



ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ
ГОСУДАРСТВЕННАЯ РЕГИСТРАЦИЯ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ

Номер регистрации (свидетельства):

2025615974

Дата регистрации: 12.03.2025

Номер и дата поступления заявки:

2025614083 28.02.2025

Дата публикации и номер бюллетеня:

12.03.2025 Бюл. № 3

Автор(ы):

Куницын Артем Юрьевич (RU),

Кривоцапов Николай Владиславович (RU),

Медведев Михаил Геннадьевич (RU),

Павлов Александр Александрович (RU)

Правообладатель(и):

федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего
образования «Московский государственный
технический университет имени Н.Э. Баумана
(национальный исследовательский
университет)» (RU)

Название программы для ЭВМ:

Программная реализация метода α -REMD для оптимизации начальной структуры полимеров

Реферат:

Программа предназначена для управления программой LAMMPS, позволяющей проводить глобальную оптимизацию исходной структуры вещества. Такой вид оптимизации устраняет любые дефекты в исходной структуре, вызванные невалентными взаимодействиями (пересечения бензольных колец, наложения атомов, аномальные длины связей). Тип ЭВМ: IBM PC-совмест. ПК; ОС: Windows 10, Ubuntu 18.

Язык программирования: Python 3

Объем программы для ЭВМ: 800 КБ