

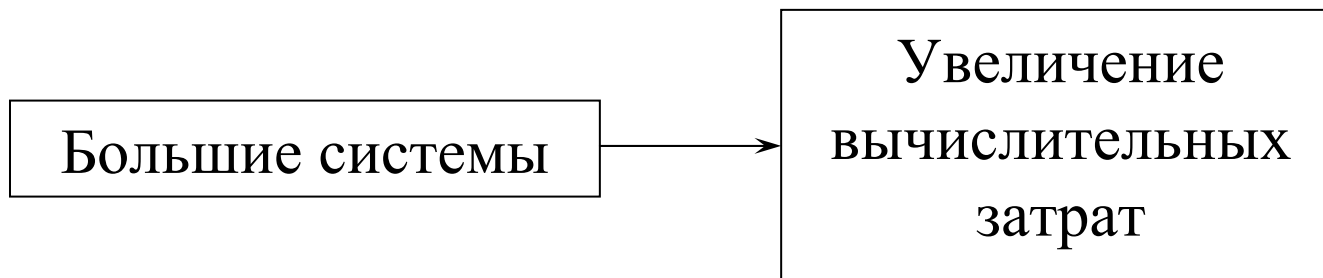
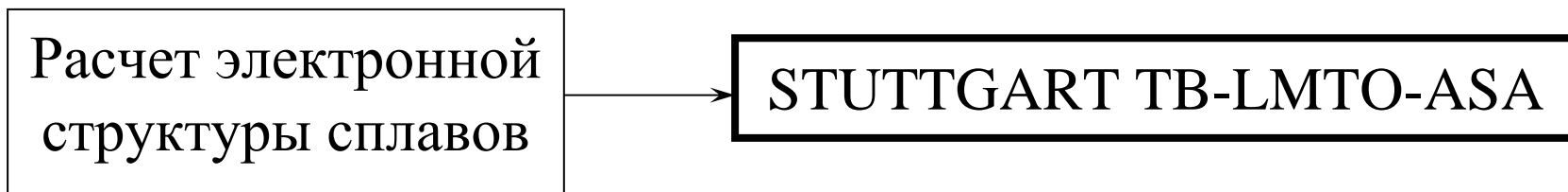
**Использование
параллельного подхода в
первопринципных расчетах
свойств сплавов железа с
переходными металлами**

М.М. Ялалов, аспирант

А.А. Мирзоев, проф., д.ф.-м.н.

