

ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ**(12) ГОСУДАРСТВЕННАЯ РЕГИСТРАЦИЯ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ**

Номер регистрации

(свидетельства):

2015614034Дата регистрации: **03.04.2015**

Номер и дата поступления заявки:

2015610942 17.02.2015Дата публикации: 20.05.2015

Автор:

Стишенко Павел Викторович (RU)

Правообладатель:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Омский государственный технический университет" (RU)

Название программы для ЭВМ:

Wang-Landau method implementation for graph representation of the lattice**Реферат:**

В программе реализован алгоритм Ванга-Ландау для определения плотностей состояний решёточных моделей молекулярных систем для графового представления решёток. Реализована модификация алгоритма, предложенная R. E. Belardinelli и V. D. Pereuga в Phys. Rev. E 75, 046701 (2007) позволяющая избежать систематической ошибки насыщения, присущей оригинальной версии алгоритма. Алгоритм реализован для простого канонического ансамбля, с использованием ряда приёмов, ускоряющих сходимость.

Тип реализующей ЭВМ: IBM PC-совмест. ПК**Язык программирования:** C++**Вид и версия операционной системы:** Linux**Объем программы для ЭВМ:** 10 Кб