

<<计算化学>>

图书基本信息

书名：<<计算化学>>

13位ISBN编号：9787502552350

10位ISBN编号：7502552359

出版时间：2004年04月

出版时间：化学工业出版社

作者：郭纯孝

页数：384

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>

<<计算化学>>

内容概要

本书是《21世纪化学丛书》中的一册。

本书全面介绍了计算化学的基本内容, 包括: 计算机数值计算的基本概念、计算误差、方程求根、函数插值、数值积分、常微分方程求解、线性和非线性方程组的求解、非线性拟合、一元和多元回归等

。同时还介绍了计算化学发展的前沿, 如正交试验法、多元统计校正理论、蒙特卡罗方法等。

本书选材合适、概念准确、条理清楚, 对于希望了解计算化学的高等院校师生、科研人员均具有参考价值。

<<计算化学>>

书籍目录

第1章 绪论 1.1 微机在化学中的应用 1.2 计算机解题一般步骤 1.3 计算机语言和源程序 1.4 算法简介 1.5 数值计算误差简介 第2章 代数方程求根 2.1 引言 2.2 多项式的求值 2.3 二分法 2.4 迭代法 2.5 迭代过程的加速 2.6 牛顿法 2.7 弦截法 2.8 多项式方程求全部根 2.9 多元弱酸缓冲溶液的pH值和各组分浓度的确定 习题 第3章 函数插值 3.1 引言 3.2 线性插值 3.3 拉格朗日三点插值 3.4 拉格朗日n点插值 3.5 插值余项 3.6 埃特金插值 习题 第4章 数值积分 4.1 引言 4.2 梯形法求积 4.3 辛普生求积 4.4 求积公式的误差 4.5 离散点数据的求积 4.6 龙贝格求积 4.7 辛普生方法求二重积分 习题 第5章 常微分方程的数值解 5.1 引言 5.2 欧拉法及改进 5.3 龙格-库塔法 5.4 积分步长的自动选取 5.5 一阶常微分方程组 5.6 高阶常微分方程的解 习题 第6章 线性方程组的解法 6.1 引言 6.2 高斯消去法 6.3 迭代法 6.4 逆矩阵法求解线性方程组 6.5 三对角线性方程组的追赶解法 6.6 矩阵分解法求线性方程组 习题 第7章 非线性方程组的解法 7.1 引言 7.2 迭代法 7.3 牛顿-雷扶生法 7.4 最速下降法 7.5 非线性函数参数的拟合 习题 第8章 回归分析 8.1 引言 8.2 一元线性回归 8.3 加权回归 8.4 一元非线性回归 8.5 多元线性回归 8.6 数据的标准化 8.7 多元线性回归数据的标准化处理 8.8 多元线性回归的显著性检验 8.9 最优回归方程的选择 8.10 可化为多元线性回归的问题 8.11 多项式回归 习题 附表 第9章 蒙特卡罗方法 9.1 引言 9.2 蒙特卡罗方法的基本原理 9.3 MC方法应用实例 9.4 随机数与伪随机数 9.5 MC方法计算积分 9.6 MC方法的综合应用 习题 第10章 多元统计校正理论 10.1 化学量测数据的矩阵表示 10.2 多元线性回归校正 10.3 主成分回归 10.4 偏最小二乘法 第11章 正交试验法 11.1 引言 11.2 正交试验法的基础知识 11.3 正交试验结果的方差分析 11.4 考虑交互作用的正交试验 11.5 有混合水平的正交试验 11.6 正交试验结果的灵活处理 11.7 正交试验法的综合应用举例 11.8 正交试验的计算程序 习题 习题答案 附表 附录 参考文献

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>