

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

Номер регистрации (свидетельства): 2015614100	Автор: Стишенко Павел Викторович (RU)
Дата регистрации: 06.04.2015	Правообладатель: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Омский государственный технический университет" (RU)
Номер и дата поступления заявки: 2015611003 19.02.2015	
Дата публикации: 20.05.2015	
Контактные реквизиты: ipo@omgtu.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