dNTPases - Exploration #421

Project # 415 (In Progress): Заряд vs координация в MnmE

Проработка сетапа для получения барьера

20.05.2021 19:31 - Evgenia Elizarova

Status:	New	**Start date:**	20.05.2021
Priority:	Normal	**Due date:**	01.09.2021
Assignee:	Evgenia Elizarova	**% Done:**	0%
Category:			
Target version:			

Description

History

#1 - 21.05.2021 14:44 - Evgenia Elizarova

Цель - получить сетап, который позволяет оптимально производить расчет барьера реакции

В качестве метрики, оптимальности сетапа - количество шагов (время до сходимости) + смотрим непосредственно барьер
Оптимальный сетап - достижение сходимости за 50 пс.
Оценка сходимости и расчет барьера исходя из sum_hills.

Отработка сетапа на системе минимального размера дикого типа MnmE.

Также провести оценку времени расчетов для полноразмерной системы на разном количестве тредов (1, 2, 4). (вопрос 21.05.2021 от Андрея Викторовича)

Варианты, которые можно проверить, для достижения цели.

1) старт всех rs с небольшим height (=2) - цель посмотреть насколько текущий пайплайн хороших/плохой
2) старт 4 rs+4 ps и height (2)
3) может увеличить height для системы в 2)
4) все с разных состояний, height=2
5) все с разных состояний, height=4
5) что-то еще придумать...

по достижении получении оптимального пайплайна переход к большой системе по идее время до сходимости такое же. Если нет, то мб больше состояний, которых нет в минимальной?