кафедра ОТФ, ЮУрГУ

Введение

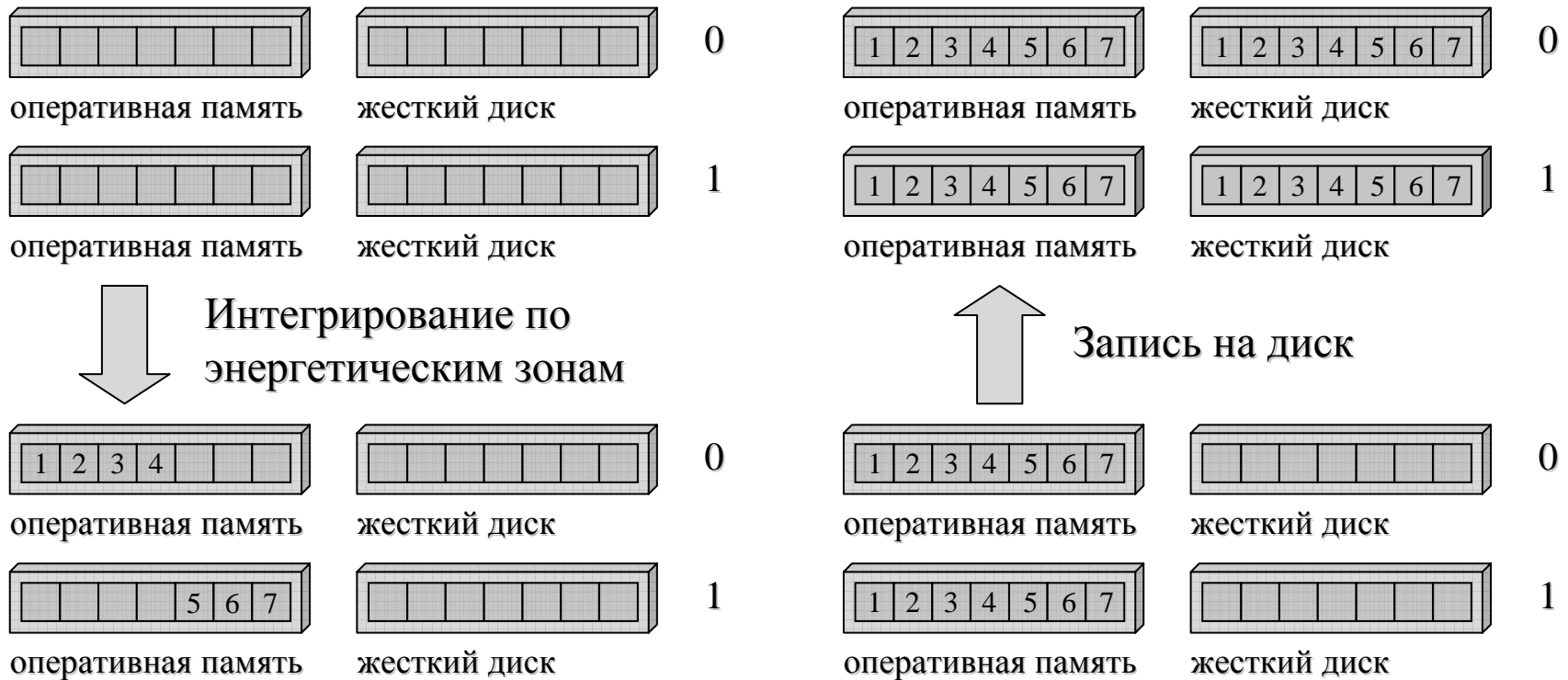


Самая времяемкая процедура

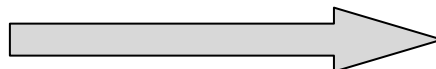
— Интегрирование по энергетическим зонам в обратном пространстве

