



ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА  
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ  
ГОСУДАРСТВЕННАЯ РЕГИСТРАЦИЯ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ

Номер регистрации (свидетельства):  
2025688489

Дата регистрации: 21.10.2025

Номер и дата поступления заявки:  
2025687173 09.10.2025

Дата публикации и номер бюллетеня:  
21.10.2025 Бюл. № 11

Автор(ы):

Аверочкин Глеб Михайлович (RU),

Меликянц Давид Георгиевич (RU)

Правообладатель(и):

федеральное государственное автономное

образовательное учреждение высшего

образования «Московский государственный

технический университет имени Н.Э. Баумана

(национальный исследовательский

университет)» (RU)

Название программы для ЭВМ:

Модуль расчета дескрипторов мономера и предсказания свойств полимера

Реферат:

Программный комплекс реализует методы численного представления структуры мономеров и предсказания свойств полимеров с использованием алгоритмов машинного обучения. Функционал включает автоматизированный расчёт дескрипторов, основанных на топологии, геометрии и квантово-химических параметрах, а также построение интерпретируемых моделей для прогнозирования макроскопических свойств, таких как температура стеклования и плотность. Программный комплекс ориентирован на поддержку научных исследований и ускорение разработки новых полимерных материалов. Тип ЭВМ: IBM PC - совмест. ПК; ОС: Windows 10, Ubuntu 18.

Язык программирования:

Python

Объем программы для ЭВМ:

18 КБ