

<<化学计量学应用>>

图书基本信息

书名：<<化学计量学应用>>

13位ISBN编号：9787122022592

10位ISBN编号：7122022595

出版时间：2008-5

出版时间：化学工业出版社

作者：杜一平

页数：267

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>

<<化学计量学应用>>

内容概要

本书首先简要介绍了化学计量学的发展历史、研究内容和应用领域，数学和统计学基本知识，计算机编程语言MATLAB，分析化学中数理统计和数据处理方法。

在此基础上，介绍了目前应用较多的一些化学计量学方法，包括实验设计、最优化方法、多元校正、多元分辨、化学模式识别、化学构效关系等。

在阐述清楚各种方法基本理论的前提下，淡化数学理论，重点讲述化学意义，突出算法的使用，并对重要方法给出应用实例。

本书可以作为分析化学和其他相关专业本科生和研究生化学计量学课程的教学用书，也可以作为从事化学计量学研究 and 应用人员的参考书。

<<化学计量学应用>>

书籍目录

第1章 概论 1.1 化学计量学的诞生和发展历史 1.2 化学计量学的研究内容 1.3 化学计量学的应用领域 参考文献第2章 数学和MATLAB编程基础 2.1 数学和统计学基础 2.1.1 矢量和矩阵运算 2.1.2 线性相关 2.1.3 范数 2.1.4 统计学基础 2.2 MATLAB编程基础 2.2.1 MATLAB基本命令和基本运算 2.2.2 MATLAB的基本绘图功能 2.2.3 M文件 2.2.4 MATLAB编程举例 参考文献第3章 分析化学中数理统计和数据处理方法 3.1 分析数据的数理统计方法 3.1.1 分析化学中数理统计的基本概念 3.1.2 分析数据的置信区间估计 3.1.3 分析数据的显著性检验 3.2 分析信号的平滑 3.2.1 平均法 3.2.2 多项式拟合法 3.3 分析信号的求导 3.3.1 差分法 3.3.2 多项式拟合法 参考文献第4章 化学实验设计 4.1 基本概念 4.2 拉丁方和拉丁方设计 4.3 因子设计和部分因子设计 4.3.1 因子设计 4.3.2 部分因子设计 4.4 正交实验设计 4.4.1 正交表和正交实验设计 4.4.2 用正交表安排实验 4.4.3 实验结果的分析 4.5 均匀实验设计 4.5.1 均匀设计表 4.5.2 用均匀设计表安排实验 4.5.3 拟水平均匀设计 参考文献第5章 最优化方法 5.1 最优化的基本概念 5.2 线性规划 5.2.1 线性规划的标准型 5.2.2 线性规划的图解法 5.2.3 单纯形优化法 5.3 非线性规划 5.3.1 消去法第6章 多元校正 第7章 多元分辨第8章 化学模式识别第9章 定量构效关系

<<化学计量学应用>>

章节摘录

第1章 概论 1.1 化学计量学的诞生和发展历史 1971年，瑞典化学家S. Wold在申请一项基金项目时首次提出“化学计量学”(Chemometrics)这一名词。

他参考生物计量学(Biometrics)和经济计量学(Econometrics)两个名词的词尾，与化学(Chemistry)的词头结合定义了Chemometrics。

Wold提出的化学计量学得到美国科学家Kowalski的赞赏，他们于1974年共同发起成立了国际化学计量学学会，之后，化学计量学得到了快速发展。

在化学计量学发展过程中，尤其是发展初期，分析化学工作者做出了重要贡献，同时这门分支学科也对分析化学的发展产生了深远的影响。

所以，很多人认为化学计量学是隶属于分析化学学科的。

但是，今天的化学计量学所研究的内容已经不仅仅局限于分析化学，它在整个化学学科及其相关学科，如生命科学、环境科学等领域，以及很多工业部门都发挥着重要作用。

按照国际化学计量学学会的定义，化学计量学是一门运用数学、统计学、计算机科学以及其他相关学科的理论与方法，优化化学量测过程，并从化学量测数据中最大限度地获取有用化学信息的学科。

分析化学中的数理统计方法，如标准偏差、置信区间、有效数字、显著性检验等，就是早期化学计量学研究的内容。

那时，Chemometrics一词尚未出现，许多统计学与数学方法在化学与分析化学中逐步得到了应用。

这一阶段的化学计量学只是简单地把统计学和数学方法应用到分析化学中，范围比较有限，也没有自己独特的方法。

从20世纪70年代开始，科学家们除了使用统计学和数学方法外，还吸收了如行为科学(心理学等)、经济计量学、信息科学等领域已发展起来的数据与信号分析方法，将它们成功地应用于分析化学研究

众所周知，20世纪50年代以后，仪器分析方法迅速崛起，各类分析仪器所能提供的数据容量迅速增加

一般的化学分析方法，一次实验往往只能得到有限的几个数据，如滴定分析的实验数据无非是消耗滴定剂体积，重量分析中沉淀物的重量等。

<<化学计量学应用>>

编辑推荐

《化学计量学应用》可以作为分析化学和其他相关专业本科生和研究生化学计量学课程的教学用书，也可以作为从事化学计量学研究和应用人员的参考书。

<<化学计量学应用>>

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>