

<<21世纪计算机化学丛书>>

图书基本信息

书名：<<21世纪计算机化学丛书>>

13位ISBN编号：9787122112873

10位ISBN编号：712211287X

出版时间：2011-8

出版时间：化学工业出版社

作者：乔园园

页数：233

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>

前言

化学作为中心科学，研究内涵越来越丰富，应用也越来越深入。

同时，信息技术的快速发展，更促使化学信息系统的开发技术不断更新。

伴随这个进程，化学信息也被赋予了太多的含义，使得化学信息系统不得不覆盖众多的领域，数据类型、表现方式也多种多样，粗略看来，就有以下特征。

(1) 类型广泛既有文献、数据，又有图形、图像（如图谱、分子结构、电子云、反应式等）。

(2) 处理多样既有计量学处理（投影、降维、傅里叶变换），又有信息学处理（分子结构的匹配、结构描述参数及相似性计算），还有能量计算、结构优化等。

(3) 界面特殊除了一般的文本、超文本，还需处理图谱、分子结构式、化学反应式的输入输出等。

(4) 功能复杂文献检索、数据查询、图谱或结构匹配、在线计算等。

(5) 应用广泛搜索引擎、信息管理、检索服务。

化学信息系统可以概括为“以化学数据库和化学在线计算为核心的网络服务系统”，因此，相应的设计、开发工作需要综合运用多方面的知识和技术。

一个化工厂的信息管理系统，通常只需按常规的网站来设置，即使需要处理若干种分子结构或者图谱，也完全可以用图片来处理。

再比如，谷歌或百度这样的搜索引擎，并不能接受用户输入的二维或三维分子结构来进行检索。

因此，化学信息系统所需要的很多功能，是传统的信息系统无法实现的，而必须开发底层的、有针对性的算法或模块。

书名含有“化学信息”的著作，大致有两类：一类是化学文献、情报检索，而近年来则转向介绍化学相关网站、数据库的服务内容、使用方法等，如李晓霞的《Internet上的化学化工资源》；另一类是化学信息学，内容主要是研究如何通过分子的图谱数据、拓扑特征和量化参数等研究其物理化学性质或者生物活性，如德国J Gasteiger主编的《Chemoinformatics: A Textbook》。

本书或许可以算是第三类，即以化学信息的共享为目标，介绍化学信息系统的开发技术。

本书概要介绍了信息的基本知识，阐述了信息开放共享的重要性。

针对化学信息的特点，选择不同类型的化学信息系统实例，讲述其系统设计思路和开发方法。

对实际研发有重要的指导作用，适合计算机与化学领域的科研、教学参考。

不过，书中既没有什么秘诀能让读者快速掌握某种信息开发技术，也不可能面面俱到地评述所有的信息共享模式；所能做的，是尽量帮助读者追溯化学对象的设计思想，分析信息系统的构成框架，从而避开花样繁多的开发语言、设计模式的困扰，练习从比较底层的角度来观察和理解一个个看似纷繁、实则有序的化学信息系统。

希望读者今后面对自己的实际需求时，在设计理念和开发技术方面，能做出与时俱进的合理选择，创造出更多的专门适应化学研究需要的模式和技巧。

本书所讲解的化学信息的数据结构、算法和开发实例，大都源自本实验室的研究工作，部分参考了国内外的报道。

南开大学刘冲、张树众老师为本书部分章节提供了重要的参考资料，并对部分文字进行了核校。

在此，笔者对从事化学信息系统开发的各位同行表示感谢。

笔者学浅，难免疏漏，不妥之处，还望海涵。

乔园园2011年5月于天津南开大学

内容概要

化学信息系统即“以化学数据库和化学在线计算为核心的网络服务系统”。化学信息的数据类型、表现方式多种多样，既有文献、数据，又有图形、图像。在用户界面方面，则需处理图谱、分子结构式和化学反应式等。因此，相应的设计、开发工作需要综合运用多方面的知识和技术。本书简要介绍了信息的基本知识，阐述了信息的重要性。围绕化学信息对象，介绍了数据结构与算法，分析了系统架构模式；针对化学信息的特点，选择不同类型的化学信息系统实例讲述了其系统设计思路 and 开发方法，对实际研发有重要的指导作用。

