

## <<化学实验数据的统计处理与计算>>

### 图书基本信息

书名：<<化学实验数据的统计处理与计算>>

13位ISBN编号：9787122074348

10位ISBN编号：712207434X

出版时间：2010-2

出版时间：化学工业出版社

作者：张卫

页数：164

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>

## <<化学实验数据的统计处理与计算>>

### 前言

随着计算机技术的普及与发展以及计算机与其他学科的交叉、渗透,众多高等院校纷纷开设了计算机在化学中应用类课程,并编写了相应的教材。

这些教材从一定程度上体现了计算机在化学方面应用类课程的教学改革中取得的成果,但这类课程整体性不强。

对于综合性大学的化学及化学近缘专业的数学以及计算机理论基础相对较强的学生来说,建立计算机在化学中应用类的课程中各学科之间理论知识和计算方法的相互联系,并掌握其综合运用的方法显得尤为重要。

为适应综合性大学化学、应用化学专业及环境等化学近缘专业本科生对计算机在化学中应用类课程教学的要求,本书包含了实验数据的误差及数理统计基础、化学中常用的数值分析方法、实验设计与优化方法、数学建模及其在化学中的应用以及化学中常用软件的应用等基本理论,有较为完整、系统的计算机在化学中应用类课程的知识体系,并通过一定学时的上机训练实践,循序渐进地引导学生根据上机实践去理解其基本原理,了解其在化学、化工、环境等领域的应用,全面提高学生灵活运用理论知识的能力。

在教材的写作过程中,本教材注重将繁复难懂的理论以通俗易懂、简单明了的语言加以阐述,便于学生的理解和运用,为他们后续的学习和科学研究实践打下坚实的基础。

本书共分5章,由张卫任主编,在编写过程中,上海交通大学化学化工学院的研究生曾圆、万会师等同学承担了大量的文字编辑、排版等工作,在此表示最诚挚的谢意!

另外,上海交通大学化学化工学院的孙准、李江波、李丰、陈虹锦、马荔等教师对本书的编写也给予了较多的建议和帮助,在此亦表示衷心的感谢!

同时,本书的出版得益于上海交通大学教务处、化学化工学院的大力支持,并获得教材出版基金资助,另外,在本书的编写过程中,编者参考了大量的Internet上的资源及已出版的相关教科书,并引用了其中的一些图表,在此说明并表示衷心的感谢!

由于编者水平和专业知识所限,书中难免会有疏漏之处,真诚地恳请专家、学者以及广大的读者批评指正。

## <<化学实验数据的统计处理与计算>>

### 内容概要

本书是一本介绍化学实验数据的统计与计算的应用型书籍，具有系统性、实用性强的特点，共5章，分别为：实验数据的误差及数理统计基础、化学中常用的数值分析方法、化学实验的最优设计、数学建模及其在化学中的应用、化学中常用软件的应用。

本书可作为高等院校化学、材料、化工、生命、制药等非计算化学专业高年级学生及研究生了解和掌握化学实验数据的统计和计算等的基本原理及其在该领域的应用基础课程的教材和参考书，也可供信息以及相关专业领域的科技工作者参考。

## &lt;&lt;化学实验数据的统计处理与计算&gt;&gt;

## 书籍目录

第1章 实验数据的误差及数理统计基础 1.1 实验误差概述 1.1.1 误差与偏差的基本计算公式 1.1.2 误差的分布 1.2 置信区间及其应用 1.2.1 置信区间的基本概念 1.2.2 置信区间的应用 1.3 误差的传递 1.3.1 偶然误差的传递 1.3.2 系统误差的传递 1.4 实验数据的统计检验及其应用 1.4.1 离群值的检验 1.4.2 t检验 1.4.3 F检验 1.5 实验数据的方差分析 1.5.1 方法概述 1.5.2 单因素方差分析 1.5.3 多因素方差分析 1.5.4 应用示例 1.6 实验数据的主成分分析 1.6.1 方法概述 1.6.2 主成分分析的计算步骤 1.6.3 应用示例 习题1

第2章 化学中常用的数值分析方法 2.1 非线性方程的求解及其应用 2.1.1 二分法 2.1.2 迭代法 2.1.3 牛顿法 2.1.4 应用示例 2.2 线性代数方程组的求解及其应用 2.2.1 高斯(Gauss)-约当(Jordan)消去法 2.2.2 高斯-赛德尔(Gauss-seidel)迭代法 2.2.3 病态方程组和条件数 2.2.4 应用示例 2.3 实验数据的拟合及回归分析 2.3.1 一元线性拟合及回归分析 2.3.2 多元线性拟合及回归分析 2.3.3 化非线性拟合为线性拟合 2.3.4 应用示例 2.4 插值法与数值积分 2.4.1 梯形法求积分 2.4.2 辛普生法求积分 2.4.3 高斯法求积分 2.4.4 插值法 2.4.5 应用示例 2.5 常微分方程的数值解 2.5.1 欧拉(Euler)法简介 2.5.2 预测-校正法简介 2.5.3 解一阶微分方程组的预测-校正法 2.5.4 应用示例 习题2

