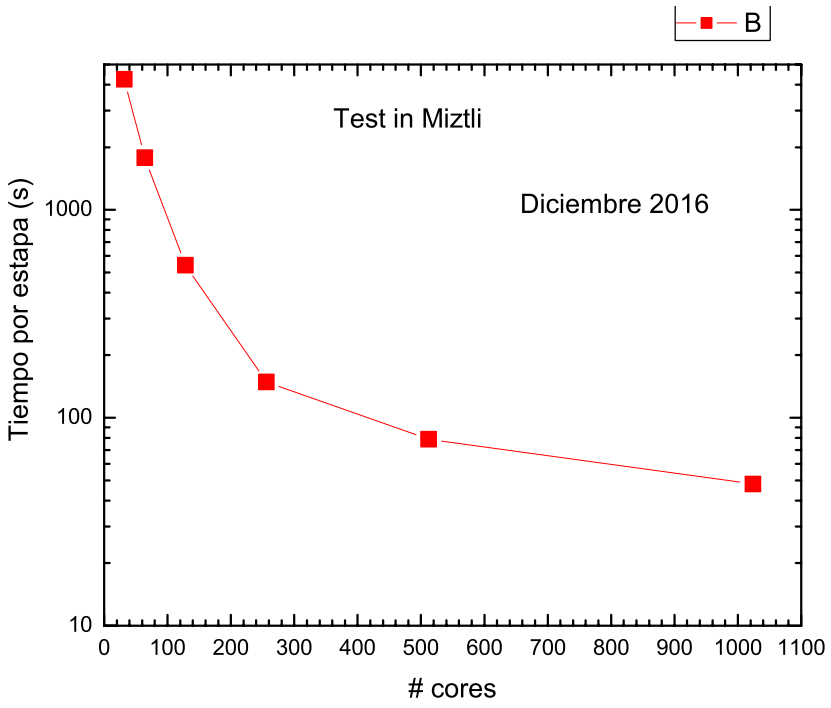

Figure 2. Similar a la figura 1 obtenido por José Luis desde la coordinación de supercomputo

Hasta ahora, no se ha podido concluir sobre el numero optimo de cores necesarios ya que los datos no son reproducibles. Según la figura 1, si se usan 512 cores, se necesita un promedio de 63 segundos por cada etapa mientras que la figura 2 sugiere 79 segundos por etapa. Además, un ultimo calculo realizado en enero sugiere un promedio de hasta 400 segundos por etapa usando 512 cores.