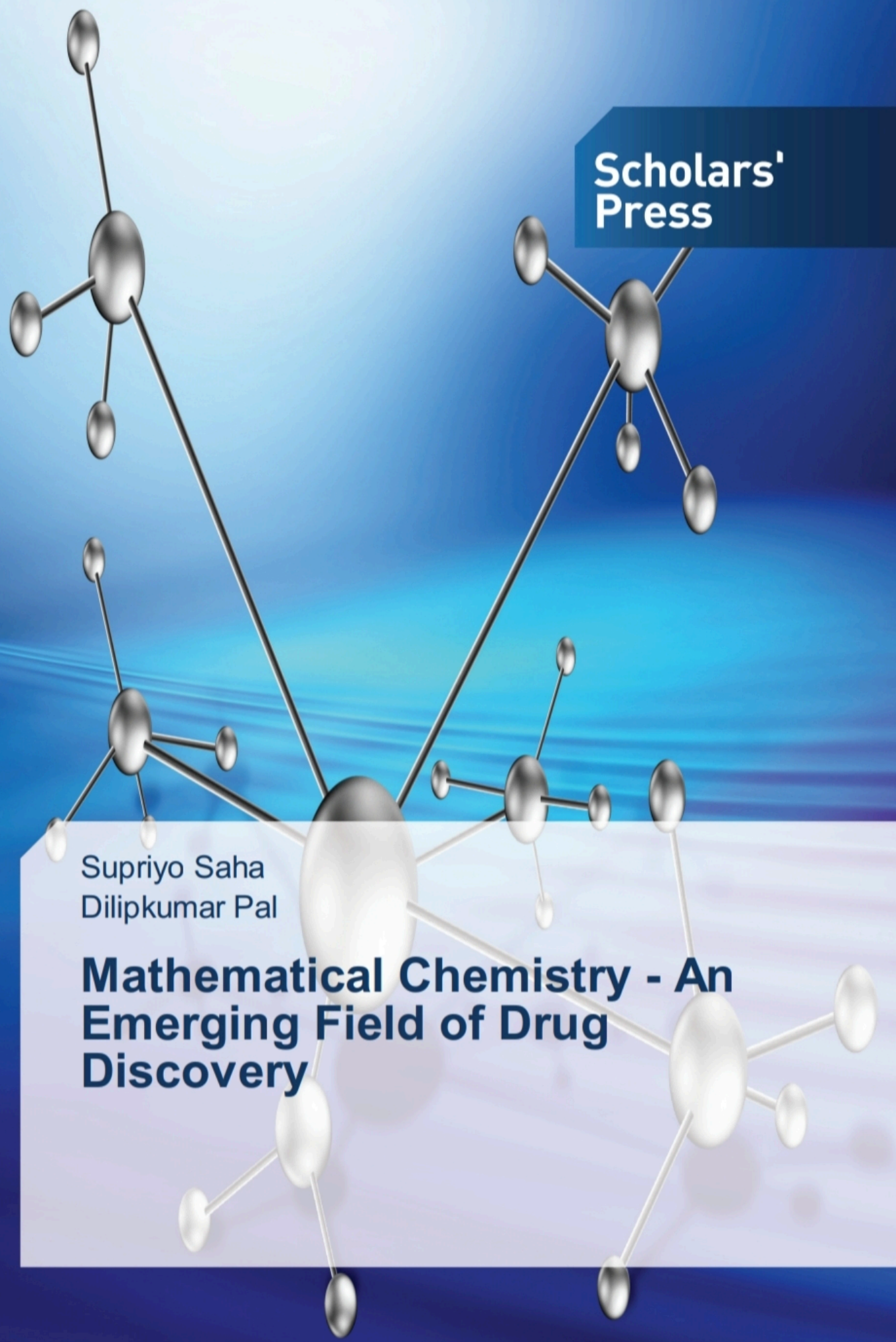


Scholars'
Press

Supriyo Saha
Dilipkumar Pal

**Mathematical Chemistry - An
Emerging Field of Drug
Discovery**



Impressum / Imprint

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek: Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Alle in diesem Buch genannten Marken und Produktnamen unterliegen warenzeichen-, marken- oder patentrechtlichem Schutz bzw. sind Warenzeichen oder eingetragene Warenzeichen der jeweiligen Inhaber. Die Wiedergabe von Marken, Produktnamen, Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen u.s.w. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutzgesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Bibliographic information published by the Deutsche Nationalbibliothek: The Deutsche Nationalbibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data are available in the Internet at <http://dnb.d-nb.de>.

Any brand names and product names mentioned in this book are subject to trademark, brand or patent protection and are trademarks or registered trademarks of their respective holders. The use of brand names, product names, common names, trade names, product descriptions etc. even without a particular marking in this work is in no way to be construed to mean that such names may be regarded as unrestricted in respect of trademark and brand protection legislation and could thus be used by anyone.

Coverbild / Cover image: www.ingimage.com

Verlag / Publisher:

Scholar's Press

ist ein Imprint der / is a trademark of

ICS Morebooks! Marketing SRL

4, Industrialala street, 3100 Balti, Republic of Moldova

Email: info@omniscryptum.com

Herstellung: siehe letzte Seite /

Printed at: see last page

ISBN: 978-3-330-65214-9

Copyright © Supriyo Saha, Dilipkumar Pal

Copyright © 2017 ICS Morebooks! Marketing SRL

Alle Rechte vorbehalten. / All rights reserved. Balti2017

Contents

1. CHAPTER 1. Introduction.....	5-6
2. CHAPTER 2. Chemical Graph Theory.....	8-15
3. CHAPTER 3. Artificial Neural Networks.....	17-22
4. CHAPTER 4. Density Functional Theory.....	24-27
5. CHAPTER 5. K-Nearest Neighbor.....	29-32
6. CHAPTER 6 & 7. Partial Least Square and Principal Component Regression.....	34-38
7. CHAPTER 8. Soft Independent Modeling of Class Analogue.....	40-42
8. CHAPTER 9. Molecular Dynamics.....	44-50
9. CHAPTER 10. Molecular Biology.....	52-58
10. CHAPTER 11. Chemometrics and QSAR.....	60-85
11. CHAPTER 12. Conclusion.....	87
12. CHAPTER 11. References.....	89-98