第3章 实验设计与优化方法简介 3.1 基本概念 3.2 正交实验设计 3.2.1 正交表简介 3.2.2 正交表设计实验过程及实验结果分析 3.2.3 具有交互作用的正交实验设计与结果分析 3.3 均匀实验设计 3.3.1 均匀设计表简介 3.3.2 均匀设计实验结果分析方法概述 3.3.3 应用示例 3.4 单纯形实验优化设计法 3.4.1 基本单纯形法概述 3.4.2 改进单纯形法概述 3.4.3 初始单纯形顶点的构造方法 习题3

第4章 数学建模及其应用 4.1 数学建模概述 4.1.1 数学模型的类型 4.1.2 数学模型的建模步骤 4.1.3 数学建模的基本方法 4.2 化学中常用的数学建模示例 4.2.1 难溶化合物的溶解度模型的建立 4.2.2 混合体系的萃取分离效率模型的建立 4.2.3 天然水体中pH值波动模型的建立 4.2.4 工业废水厌氧消化处理建模示例 习题4

第5章 化学中常用软件的应用 5.1 Mathcad 7.0软件应用概述 5.1.1 Mathcad 7.0的功能与特点 5.1.2 Mathcad的使用基础 5.1.3 Mathcad编程方法概述 5.1.4 Mathcad的解析计算 5.1.5 常用Mathcad的内置函数简介 5.2 Matlab 7.0软件应用概述 5.2.1 Matlab 7.0的特点与功能 5.2.2 Matlab运算基础 5.2.3 Matlab程序设计基础 5.2.4 常用Matlab内置函数简介 5.3 Origin 6.0软件应用概述 5.3.1 Origin 6.0的基础知识 5.3.2 绘制二维和多层图形 5.3.3 曲线拟合 5.4 ChemOffice 7.0软件应用概述 5.4.1 Chem Draw的使用基础 5.4.2 Chem 3D的使用基础 5.4.3 Chem Finder的使用基础

附录 附表1 标准正态分布表 附表2 t分布表 附表3 F分布表 附表4  $\chi^2$ 分布表 附表5 相关系数临界值  $r_{\alpha}$ 表 附表6 正交表 附表7 均匀设计表参考文献

## &lt;&lt;化学实验数据的统计处理与计算&gt;&gt;

## 章节摘录

插图：第1章实验误差是指测定结果与真实结果之间的差值，是客观存在的，根据其性质及产生的原因，可以分为系统误差和偶然误差两类。

系统误差是指在测定过程中由于实验方法本身不够完善、仪器缺陷、试剂不纯等原因所造成的误差，对实验结果的影响比较恒定。

重复测定不能发现和减小系统误差，只有改变实验条件才能发现系统误差，通常可以利用对照实验、空白实验、仪器校准等办法加以校正。

偶然误差是指在测定过程中一系列有关因素微小的随机波动而形成的具有相互抵偿性的误差，是由测定过程中无法避免的偶然因素引起的，有正有负，可大可小，随着测定次数的增加，大量的偶然误差就表现出一定的统计规律性：绝对值相近而符号相反的误差出现的概率相等，绝对值较小的误差比绝对值较大的误差出现的概率大，在一定的测量条件下，偶然误差的绝对值有一定的限值，即超出该限值的误差出现的概率为零，而且对于同一物理量的等精度观测，其偶然误差的算术平均值，随着观测次数 $n$ 的无限增大而趋于零，符合正态分布。

因此，增加测定次数，可以减少偶然误差。

表征实验误差的大小通常通过给出实验数据的准确度与精密度加以判别，准确度是指测量值 $x$ 与真实值 $u$ 的接近程度，分为绝对误差和相对误差，若无法确定真实值，可用测定值偏离测定的平均值的程度来衡量测定结果的好坏，将对同一样品进行多次重复测定时各测定值相互接近的程度称为精密度，其大小用偏差表征，偏差同样可以用绝对偏差和相对偏差来表示。

对于一组实验结果，通常还采用平均偏差、样本标准偏差或总体标准偏差等物理量来表征精密度的大小（注：研究对象全体的集合称为总体，样本是指通过观察或实验得到的数据）。

精密度是保证准确度的先决条件，精密度差，所得结果不可靠，但高的精密度也不一定能保证高的准确度。

## <<化学实验数据的统计处理与计算>>

### 编辑推荐

《化学实验数据的统计处理与计算》：高等学校教材

<<化学实验数据的统计处理与计算>>

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>