本书适合化学、化工、生物化学、药物化学以及相关专业的科技人员、高校师生参考。

<<21世纪计算机化学丛书>>

书籍目录

- 1 概述
 - 1.1 信息系统概述
 - 1.2 化学信息系统概况
 - 1.2.1 化学信息系统的主要类型
 - 1.2.2 用户界面
- 2 化学信息的开放
 - 2.1 信息系统的开放
 - 2.1.1 信息的保护与开放
 - 2.1.2 期刊文献数据库的开放机制
 - 2.1.3 开源软件的开放机制
 - 2.1.4 生物信息学的发展
 - 2.2 化学信息的开放发展
 - 2.2.1 数据文件格式
 - 2.2.2 软件与编程语言
 - 2.2.3 新的环境与平台
- 3 信息系统设计基础
 - 3.1 网络应用发展历程
 - 3.1.1 从远程网到因特网
 - 3.1.2 从桌面应用程序到网络应用程序
 - 3.1.3 从远程登录到C/S和B/S模式
 - 3.1.4 从文件服务器到数据库服务器
 - 3.1.5 从分布式到网格和云
 - 3.2 网络运行环境
 - 3.2.1 网络通信协议
 - 3.2.2 服务器的软件环境
 - 3.2.3 客户端的软件环境
 - 3.3 软件开发技术
 - 3.3.1 开源软件开发技术
 - 3.3.2 开源软件标准化
 - 3.3.3 网络应用程序的开发
 - 3.4 内容管理系统
 - 3.4.1 角色划分
 - 3.4.2 功能类型
 - 3.4.3 设计模式
 - 3.4.4 开源选择
 - 3.4.5 应用需求与发展
- 4 化学信息数据的结构与算法
 - 4.1 化学图谱
 - 4.1.1 图谱文件与数据库
 - 4.1.2 图谱检索算法
 - 4.2 分子结构
 - 4.2.1 分子拓扑结构的表达
 - 4.2.2 分子结构的检索与匹配
 - 4.3 化学反应
 - 4.3.1 化学反应的表达

<<21世纪计算机化学丛书>>

- 4.3.2反应物与产物的关系
 - 4.4南开软件开发包
 - 4.4.1图谱通用数据处理开发包
 - 4.4.2有机分子拓扑结构开发包
 - 5 化学信息系统的开发实例
 - 5.1化学信息导航系统
 - 5.1.1设计与开发路线
 - 5.1.2系统构成与功能
 - 5.1.3Mashup开发模式
 - 5.2核磁共振谱仪管理系统
 - 5.2.1功能设计
 - 5.2.2开发技术
 - 5.2.3其他配套措施
 - 5.3有机结构与反应查询系统
 - 5.3.1功能分析
 - 5.3.2开发技术
 - 5.3.3计算机辅助有机合成
 - 5.4虚拟组合分子库系统
 - 5.4.1衍生策略
 - 5.4.2机制与流程
 - 5.4.3开发技术
 - 5.4.4商业软件
 - 5.5其他化学信息系统
 - 6 新技术与应用的展望
 - 6.1复杂信息协议
 - 6.2富应用程序
 - 6.3从软件到服务
- 参考文献

编辑推荐

这本《化学信息系统开发技术(精)》由乔园园所著，概要介绍了信息的基本知识，阐述了信息开放共享的重要性。

针对化学信息的特点，选择不同类型的化学信息系统实例，讲述其系统设计思路 and 开发方法。

对实际研发有重要的指导作用，适合计算机与化学领域的科研、教学参考。

不过，书中既没有什么秘诀能让读者快速掌握某种信息开发技术，也不可能面面俱到地评述所有的信息共享模式；所能做的，是尽量帮助读者追溯化学对象的设计思想，分析信息系统的构成框架，从而避开花样繁多的开发语言、设计模式的困扰，练习从比较底层的角度来观察和理解一个个看似纷繁、实则有序的化学信息系统。

希望读者今后面对自己的实际需求时，在设计理念和开发技术方面，能做出与时俱进的合理选择，创造出更多的专门适应化学研究需要的模式和技巧。

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>