

<<应用化学图论>>

图书基本信息

书名：<<应用化学图论>>

13位ISBN编号：9787030079145

10位ISBN编号：7030079140

出版时间：2000-06

出版时间：科学出版社

作者：许禄

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

## <<应用化学图论>>

### 内容概要

本书为《计算机化学化工丛书》之一。

本书强调化学图论的实用性，尽可能对介绍的方法给出实例，同时以不同形式给出它们的可运行程序和源程序。

前三章简要介绍图论的基本概念、结构编码和拓扑指数；第四章和第五章介绍惟一性连接表及拓扑等价性算法，并详细介绍结构产生器；后三章用较大篇幅介绍了结构-性质相关性研究的成果，主要讨论化合物结构图特征的提取及压缩和构效关系，介绍分子形状的2D和3D表征方法，并给

<<应用化学图论>>

书籍目录

《计算机化学化工丛书》序

前言

第一章 图论的基本概念

1?1 图的定义

1?2 邻接及关联

1?3 图的同构

1?4 步程、行迹、路径、距离及价

1?5 子图

1?6 正规图

1?7 树

1?8 平面图

1?9 化学图

1?10 图论矩阵

参考文献

第二章 结构编码

2?1 引言

2?2 结构编码

2?2?1 线性编码

2?2?2 邻接矩阵及二维连接表

2?

<<应用化学图论>>

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>