

数学与系统科学研究院

计算数学所学术报告

报告人: 袁文燕

(北京化工大学数学系)

报告题目:

求解金属团簇最优构型的全局
优化算法

邀请人: 戴彧虹 研究员

报告时间: 2016年4月22日(周五)

下午 15:00-16:00

报告地点: 数学院南楼九层

902 会议室

摘要:

新型纳米催化剂的制备是化工中的一个重要研究领域，这其中的一个关键环节是如何得到金属团簇的最优构型。全局优化算法是求解金属团簇最优构型的有效方法之一。由于团簇势能曲面的局部极小值点非常多，并且随着原子数目的增加呈指数增长，此问题是 NP 难问题。目前已有的算法包括了遗传算法、basin-hopping 算法、粒子群算法、进化算法、免疫算法等等。在现有工作基础上，我们提出了一种改进的粒子群算法，算法在小规模问题上已有不错的数值结果。

欢迎大家参加！