Схема обмена данными в условиях достаточного объема оперативной памяти

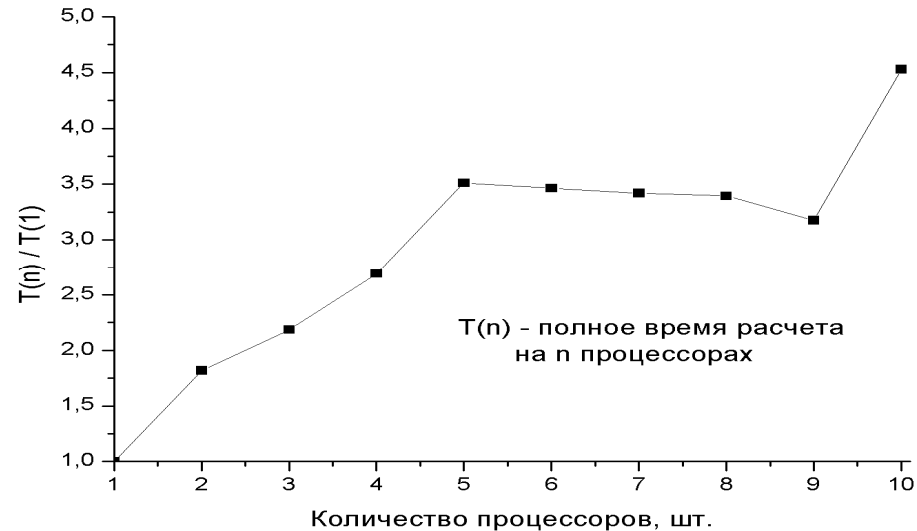
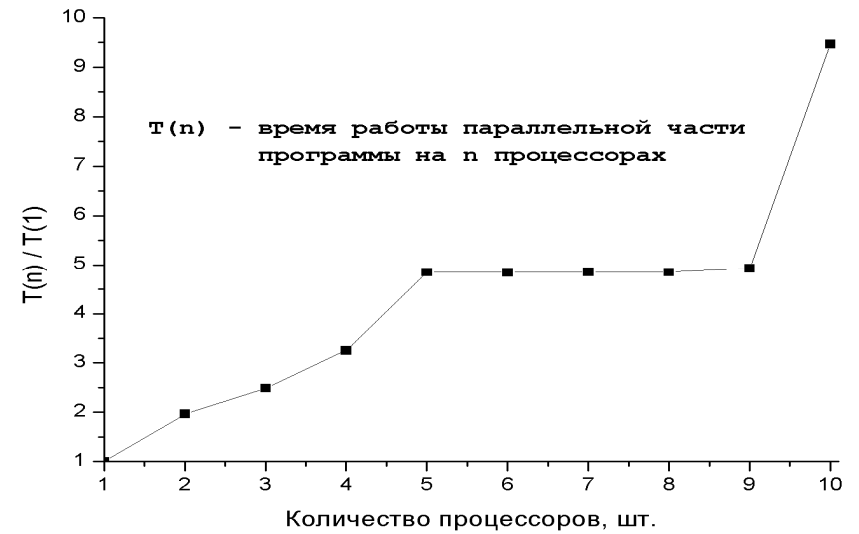
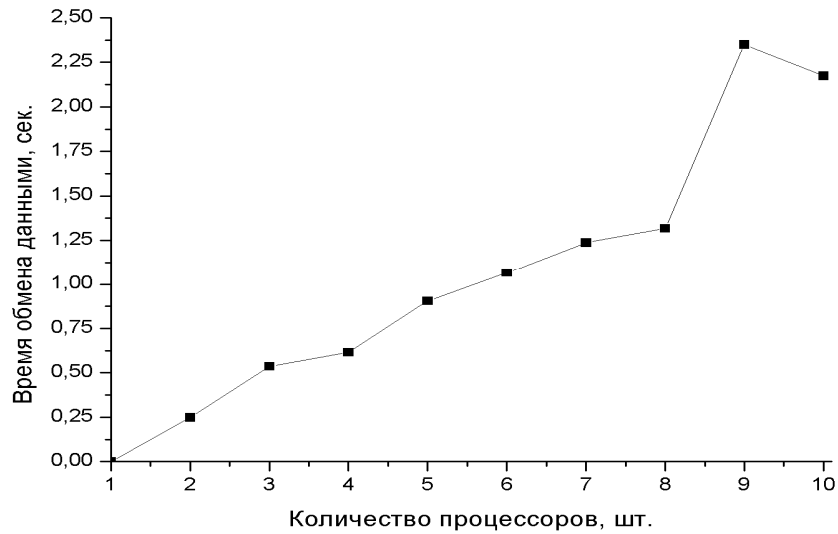
Задача: после работы параллельной части программы на диске должен остаться файл с результатами расчета.



