

<<化学计量学>>

图书基本信息

书名：<<化学计量学>>

13位ISBN编号：9787040119688

10位ISBN编号：7040119684

出版时间：2003-5

出版时间：第1版 (2003年5月1日)

作者：俞汝勤

页数：327

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>>

前言

化学计量学(chemometrics)在我国发展已有二十多年的历史,是一门化学与统计学、数学、计算机科学交叉所产生的新兴的化学学科分支。

它运用数学、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提取有用的化学信息。

化学界有时将化学计量学与基于量子化学的计算化学(computational chemistry)列入同一学科分支领域,但化学计量学与通常理解的计算化学有显著差异,化学计量学是以化学量测为其基点,实质上是化学量测的基础理论与方法。

化学计量学为化学量测提供基础理论和方法,为各类化学波谱及化学量测的数据解析,为化学化工过程的机理的研究和优化提供新途径,它涵盖了化学量测的全过程,包括了采样理论与方法、实验设计与化学化工过程的优化控制、化学信号处理、分析信号的多元校正与分辨、化学模式识别、化学过程和化学量测过程的计算机模拟、化学定量构效关系、化学数据库与化学专家系统等主要分支,是一门内涵相当丰富的化学学科分支。

化学计量学的发展为化学各分支学科,其中特别是分析化学、有机化学、高分子化学、物理化学、无机化学、化学工程、环境化学、药物化学、生物化学等,提供了不少解决问题的新思路、新途径和新方法,是一门实用性很强的化学学科分支。

近年来,由于计算机和计算技术的飞速发展,化学计量学的内涵还在不断扩大,怎样将这门新兴的化学分支学科的基本内容及最新发展成果总结为一本可为化学和化学工程本科学生和研究生使用的教材,以适应现代化学学科的发展,的确是一件值得做好的工作。

化学计量学是以计算机和近代计算技术为基础的一门新兴交叉学科,所用的方法大都是基于矩阵运算的方法,对于数学基础学得不够的化学专业的学生来说,的确是有很大难度的。

如按常规教学方法(即依靠BASIC、FORTRAN等经典高级语言为工具,以讲算法为内容)来进行的话,不但需要很多学时,甚至还很难组织好它的教学,只会使学生感到该课程支离破碎,不成系统。

然而,化学计量学虽的确是以计算机和近代计算技术为其基础,但它是具有其深刻的化学内涵的;而且,如果化学计量学离开了它得以生长的土壤——化学学科,就失去了它存在的必要性。

<<化学计量学>>

内容概要

本书是教育部立项招标和“九五”规划教材。

在编排上，本书力图包括化学计量学的大部分内容，并主要以基本概念、基本方法为主线介绍。

本书的主要内容有：概论，采样理论和方法、化学实验设计与优化方法，分析检测理论与信号处理方法，多元校正与多元分辨，化学模式识别，计算机数字模拟法、化学构效关系的研究方法，人工智能与化学专家系统方法，以及统计学与线性代数基础知识。

本书可作为化学专业的研究生教材使用。

<<化学计量学>>

书籍目录

第一章 概论第二章 分析采样理论和方法第三章 化学试验设计与优化第四章 分析检测与新好处理方法第五章 多元校正与多元分辨第六章 化学模式识别第七章 计算机数字模拟法第八章 化学构效关系的研究方法第九章 人工智能与化学专家系统方法第十章 统计学和线性代数基础知识

<<化学计量学>>

章节摘录

插图：

<<化学计量学>>

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>