

<<化学信息学导论>>

图书基本信息

书名：<<化学信息学导论>>

13位ISBN编号：9787040093315

10位ISBN编号：7040093316

出版时间：2001-7

出版时间：高等教育出版社

作者：缪强 著

页数：214

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：<http://www.tushu007.com>

<<化学信息学导论>>

前言

化学是一门古老的科学，在漫长的发展进程中，积累了大量的文献。随着以计算机与网络为标志的现代信息技术的迅速发展，化学信息的数量日趋增加，形式也呈现多样化。

Internet是当今世界上最大的信息传播媒介，它把世界的各个大学、机构和研究室联系在一起，把学习者、教育者、研究人员联系在一起，共享各种信息资源。

World wide Web极大地影响着化学信息学的形成和以后的发展。

在线文献检索、在线数据库检索、在线交流、网络远程教学和远程计算都已经成为现实。

化学信息学(Chemical Informatics)是以化学、化工、计算机与信息技术为基础的一门新兴边缘学科，包括：化学、化工文献学；化学知识体系的计算机表示、管理与网络传输；化学图形学；化学信息的解析与数据挖掘处理；化学知识的计算机推演；化学教育与教学的现代技术与远程信息资源。

近年来，化学信息科学在许多方面都取得了很大的进展：(1)化学结构的计算机编码和图形检索方法的发展使传统的文献信息产品实现电子化、网络化；(2)化学计量学中的多元统计分析、人工神经网络、遗传算法、小波分析等先进的数据挖掘技术在化学的许多领域都有成功的应用；(3)根据已有知识和定理通过计算机推演、大规模计算预测与模拟可以得到物质的物理和化学性质，化工仿真也取得了很大成功；(4)可视化和虚拟技术影响着化学、化工信息产品的发展，其中有些软件在Internet：上可以免费得到。

信息技术是现代社会生活的重要支柱。

培养大学生的信息意识和获取、利用信息的能力，在世界各国的高等教育中都占有重要的地位。

美国化学会化学信息分会和图书馆协会在Indiana大学成立了化学信息教学资料交换中心CCIIM(the Clearinghouse for Chemical Information Instructional Materials)，负责收集、发布和分发化学信息源。

美国、欧洲、澳大利亚的很多大学开设了化学信息学类的课程，美国Indiana大学已经有超过40人获得了化学信息学硕士学位。

我国教育部理科化学教学指导委员会也把“化学信息学”列入了1998年10月制定的化学专业和应用化学专业化学教学基本内容中。

近年来，我国不少高校陆续开设了文献检索与利用、计算机化学，受到学生们的普遍欢迎，取得了良好的效果。

但是，在Internet“信息高速公路”成为最大的信息媒体的今天，这些课程对化学信息学整体的介绍，尤其是在网络应用方面的介绍还远远不够。

<<化学信息学导论>>

内容概要

《化学信息学导论》是教育部“高等教育面向21世纪教学内容和课程体系改革计划”的研究成果，是面向21世纪课程教材。

全书共分三部分。

第一部分是化学、化工信息资源的检索与利用；第二部分介绍化学数据信息的处理方法；第三部分是化学知识的计算机推演和计算机实验方法。

《化学信息学导论》可作为高等院校化学化工专业的“化学信息学”课程的入门教材。

书中附有一些软件的应用说明、示例、重要的科学与技术信息源和化学、化工网站地址，因而也可以作为相关领域科研工作人员的参考书和应用工具书。

<<化学信息学导论>>

书籍目录

第一章 化学信息学与Internet第一节 化学信息的构成及化学信息学第二节 因特网(Internet)概述第二章 化学化工网站与网上数据库第一节 通用信息检索引擎第二节 重要的化学化工综合网站第三节 网上化学结构数据库、反应数据库和物性数据库第四节 网上化学化工分类信息与信息资源附1. IUPAC专业分会与组织附2. 美国化学会(1attp: // www . ACS . org)附3. 网上化学信息资源第三章 化学化工文献检索第一节 文献概述第二节 美国《化学文摘》(印刷出版物)第三节 CA索引和手工检索方法第四节 CAS的电子出版物第五节 CAonCD的使用方法第六节 美国科学信息研究所ISI和《科学引文索引》SCI简介第七节 其他文献数据库附1. CA主题分类第四章 网上专利检索第一节 中国专利文摘数据库第二节 北京市经济信息中心的中国专利页第三节 美国专利数据库第四节 其他专利数据库与知识产权保护组织第五章 化学实验数据统计与谱分析第一节 实验数据的统计分布第二节 分布的数字特征计算第三节 化学分析的采样第四节 比较实验第五节 回归分析第六节 数据的最小二乘平滑处理第七节 曲线拟合和谱峰分辨第八节 谱的微分与积分第六章 科学数据处理与绘图工具软件origin第一节 Origin的窗口组成第二节 数据的输入、编辑和保存第三节 数据的统计处理第四节 数据关系的图形表示第五节 谱与曲线的处理第七章 化学中的多元分析方法第一节 化学与多元分析第二节 相关分析与变量分组第三节 降维、信息压缩与显示技术第四节 分类与判别第五节 聚类分析第六节 因子分析第七节 其他的信息挖掘技术第八章 化学结构的表示与可视化第一节 分子拓扑结构的矩阵表示与矩阵指数第二节 分子拓扑结构的线性标记方法第三节 有机分子结构式绘图软件ChemWindow第四节 分子几何结构的表示第五节 三维分子结构显示软件WeblabViewerPro第九章 分子结构信息与分子设计第一节 分子及其聚集体的计算与模拟方法评述第二节 定量构效关系方法第三节 分子设计中的重要参数第四节 分子计算与模拟软件举例第五节 分子建模与分析软件HyperChem功能简介第六节 分子与材料设计简介第十章 化工过程计算与仿真第一节 物性估算第二节 化工仿真软件PrSim简介

章节摘录

Inter-net检索工具一般具备以下功能：首先有一个简单易用、功能强大的前端界面，使得查询方式容易设定；检索方式比较完备，可以按用户所需的方式进行查询；检索结果具有较好的准确性和可读性，且检索速度较快。

网络检索工具大都采用Server / Client结构和交互式的Windows前端界面，检索途径多，可使用“书签簿”保留检索历史，在检索窗口中按一定规则输入检索式，发出检索命令后即可得到检索结果。检索结果通常包括题目、内容简介、URL地址等，由此可进行更进一步的检索，获得更详细的内容。由于检索引擎能够帮助用户在比较少的时间里方便地找到所需要的信息资料，因而成为用户上网的基本辅助工具。

WWW是Internet上最先进的网络信息检索系统，它把超文本技术、网络技术和多媒体技术融为一体，并把Internet上的信息按一定的规则组织起来，以提供进一步的查询。

从1994年Yahoo问世以来，已经开发出许多WWW检索引擎，有记录可查的检索引擎数量就达到2 500个左右。

其中既有大型综合型的通用信息检索引擎，也有在特定领域里发挥作用的专业检索引擎。

检索引擎的功能也有不少发展，第一代检索引擎是根据关键词在主页中的位置和出现频率来计分和排序，而第二代检索引擎以用户访问该网站时所花费的时间来确定它的人气指数，或者根据该网站被其他网站链接数量来确定它的等级，并向用户返送这些信息。

<<化学信息学导论>>

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:<http://www.tushu007.com>