

<<化学计量学方法及MATLAB实>>

图书基本信息

书名：<<化学计量学方法及MATLAB实现>>

13位ISBN编号：9787511402431

10位ISBN编号：7511402437

出版时间：2010-4

出版时间：史永刚、栗斌、田高友、等 中国石化出版社 (2010-04出版)

作者：史永刚，栗斌，田高友等著

页数：362

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>

## <<化学计量学方法及MATLAB实>>

### 前言

过去的五十多年中,分析化学、分析仪器和计算机技术得到了迅速的发展,智能仪器和实验室自动化加速了分析化学向信息~科学的转化。

在很短的时间内获取关于物质系统的大量的复杂化学量测数据是一件十分容易的事情,这就使得现代化学工作者面临一个重大挑战,即如何处理与分析这些数据。

因此要求分析工作者必须具备化学、统计学、数学和计算机科学方面的技能,进行数据挖掘,以便从复杂的数据中提取尽可能多的有效信息,化学计量学便应运而生。

传统的分析化学教育关注的是仪器分析和化学分析的基本原理及应用。

但在整个分析的全过程中,量测仅是其中的一个步骤。

要做好分析,还必须十分重视与量测相关的其他分析过程,如采样、数据处理及分析结果中化学信息的提取等。

不正确或不适当的采样以及对分析结果的不合理解释必将导致错误的结论。

化学计量学正是研究化学量测全过程中每一步所涉及基础理论及方法的一门化学分支学科,它涉及分析采样理论、试验设计与优化、分析信号的检测与处理、化学信号的分辨、化学校正技术、化学模式识别等。

化学计量学的研究内容相当广泛。

本书主要介绍一些比较常用的、重要的化学计量学方法,如实验设计、化学信号处理、化学校正技术和化学模式识别等。

为了保持内容的完整性和逻辑性,将由易到难地介绍常用的化学计量学方法。

## <<化学计量学方法及MATLAB实>>

### 内容概要

化学计量学是一个新的化学分支学科，它应用数学、统计学、计算机科学和化学等学科的理论和方法，研究化学量测理论和方法，设计和选择最优的化学量测方法，并通过对化学数据的解析，最大限度地获取关于物质系统的化学信息。

《化学计量学方法及MATLAB实现》从化学量测的基本问题出发，阐述化学计量学基本理论和方法，介绍常用的化学计量学方法及MATLAB实现，内容涉及化学量测数据的统计描述、分析采样理论、化学实验的设计与优化、分析信号的检测与处理、化学信号的分辨、化学校正技术、化学模式识别等。

《化学计量学方法及MATLAB实现》可作为化学及相关学科的研究生和高年级大学生的教学用书和参考书，也可作为化学及化工等相关领域的科技工作者和教师的参考书。

## 书籍目录

第1章 概述1.1 化学计量学的定义1.2 化学计量学的研究范畴1.3 化学计量学的发展历史1.4 化学计量学的发展1.5 化学计量学发展的动力第2章 实验数据统计分析2.1 数据及数据类型2.2 实验数据的统计描述2.2.1 随机分布2.2.2 置信区间2.2.3 误差的传递2.3 统计推断2.3.1 标准正态分布2.3.2  $\chi^2$ 分布2.3.3 F分布2.3.4 t分布2.3.5 假设检验2.4 异常数据的剔除2.4.1 粗大误差规则2.4.2 Dixon检验2.4.3 Grubbs检验规则2.4.4 肖维勒准则2.5 方差分析2.5.1 单因素方差分析2.5.2 双因素方差分析第3章 采样理论及方法3.1 正确采样的统计学标准3.2 总体的类型3.3 随机采样3.4 分层采样3.5 固体散状物料采样3.6 抽样检验3.6.1 计量抽样检验3.6.2 计数抽样检验法3.7 采样操作方法3.8 动态过程中的采样第4章 化学实验设计与优化4.1 化学实验设计基础4.1.1 试验指标4.1.2 因素和水平4.1.3 同时试验和序贯试验4.1.4 试验最优化和解析最优化4.1.5 有效实验存在的条件4.1.6 实验设计的基本原理4.1.7 实验设计的步骤4.2 析因实验设计4.2.1 析因设计表4.2.2 析因设计的步骤4.2.3 中心复合设计和Box-Behnken设计4.3 正交实验设计4.3.1 正交表及其特点4.3.2 实验设计4.4 均匀实验设计4.4.1 均匀设计表4.4.2 实验设计4.5 随机区组4.6 响应曲面法4.6.1 形状已知的响应界面法4.6.2 形状未知的响应界面法4.6.3 单纯形法4.7 D-最优实验设计第5章 化学量测信号的检测与处理5.1 分析信号检测5.2 检测限5.2.1 定义5.2.2 检测限的点估计5.2.3 检测限的t检验法估计5.2.4 检测限的精度5.3 分析信号处理5.3.1 数字平滑与滤波5.3.2 曲线拟合5.3.3 谱峰面积的估计5.4 分析信号的变换5.4.1 傅立叶变换(FT)5.4.2 Hadamard变换(HT)5.4.3 FT和HT的应用第6章 化学模式识别6.1 数据预处理6.1.1 丢失数据的弥补6.1.2 中心化变换6.1.3 归一化处理6.1.4 正规化处理6.1.5 标准化处理6.2 方差-协方差矩阵、相关矩阵和距离6.2.1 方差-协方差矩阵6.2.2 相关矩阵6.2.3 距离6.3 特征选取6.3.1 化学模式识别中常用的特征6.3.2 特征选择的方法6.4 主成分分析6.5 监督模式识别6.5.1 聚类分析6.5.2 显示技术6.6 有监督模式识别6.6.1 Fisher线性分类法6.6.2 Bayes方法6.6.3 K最邻近法6.6.4 SIMCA法第7章 化学校正理论7.1 单变量校正7.1.1 一元线性回归7.1.2 相关系数和显著性检验7.1.3 权重回归7.1.4 曲线回归7.2 多元线性回归分析7.2.1 基本原理7.2.2 K-矩阵法和P矩阵法7.3 逐步线性回归方法7.4 主成分回归分析7.5 偏最小二乘法.....第8章 人工神经网络附录

章节摘录

插图：

## <<化学计量学方法及MATLAB实>>

### 编辑推荐

《化学计量学方法及MATLAB实现》由中国石化出版社出版。

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>