名词解释

分子连接拓扑指数

分子距离矩阵

分子邻接矩阵

Adjacency Matrix

MORGAN 算法。其论文在下面： The Generation of a Unique Machine Description for Chemical Structures—A Technique Developed at Chemical Abstracts Service

depth-first 树（ DFS）

smiles 变为 分子邻接矩阵 然后用图论的算法画出分子结构图

那么如何用分子邻接矩阵变为smiles呢？

树形结构，插入

分子格式文件