

计算机自动识别拓扑等价性方法研究

胡昌玉, 许禄

中国科学院长春应用化学研究所; 中国科学院应用谱学开放实验室

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文介绍了一个计算机自动识别有机化合物结构图中原子的拓扑等价性的新方法, 该方法引入了路径指数和环指数等新的图的不变量以表征节点的拓扑环境, 由此正确地且高效地进行原子的等价类划分。

关键词 [拓扑](#) [计算机识别](#) [路径指数](#) [环指数](#)

分类号 [064](#)

Study on computer perception of topological symmetry

HU CHANGYU, XU LU

Abstract A new algorithm for computer perception of topological symmetry is proposed. A node library containing various kinds of nodes is built, and the index number of the library is used as initial atom class identifier (CI) to discriminate the different types of non-hydrogen atoms. The path index (PI) and ringindex (RI) are calculated from the CI, and the global topological environment is defined as the sum of PIs and RIs. The topological symmetry can be detected by the iterative calculation of the global topological environment.

Key words [TOPOLOGY](#) [COMPUTER RECOGNITION](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(435KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中包含“拓扑”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [胡昌玉](#)

· [许禄](#)