

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

Номер регистрации

(свидетельства):

[2015614100](#)Дата регистрации: **06.04.2015**

Номер и дата поступления заявки:

2015611003 19.02.2015Дата публикации: [20.05.2015](#)

Контактные реквизиты:

ipo@omgtu.ru

Автор:

Стишенко Павел Викторович (RU)

Правообладатель:

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

Название программы для ЭВМ:

Реализация генетического алгоритма поиска равновесной формы наночастицы под воздействием адсорбата**Реферат:**

В программе реализован генетический алгоритм поиска равновесной формы наночастицы, находящейся в среде адсорбата. Программа осуществляет поиск такой формы наночастицы, при которой средняя общая энергия системы минимальна. Общая энергия включает в себя внутреннюю энергию частицы и энергию адсорбции молекул адсорбата. Оценка средней энергии осуществляется с помощью алгоритма Метрополиса в рамках простого и большого канонических ансамблей. Процедура оценки энергии может осуществляться параллельно на вычислительных системах с распределенной памятью, объединенных по протоколу MPI.

Тип реализующей ЭВМ: IBM PC-совмест. ПК**Язык программирования:** C++, Python**Вид и версия операционной системы:** Linux**Объем программы для ЭВМ:** 360 Кб