

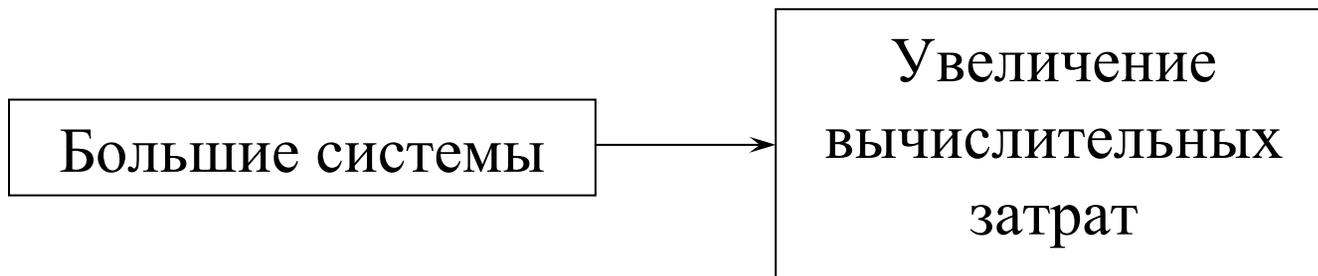
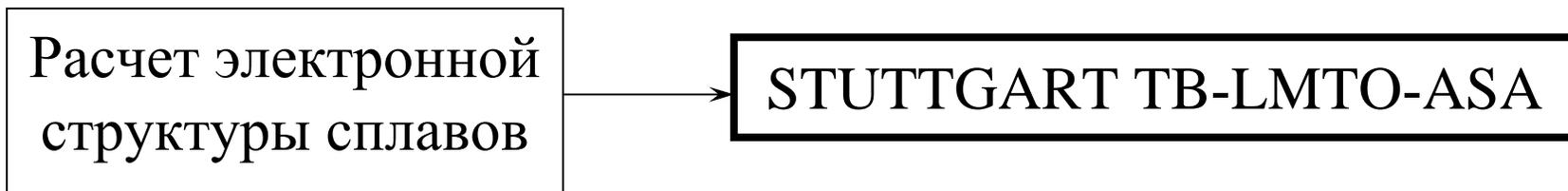
**Использование  
параллельного подхода в  
первопринципных расчетах  
свойств сплавов железа с  
переходными металлами**

М.М. Ялалов, аспирант

А.А. Мирзоев, проф., д.ф.-м.н.

