

**А.В. Мележик**

**Применение параллельного программирования в MPI  
для вычисления матричных элементов некоторых  
операторов в осцилляторном базисе**

При решении квантово-механических задач часто возникает необходимость вычисления большого числа матричных элементов – нефакторизуемых двумерных интегралов. В данной работе для сокращения времени вычисления матричных элементов некоторых операторов в осцилляторном базисе используется параллельное программирование в MPI. Нами разработаны программы Potential\_MPI и Potential\_PC для вычисления на многопроцессорном кластере и на персональном компьютере, соответственно. На модельных примерах показано, что с помощью программы Potential\_MPI можно уменьшить время вычисления матричных элементов более чем на два порядка.