第一图书网, tushu007.com

<<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

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

第一图书网, tushu007.com

<<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?

第一图书网, tushu007.com

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