*кафедра ОТФ, ЮУрГУ*

# Введение

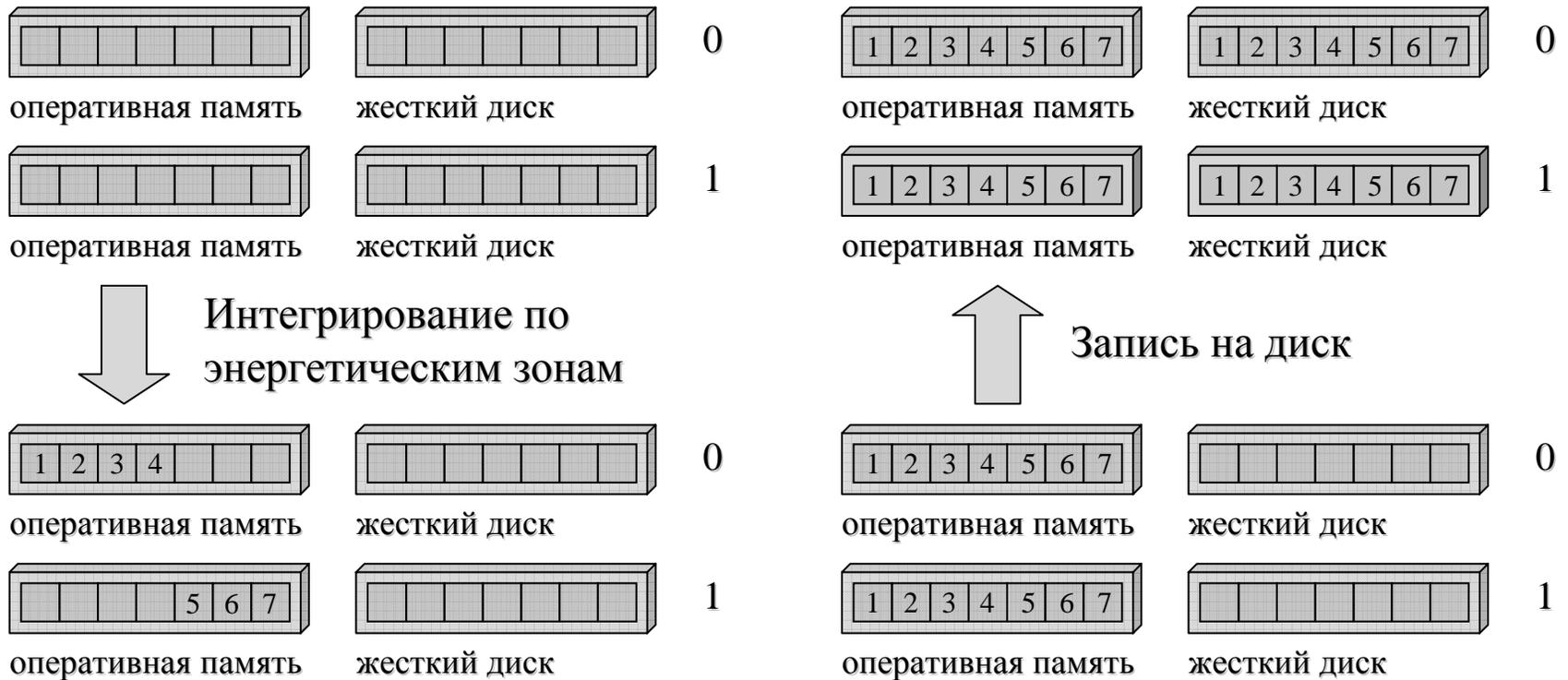


Самая времяемкая процедура

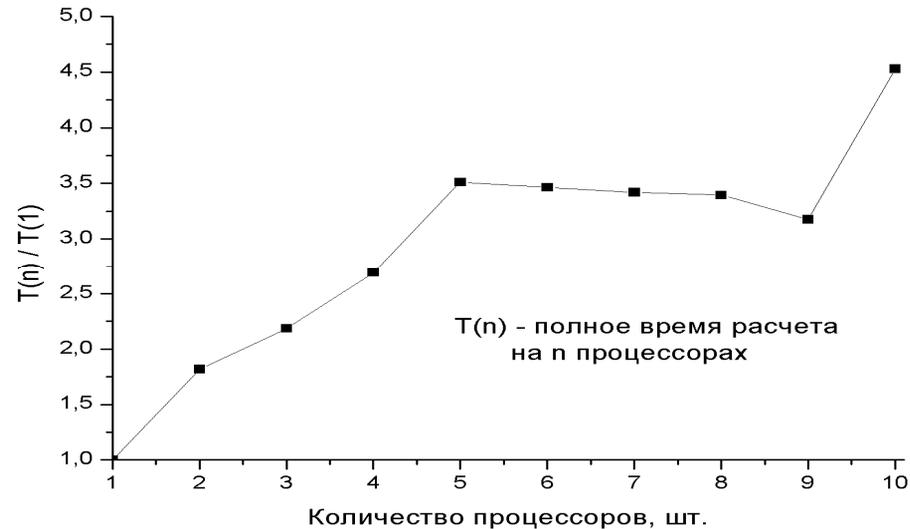
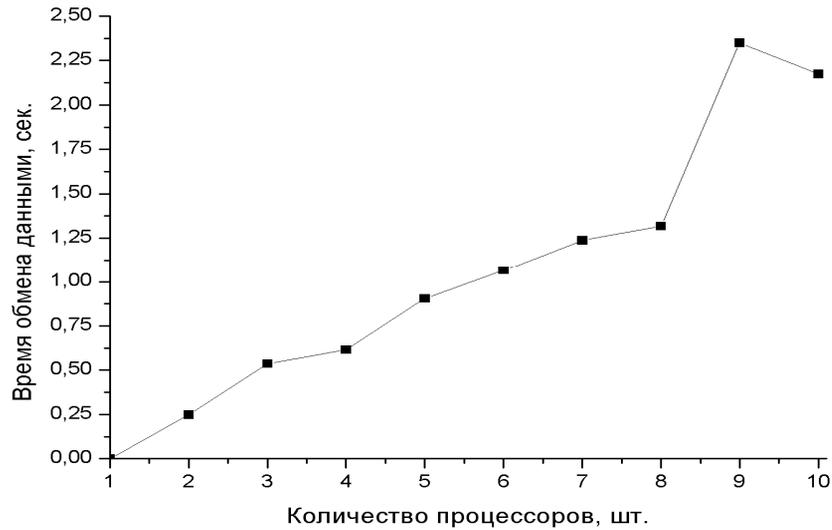
— Интегрирование по энергетическим зонам в обратном пространстве