MPI_ALLGATHERV



Результаты для системы с 10 к-точками



Результаты для системы с 18 к-точками

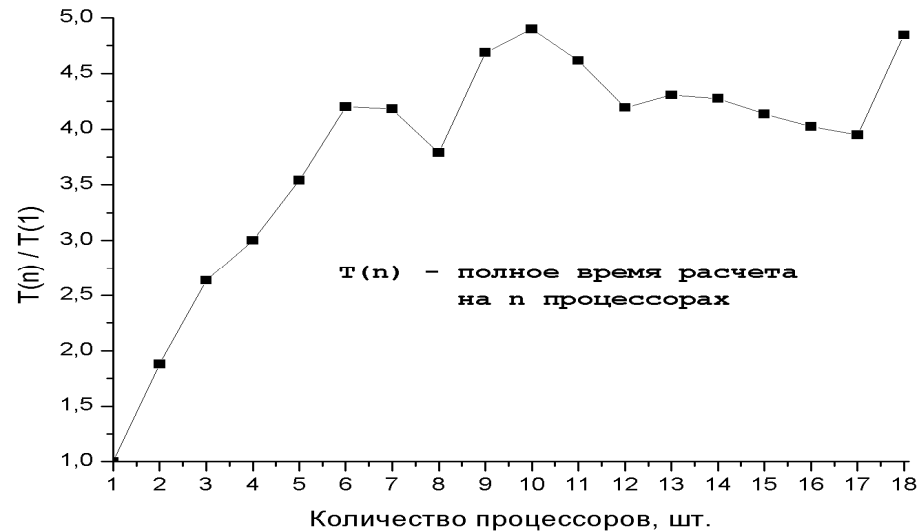
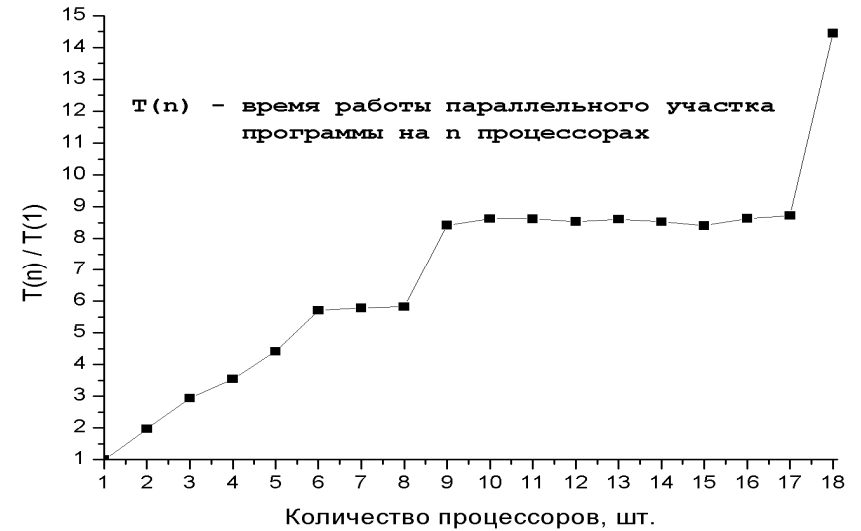
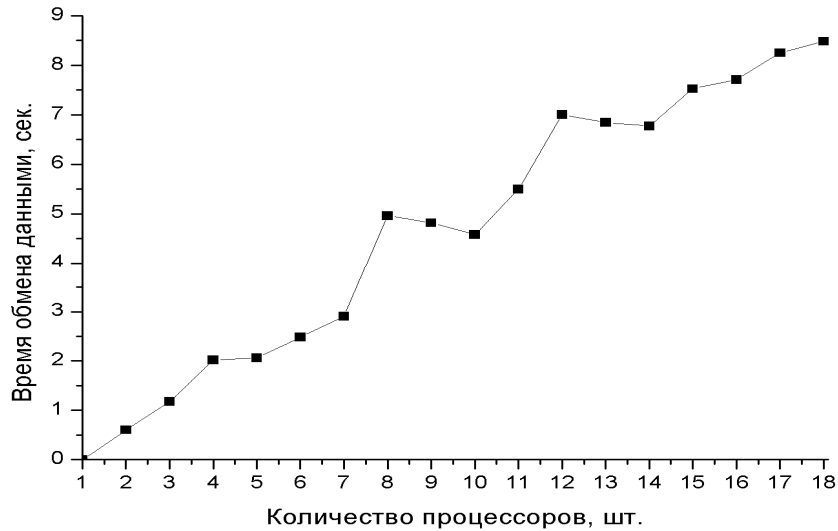
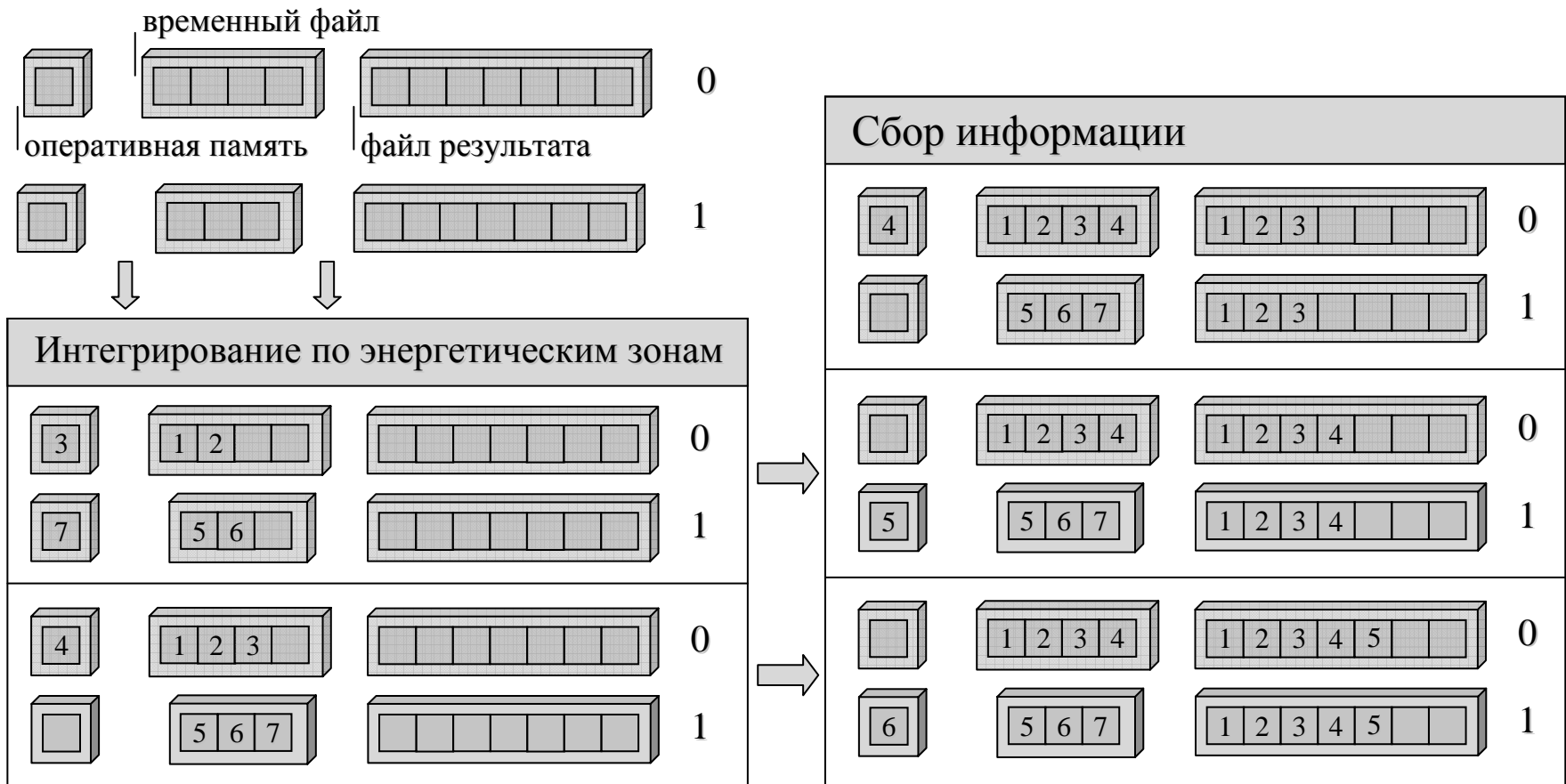


Схема обмена данными в условиях нехватки объема оперативной памяти

Задача: после работы параллельной части программы на диске должен остаться файл с результатами расчета.



Результаты

1. Реализован параллельный подход в процедуре вычисления зонной структуры программного пакета ТВ-LMTO-ASA.
2. Задача решена отдельно для систем разного размера.