

<<医药分析信息学及分析数据处理技术>>

图书基本信息

书名：<<医药分析信息学及分析数据处理技术>>

13位ISBN编号：9787502588960

10位ISBN编号：7502588965

出版时间：2006-9

出版时间：化学工业出版社

作者：程翼宇翟海斌等

页数：284

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>

## 内容概要

医药分析信息学是一门新近引起分析化学界和生物医药界高度重视并得到迅速发展的边缘学科，是当今生物科技和信息科技的研究前沿；而分析仪器数据处理技术则是运用信息科学和计算科学等多学科交叉综合手段解决复杂物质体系辨析问题的高新技术方法，已广泛应用于生物、医药、地质、环保、食品、农业、化学等众多领域，取得了令人瞩目的成果。

全书共分10章，分别对分析数据处理技术的基础知识、现代仪器分析信号的处理、化学与生物模式信息处理、化学指纹图谱计算处理、分析信息智能管理、生物芯片分析信息处理、组学分析信息处理等进行了详细介绍，并对该技术在生物医药领域中的应用研究现状及进展做了全面介绍。

本书可供广大生物医药和分析科学工作者以及相关应用领域的科技人员阅读，也可作为相关专业研究生教学参考用书。

## 作者简介

程翼宇，博士毕业于浙江大学，曾赴美国哈佛大学医学院、FDA/国家毒理研究中心等欧美许多大学及药物研究单位留学或访问研究。

现任浙江大学求是特聘教授、药学院副院长、药物信息学研究所所长；兼任国家技术前瞻研究组专家、973计划项目专家组成员及《化学学报》等6家学刊编委，享受国务院政府特殊津贴。

他主要从事药学、中药学及生命信息科学等多学科前沿研究，主持研究完成973计划等国家重大课题16项，领衔获国家科技进步二等奖1项、省级奖11项，发表SCI收录论文78篇及EI论文30余篇。