# Схема обмена данными в условиях достаточного объема оперативной памяти

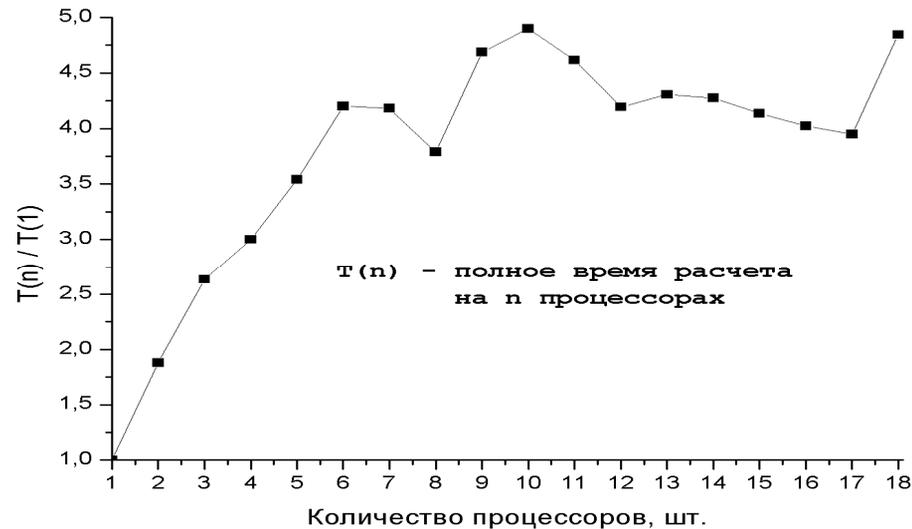
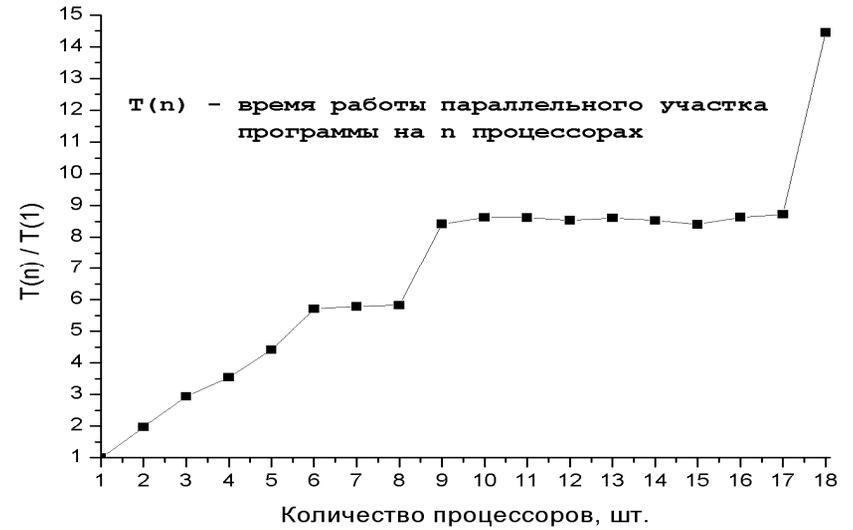
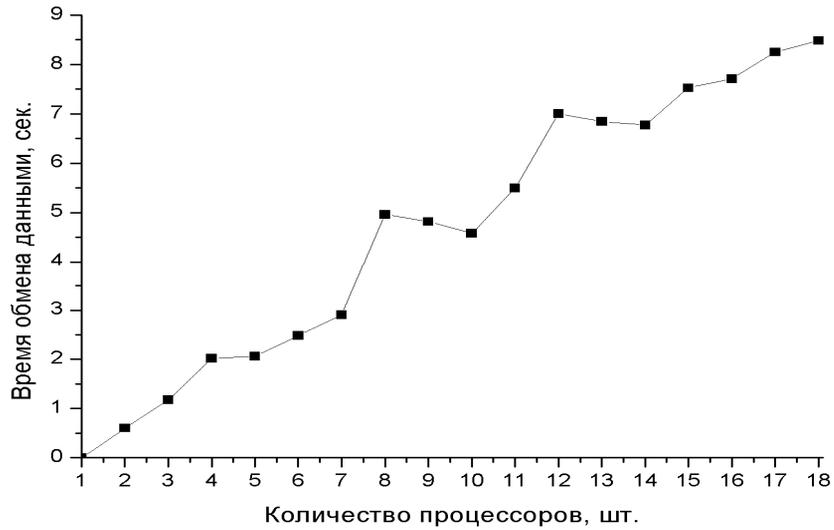
Задача: после работы параллельной части программы на диске должен остаться файл с результатами расчета.



