

《化学信息学》

图书基本信息

书名：《化学信息学》

13位ISBN编号：9787122112033

10位ISBN编号：7122112039

出版时间：2011-6

出版社：化学工业出版社

页数：186

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介以及在线试读，请支持正版图书。

更多资源请访问：www.tushu000.com

《化学信息学》

内容概要

《化学信息学》为普通高等教育“十一五”国家级规划教材，是教育部“使用信息技术工具改造课程”项目的研究成果。1~4章讲述了化学信息的来源，包括手册、书籍、搜索引擎以及目前广为使用的期刊文献数据库；第5~7章介绍了化学信息的处理工具（即化学软件）、处理方法（相关化学计量学算法）以及定量构效关系（QSAR）的原理及应用；第8章对生物信息学领域的研究进行了概述。

《化学信息学》可作为高等院校化学化工专业本科“化学信息学”课程的入门教材，另外，书中提供了大量与信息学相关的网址，也可作为研究生的参考书籍。

书籍目录

第1章 概述 1.1 什么是化学信息 1.2 化学信息的诞生背景 1.3 信息科学在化学领域的应用 1.4 化学信息的结构和特点 1.5 化学信息的工作方式 1.6 信息采集接口 1.7 化学信息的应用 1.7.1 绘制结构 1.7.2 数据库 1.7.3 计算机辅助设计反应预测系统 1.7.4 预测结构与活性的关系 1.8 展望 第2章 化学信息来源 2.1 词典 2.2 手册 2.3 化学期刊 2.3.1 综合类期刊 2.3.2 有机化学期刊 2.3.3 分析化学期刊 2.3.4 无机化学期刊 2.3.5 物理化学期刊 2.4 图书馆资源 2.4.1 生命科学图书馆 2.4.2 中国科学院大连化学物理研究所图书馆 2.4.3 中国科学院国家科学图书馆 2.4.4 国家科技图书文献中心化工分中心 2.4.5 清华大学图书馆 2.4.6 中国国家图书馆 2.4.7 哈佛大学图书馆 2.4.8 斯坦福大学图书馆 2.5 化学化工信息资源导航系统 2.5.1 ChIN 2.5.2 Computer Aided Chemistry Tutorial 2.5.3 Wilton High School Chemistry 2.5.4 化学家链接网站 第3章 化学信息数据库资源 3.1 数据库简介 3.1.1 数据 3.1.2 数据库 3.1.3 数据库管理系统 3.1.4 数据库系统 3.2 数据库历史及分类 3.2.1 数据库历史 3.2.2 数据库的模型分类 3.3 三类化学信息数据库 3.3.1 文献数据库 3.3.2 事实数据库 3.3.3 结构数据库 3.4 互联网上的化学化工数据库 3.4.1 CA 3.4.2 ISI数据库 3.4.3 OCLC数据库 3.4.4 CSA 3.4.5 ScienceDirect 3.4.6 CNKI 3.4.7 万方数据库 3.4.8 维普中文科技期刊数据库 3.4.9 EI 3.4.10 出专利数据库 3.4.11 Reaxys数据库 3.4.12 谱图数据库 第4章 信息搜索引擎 4.1 概述 4.1.1 搜索引擎的原理 4.1.2 搜索引擎的历史及发展趋势 4.2 搜索引擎的定义及分类 4.2.1 全文搜索引擎 4.2.2 目录索引类搜索引擎 4.2.3 元搜索引擎 4.2.4 垂直搜索引擎 4.3 搜索引擎查询方法 4.3.1 模糊查询 4.3.2 精确查询 4.3.3 逻辑查询 4.3.4 指定范围查询 4.4 常用搜索引擎 4.4.1 百度 4.4.2 Google中国 4.4.3 维基百科 4.4.4 BASE 4.4.5 Vascoda 4.4.6 Information Bridge 4.4.7 Intute 4.4.8 Infomine 4.5 元搜索引擎 4.5.1 Dogpile 4.5.2 Excite 4.5.3 Ixquick 4.5.4 Mamma 4.5.5 Metacrawler 4.5.6 ProFusion 4.5.7 Savvysearch 4.6 专业搜索引擎 4.6.1 专业搜索引擎的优势 4.6.2 著名的专业搜索引擎 第5章 化学软件 5.1 概述 5.2 化学软件的分类型 5.3 语言软件和依托算法的化学计算软件 5.3.1 MATLAB 5.3.2 R语言 5.4 绘图软件 5.4.1 ACD/ChemSketch5.0 5.4.2 Symyx Draw 5.4.3 ChemBioDraw 5.5 化学分析仪器数据处理软件 5.5.1 GRAMS 5.5.2 MestReNova 5.5.3 Origin 5.6 分子模拟软件 5.6.1 Gaussian软件 5.6.2 Amber软件 第6章 信息处理与数据挖掘 6.1 概述 6.2 数据的标准化 6.3 特征提取与优化 6.3.1 主成分分析 6.3.2 偏最小二乘法 6.3.3 逐步回归分析 6.3.4 遗传算法 6.4 信号处理方法 6.4.1 协方差与相关系数 6.4.2 自、互相关分析 6.4.3 功率谱密度 6.4.4 傅里叶变换 6.4.5 小波变换 6.5 机器学习方法 6.5.1 K最近邻法 6.5.2 概率神经网络 6.5.3 分类回归树 6.5.4 助推法 6.5.5 人工神经网络 6.5.6 支持向量机 6.6 数据库挖掘技术 6.6.1 聚类算法 6.6.2 决策树算法 6.7 Web数据挖掘技术 6.7.1 web内容挖掘 6.7.2 web结构挖掘 6.7.3 web日志挖掘 第7章 QSAR及药物设计 7.1 概述 7.2 QSAR模型的分类 7.2.1 二维定量构效关系 7.2.2 三维定量构效关系 7.2.3 多维定量构效关系 7.2.4 方法评价 7.3 定量构效关系研究中常用的回归分析法 7.3.1 多元线性回归 7.3.2 主成分回归 7.3.3 偏最小二乘回归 7.3.4 投影寻踪回归 7.3.5 非线性方法 7.4 药物设计 7.5 QSAR方法的应用 第8章 生物信息学 8.1 什么是生物信息学 8.2 生物信息学的发展历程 8.3 生物信息学的研究内容 8.3.1 生物信息挖掘 8.3.2 药物设计 8.3.3 基因组学 8.3.4 蛋白质组学 8.4 生物信息学的研究方法 8.5 生物信息学的应用 8.6 生物信息学的研究趋势 8.7 蛋白质功能研究 8.8 蛋白质数据库简介 8.8.1 综合性蛋白质数据库 8.8.2 专用性蛋白质数据库 8.9 蛋白质序列的特征提取方法 8.9.1 基于氨基酸组成和位置的特征提取方法 8.9.2 基于氨基酸物理化学特性的特征提取方法 8.9.3 基于数据库信息挖掘的特征提取方法 8.10 蛋白质相互作用 8.11 蛋白质网络 参考文献

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：www.tushu000.com