

АЛГОРИТМЫ РАСЧЕТА ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИНДЕКСОВ СВЯЗАННОСТИ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ КОРРЕЛЯЦИИ «СТРУКТУРА-СВОЙСТВО».

Соловьев П.В.

Московский государственный университет печати
Факультет полиграфической техники и технологии, кафедра физики, кафедра
информационных технологий
Россия, 127550, г. Москва, ул.Прянишникова, 2а, тел.(495)976-39-87, (495)976-31-53

Обсуждается топологический метод, который используется при моделировании корреляции «структура-свойство» ряда полимеров. Приводятся схемы расчетов индексов первого и второго порядка для монофторэтилена. Рассмотрено применение индексов связанности для расчета свойств полимерных соединений, содержащих произвольное число атомов.

Используется вычислительная прогнозирующая вычислительная схема для ряда виниловых полимеров.