

Уважаемые авторы и читатели ЖСХ, предлагаем Вашему вниманию

Введение в хемоинформатику: учебное пособие в 4-х частях.
Баскин И.И., Маджидов Т.И., Варнек А.А. Казань: Изд-во Казанского университета, 2016 г., Тираж 150 экз., ISBN 978-5-00019-694-6

1. Компьютерное представление химических структур, ISBN 978-5-00019-131-6, 2013 г., 174 стр. — определяет предмет и задачи хемоинформатики, а также дает подробную информацию о различных способах представления химических объектов в виде молекулярных графов, наборов дескрипторов и битовых строк.

2. Химические базы данных, ISBN 978-5-00019-429-4, 2015 г., 188 стр. — даны основные сведения о принципах функционирования химических баз данных. Приведено подробное описание наиболее популярных баз данных, используемых в химии и дизайне лекарств. Отдельная глава посвящена основам теории графов.

3. Моделирование "структура – свойство", ISBN 978-5-00019-442-3, 2015 г., 304 стр. — рассмотрены разные этапы построения моделей "структура – свойство": расчет молекулярных дескрипторов, использование методов машинного обучения для построения регрессионных и классификационных моделей. Приведено описание наиболее распространенных типов дескрипторов.

4. Методы машинного обучения, ISBN 978-5-00019-695-3, 2016 г., 330 стр. — рассмотрены различные вопросы машинного обучения и его использование в хемоинформатике. Подробно излагаются основы теории машинного обучения, а также приводится описание наиболее распространенных в этой области математических методов.

Учебное пособие предназначено для студентов бакалавриата и магистратуры, получающих образование в области хемоинформатики и молекулярного моделирования.



Четырехтомник можно приобрести только по предоплате, оформив заявку в интернет-магазине на сайте Издательства Сибирского отделения РАН <http://market.sibran.ru/catalog/CBE/169228/>

Другие научные издания можно приобрести:

- в интернет-магазине ФГУП «Издательство СО РАН»: <http://www.sibran.ru>
- обратившись по электронной почте: sale@sibran.ru
- тел./факс (383)330-17-58.