# Результаты для системы с 10 к-точками

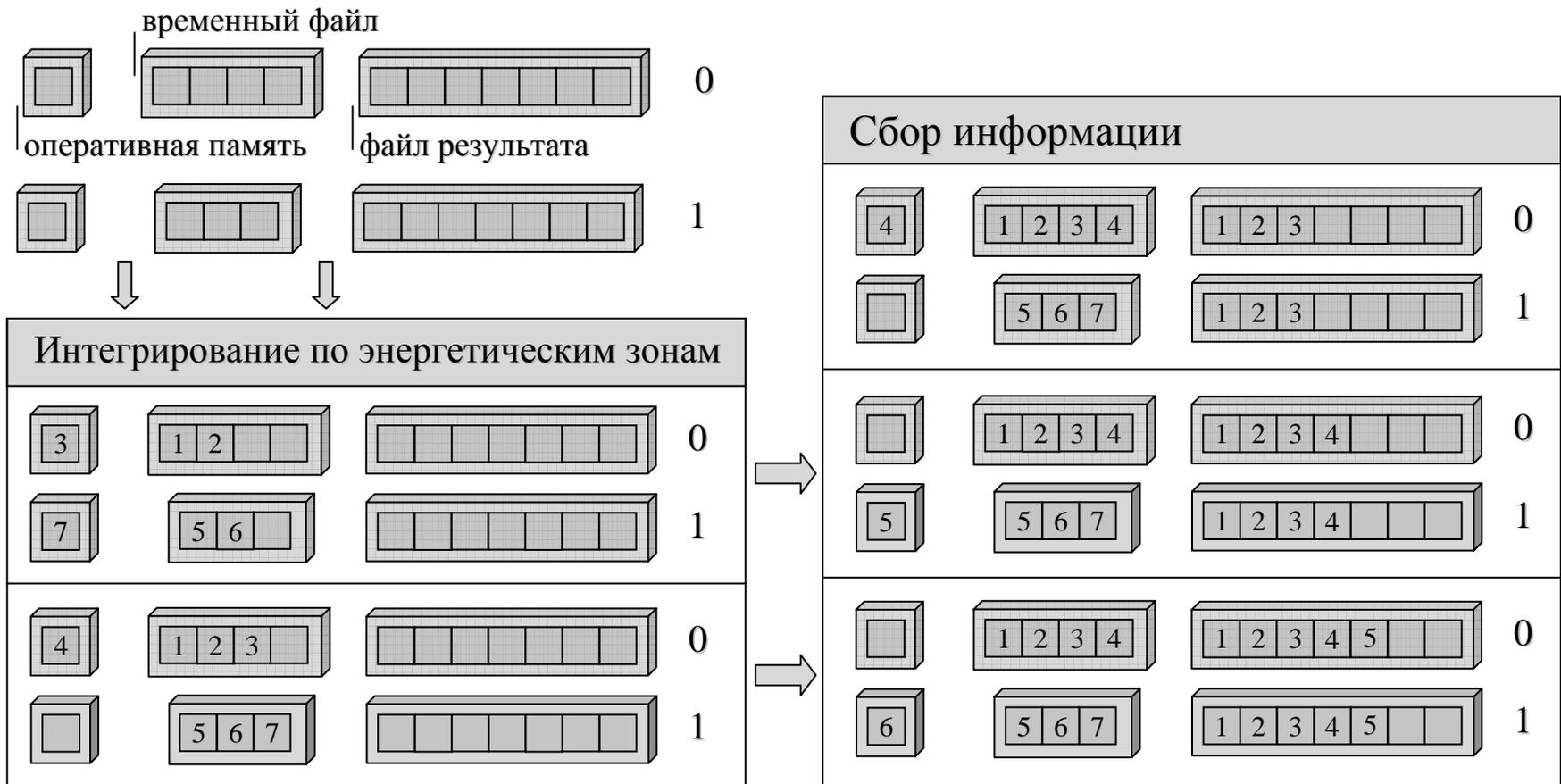


# Результаты для системы с 18 к-точками



# 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.