



ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ
ГОСУДАРСТВЕННАЯ РЕГИСТРАЦИЯ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ

Номер регистрации (свидетельства):
2024614248

Дата регистрации: 21.02.2024

Номер и дата поступления заявки:
2024612508 08.02.2024

Дата публикации и номер бюллетеня:
21.02.2024 Бюл. № 3

Автор(ы):

Павлов Александр Александрович (RU),

Бородулин Алексей Сергеевич (RU),

Кольцов Александр Юрьевич (RU),

Злобин Иван Сергеевич (RU),

Торопцев Никита Сергеевич (RU)

Правообладатель(и):

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего
образования «Московский государственный
технический университет имени Н.Э. Баумана
(Национальный исследовательский
университет)» (МГТУ им. Н.Э. Баумана) (RU)

Название программы для ЭВМ:

МОДУЛЬ ПРЕДСКАЗАНИЯ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРОВ

Реферат:

Программа применяется для решения задачи прогнозирования теплофизических свойств (плотность, температура стеклования) по структуре полимеров. В программную систему включен алгоритм преобразования универсальной химической кодировки SMILES-полимера в вид числовых массивов, отображающих химические соответствия, и предикативная модель, осуществляющая регрессию выбранных свойств при помощи машинного обучения. Также возможно уточнение прогнозов предикативной модели при дополнении входных данных иными физическими свойствами, известными для рассматриваемой структуры полимера. Программа представляет собой веб-приложение с графическим интерфейсом, позволяющим отобразить свойства, предсказанные для введенной пользователем структуры, и поддерживающая дополнение структурной информации известными для соединения иными физическими параметрами. Тип ЭВМ: IBM PC-совмест. ПК; ОС: Windows 10.

Язык программирования: Python

Объем программы для ЭВМ: 438 КБ