## 书籍目录

第1章 绪论1.1 分析科学发展前沿若干问题1.2 涉及的若干概念、界定及术语定义1.3 分析信息获取问题1.4 生物医药分析技术发展趋势1.5 药物信息学与生物医药分析1.6 复杂物质体系辨析与医药分析信息学第2章 分析数据处理技术基础知识2.1 化学计量学与化学信息学2.1.1 化学计量学2.1.2 化学信息学2.2 多元统计分析技术2.2.1 基本概念2.2.2 常用的多元统计分析方法2.3 机器学习技术2.3.1 机器学习的定义2.3.2 机器学习的类型2.3.3 机器学习的应用领域2.3.4 几种常见的机器学习方法2.4 模式信息处理技术2.4.1 基本概念2.4.2 模式识别基本方法2.5 知识工程技术2.5.1 知识工程定义2.5.2 知识表示方法2.5.3 知识搜索2.5.4 知识推理机制2.5.5 专家系统2.6 人工神经元计算技术2.6.1 神经网络的定义2.6.2 基本概念与原理2.6.3 神经网络的应用2.6.4 几种常见的神经网络模型2.7 数据库与数据挖掘技术2.7.1 数据库技术概述2.7.2 数据库的基本概念2.7.3 数据仓库和数据挖掘技术2.8 小波分析技术2.8.1 基本概念2.8.2 小波分析的基本原理2.8.3 信号小波级数的展开及其变换算法的实现2.9 数据可视化技术2.9.1 数据可视化概念2.9.2 数据可视化过程2.9.3 数据可视化方法2.9.4 数据可视化应用2.9.5 展望2.10 化学信息集成处理技术参考文献第3章 现代仪器分析信号处理3.1 分析信号处理技术概述3.2 分析仪器的信号与噪声特性3.3 数字滤噪方法分类3.4 滤噪效果评价方法3.4.1 整体滤噪效果评价指标3.4.2 局部滤噪效果评价指标3.5 频带滤噪法3.5.1 多点归并平滑法3.5.2 加权平均平滑法3.5.3 SG数字滤波器3.5.4 可调型低通滤波器3.5.5 几种常用频带滤噪法的性能比较3.6 最佳滤波器3.6.1 匹配滤波器3.6.2 维纳滤波器和卡尔曼滤波器3.7 基于小波变换法的滤噪技术3.7.1 小波基自适应滤噪技术3.7.2 基于小波包基分解与重构的滤噪技术3.8 自适应滤波器3.8.1 最小均方自适应滤波器3.8.2 神经网络滤波器3.9 新型滤噪方法研究实例3.9.1 基于分形理论的自适应中位值滤噪方法研究实例3.9.2 基于光谱信息计算解析的液相色谱滤噪方法研究实例3.10 小波信号压缩参考文献第4章 分析谱图的谱峰辨识方法4.1 谱峰辨识技术概要4.2 谱峰检测方法4.2.1 幅值检峰法4.2.2 一阶导数检峰法4.2.3 二阶导数检峰法4.2.4 分形维检峰法4.3 谱峰识别方法4.3.1 基线漂移法4.3.2 谱峰间距测定法4.3.3 峰高比综合判别法4.4 仿人智能辨识谱峰方法4.5 谱峰自适应辨识方法第5章 多元校正与复杂分析数据解析5.1 多元校正与复杂分析数据解析概述5.2 多元校正5.2.1 直接校正5.2.2 间接校正5.2.3 非线性多元校正5.3 近红外光谱数据的多元校正5.3.1 近红外光谱预处理方法5.3.2 波段选择5.3.3 多元校正建模方法5.4 复杂分析数据解析5.4.1 多元分辨5.4.2 应用实例参考文献第6章 化学与生物模式信息处理6.1 数据预处理方法6.2 常用的模式特征提取方法6.2.1 主成分分析法6.2.2 偏最小二乘法6.2.3 核主成分分析法6.3 复杂化学与生物模式的分步特征提取法6.3.1 复杂化学与生物模式特征的分步提取方法原理6.3.2 特征矢量的分类能力评价指标6.3.3 复杂化学与生物模式特征的分步提取方法应用实例6.4 最优分类特征提取方法6.4.1 最优分类特征提取方法原理6.4.2 最优分类特征提取方法应用实例6.5 聚类分析法6.5.1 相似性测度6.5.2 系统聚类法6.5.3 动态聚类法6.6 判别函数法6.6.1 判别函数6.6.2 参数学习6.6.3 多分类问题6.7 近邻法6.7.1 最近邻法6.7.2 k近邻法6.8 神经网络模式分类法6.8.1 神经网络基本原理6.8.2 感知器6.8.3 误差反传神经网络6.8.4 RBF网络6.9 支持向量机6.9.1 支持向量机基本原理6.9.2 多类支持向量机6.9.3 支持向量机应用实例6.10 模糊模式识别方法6.10.1 模糊数学的基本知识6.10.2 模糊模式识别的一般过程6.10.3 模糊聚类方法6.10.4 模糊神经网络6.10.5 应用实例参考文献第7章 化学指纹图谱计算处理7.1 化学指纹图谱计算处理方法简介7.1.1 指纹图谱相似性计算原理7.1.2 模式分类计算原理7.2 化学指纹图谱测量参数的选择7.3 化学指纹图谱配准方法7.4 化学指纹图谱相似性测度的比较7.5 化学指纹图谱模式分类计算方法7.5.1 基于小波基分形参量的化学指纹图谱计算方法7.5.2 基于Fisher因子的化学指纹图谱模式分类方法7.5.3 化学指纹图谱类别相似性计算方法参考文献第8章 分析信息智能管理8.1 实验室信息管理系统8.1.1 LIMS的定义和范畴8.1.2 LIMS的发展过程8.1.3 LIMS的工作流程8.1.4 LIMS的功能8.1.5 LIMS的实施过程8.1.6 LIMS的标准和认证体系8.2 电子实验记录本8.2.1 电子实验记录本的概念8.2.2 电子实验记录本的功能8.3 中药分析信息智能管理8.3.1 中药化学信息数据库8.3.2 中药化合物数据库8.4 中药指纹图谱数据库管理系统8.4.1 系统功能8.4.2 应用实例8.5 数字中药信息系统8.5.1 数字中药信息系统结构8.5.2 数字中药信息系统功能8.6 中药分析信息的数据挖掘8.6.1 基

于因果关系发现的中药有效组分辨识方法8.6.2 中药材关键药效成分辨识方法研究实例8.6.3 中药复方关键药效成分辨识方法研究实例8.6.4 中药复方有效组分配伍优化方法研究实例参考文献第9章 生物芯片分析信息处理9.1 生物芯片概述9.2 生物芯片分析过程9.3 芯片数据获取9.3.1 芯片图像处理9.3.2 归一化方法9.3.3 芯片数据形式9.4 芯片数据分析9.4.1 差异分析9.4.2 分类分析9.4.3 聚类分析9.4.4 网络分析9.4.5 可视化方法9.5 芯片分析信息处理发展趋势9.5.1 数据质量评价与归一化9.5.2 差异分析9.5.3 测度选择9.5.4 基因相互关系发现9.5.5 聚类结果验证参考文献第10章 组学分析信息处理10.1 组学及组学分析信息处理技术概述10.2 蛋白质组分析信息处理10.2.1 蛋白质组分析信息处理简述10.2.2 基于形态特征的双向电泳图像处理方法10.3 代谢组分析信息处理10.3.1 代谢组信息处理技术简述10.3.2 肾阳虚模型大鼠代谢模式分析10.3.3 乳腺癌代谢物组模式特征发现10.3.4 肺癌患者尿液代谢组分析10.4 展望10.4.1 组学分析信息处理的应用前景10.4.2 组学分析信息学参考文献附录1 线性空间预备知识1.1 基本概念及定义1.2 矩阵代数1.3 矩阵和向量的微积分2 点盒分形维2.1 分形的定义2.2 分形维数定义2.3 点盒维数定义

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>