

<<化学计量学实用指南>>

图书基本信息

书名：<<化学计量学实用指南>>

13位ISBN编号：9787030337672

10位ISBN编号：7030337670

出版时间：2012-3

出版时间：科学出版社

作者：(美) 戈培林 主编 吴海龙等 译

页数：463

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>

## <<化学计量学实用指南>>

### 内容概要

化学计量学是--fq利用统计学或数学方法对化学体系量测值与体系状态建立联系的化学分支学科。

《化学计量学实用指南》是率面向化学尤其是分析化学领域的具有突出权威性的好书。内容包括采样、数理统计、实验设计、主成分分析、多元校正、稳健校正、非线性建模、分类及模式识别、自模式曲线分辨、多维分析及二三维校正等方法、算法和大量的应用实例，突出如何利用化学计量学理论和方法去解决各类具有多元和动态特性的化学及分析化学的实际复杂问题。

本书由浅入深，循序渐进，内容丰富，通俗易懂，可为化学及分析化学领域的高年级本科生、研究生、教师及其他科研工作者提供重要的化学信化思路、方法及手段，既适用于开设化学计量学课程，也适宜作自学教材，同时也可相关科研人员参考。

## <<化学计量学实用指南>>

### 作者简介

保罗J戈培林(Paul J. Gemperline), 哲学博士(Ph.D.), 美国东卡罗莱纳大学(ECU)的杰出研究教授和Harriot学院的杰出化学教授, 已有三十多年化学计量学工作经验。

化学计量学是--1]分析化学分支学科, 它利用化学量测的多元统计和数值分析来提供理解、建模和控制生产过程的相关信息。

Gemperline博士的成就包括逾50篇化学计量学领域的出版物(论文等)和逾150万美元的基金资助。

曾获得2003年度国际化学计量学领域的最高奖——“美国东部分析大会奖(化学计量学)”。

Gemperline博士的科学计算训练始于20世纪70年代后期的研究生学习阶段, 80年代早期形成了研究主线。

在80年代初期, 他与药物公司IMrroughsWellcome合作开发了近红外反射光谱的多元模式识别分析软件, 用于药物中间体

和产品的非破坏性快速测试。

他在该领域的研究成果及相关出版物等引起了国际性关注。

他是广受欢迎的演讲人, 已在外国众多大学和国际会议上作了大量的邀请报告。

近期, Gemperline博士与其他研究者一起开设了化学计量学培训课程, 对象为美国食品和药物管理局(FDA)的科研工作者、检查员以及制药工业的管理者, 用以支持推广新颖的过程分析技术策略及应用。

Gemperline博士的化学计量学研究的主要领域为: 利用模式识别、人工神经网络、多元统计分析、多元校正和非线性模型估计等方法, 发展可用于多元光谱测量分析的新算法和软件工具。

他的工作集中于制药工业中的过程分析应用, 与

Pfizer公司和GlaxoSmithKline合作并获得支持。

他的几位学生现已作为化学计量学家就职于药物和科学仪器公司。

他也曾获得美国国家自然科学基金和测量与控制工程中, b(MCEC)的大力支持。

这家位于Knoxville的田纳西大学的工程中心是美国国家自然科学基金资助的校企台作研究中心。

# <<化学计量学实用指南>>

## 书籍目录

译者序

前言

主编介绍

编著者

第1章 化学计量引论

1.1 化学量测——决策之基础

1.2 化学量测——三支点平台

1.3 化学计量学

1.4 如何使用本书

1.4.1 软件应用

1.5 化学计量学方的一般性读物

参考文献

第2章 数据的统计学估计

引论

2.1 误差源

2.2 精密度和准确度

2.3 正态分布的性质

2.4 显著性检验

2.4.1 F - 检验法——两个方差的比较 (精密度)

2.4.2 T - 检验法

2.4.3 单尾检验和双尾检验

2.4.4 样品均值和确定值的比较

2.4.5 两样品均值的比较

2.4.6 使用不同测试对象或测试样品的两种方法的比较

2.5 方差分析

.....

第3章 采样理论、分布函数和多元正态分布

第4章 主成分分析

第5章 校正

第6章 稳健校正

第7章 利用非线性回归进行多元量测动力学过程建模

第8章 响应面建模和实验设计

第9章 分类和模式识别

第10章 信号处理和数字滤波

第11章 多元曲线分辨

第12章 联用数据的三维校正]

第13章 化学计量学展望

索引

## 章节摘录

版权页:第1章 化学计量学引论1.1 化学量测——决策之基础化学量测已成为当今社会重要决策活动的基础。

例如，在对患者进行医学治疗前，需要进行大量医学化验和检查（包括血液化学分析等），这些常常构成医疗的基础，而不准确的结果常与接受医疗的个人体生死相关。

在工业中，安全而有效地控制和操作高能化学过程，如乙烯生产流程中供氧量不准确会导致氧量过多，引起剧烈爆炸，危及工人和当地居民的人身安全。

我们的环境保护也基于这量测。

政府政策制定者依赖可靠的量测进行损益决策，以保证现在及将来数百万人民的健康和安全。

很显然，公演量测提供的信息必须是可靠的，尤其对上述这些情况，化学量测就是重要决策过程的基础。

1.2 化学量测——三支点平台构成许多人类重要决策过程之基础的可信化学信息，信赖于量测过程的三个关键属性，包括其化学属性、物理属性和统计属性。

支持可信化学量测的这些条件就像三个支点支撑着这一平台。

只有在化学量测的这三个关键属性被充分理解和控制的环境下，才可以获得可信赖的信息。

- (1) 化学属性，包括化学计量、物料平衡、化学平衡等。
- (2) 物理属性，包括温度、能量传递、相态转化等。
- (3) 统计属性，包括量测过程中误差来源、干扰因素的控制、响应信号的校正、复杂多元信号的建模等。

## <<化学计量学实用指南>>

### 编辑推荐

《化学计量学实用指南》由科学出版社出版。

<<化学计量学实用指南>>

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>