

<<计算化学>>

图书基本信息

书名：<<计算化学>>

13位ISBN编号：9787564028176

10位ISBN编号：7564028173

出版时间：2010-1

出版时间：北京理工大学出版社

作者：聂长明,廖力夫

页数：337

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>>

前言

计算化学是化学、计算方法、统计学和程序设计等多学科知识融合的一门综合性新课程。它运用数学、统计学与计算机程序设计的方法,进行化学、化工的理论计算,试验设计,数据与信息处理、分类、分析和预测。

现代的化学研究中,计算机已经成为不可缺少的有力工具。

学习使用计算机解决化学领域中遇到的各种数值计算,已成为化学中不可或缺的一部分。

计算化学的研究领域非常丰富,本书主要内容包括数理统计分析、一元回归分析、多元校正回归基础、主成分分析与多元校正、模式识别方法、神经网络在化学中的应用、构效关系研究和分子拓扑指数、分子模拟、实验设计与优化、MATLAB在化学中的应用等。

本书可用作化学类、化学工程与工艺、制药工程、高分子材料、环境科学与工程等专业本科生和研究生教材,也可作为对计算化学有兴趣的化学、化工等专业技术人员和青年教师的参考书。

本书由聂长明、廖力夫任主编。

参加本书编写工作的有林英武、彭国文、戴益民、武亚新、姜赛红、文松年、肖方竹、徐印堂、陈炫。

在本书编写过程中,我们努力按照国防特色教材的要求进行编写、统稿和定稿。

我们感谢国防科工局“十一五”规划教材基金对本书的资助,并感谢南华大学领导和北京理工大学出版社在成书过程中给予的大力支持和积极帮助。

同时编写此书参考了不少书籍和期刊,本书的出版同这些图书以及有关论文的作者的辛勤工作是分不开的,在此一并表示衷心的感谢。

由于篇幅有限,因此本书仅将主要的书籍和期刊列入参考文献中。

由于编者水平有限和编写时间仓促,书中难免存在错误和疏漏,甚至谬误之处,敬请各位同仁和读者不吝赐教和指正。

<<计算化学>>

内容概要

计算化学是化学、计算方法、统计学和程序设计等多学科交叉融合的一门新兴学科。它运用数学、统计学与计算机程序设计的方法,进行化学、化工的理论计算,试验设计,数据与信息处理、分类、分析和预测。

《计算化学》主要内容有数理统计分析、一元回归分析、多元校正回归基础、主成分分析与多元校正、模式识别方法、神经网络在化学中的应用、构效关系研究和分子拓扑指数、分子模拟、实验设计与优化、MATLAB在化学中的应用等。

《计算化学》可用作化学类、化学工程与工艺、制药工程、高分子材料、环境科学与工程等专业本科生和研究生教材,也可作为对计算化学有兴趣的化学、化工等专业技术人员和青年教师的参考书。

<<计算化学>>

书籍目录

第0章 绪论0.1 什么是计算化学0.2 计算机在化学中的应用0.2.1 按化学体系分类0.2.2 按计算机应用方法分类0.3 计算化学的普及0.4 计算化学未来的发展0.5 结语第1章 数理统计基础1.1 误差1.1.1 误差的定义1.1.2 误差的来源1.1.3 误差的类型1.1.4 精密度和准确度1.1.5 偶然误差的传递1.1.6 系统误差的传递1.2 基础统计学概念1.3 区间估计1.3.1 允许区间1.3.2 总体均值的置信区间估计1.4 结果的表示1.4.1 有效数字的定义1.4.2 有效数字与不确定度的关系1.5 置信区间的其他应用1.6 显著性检验1.6.1 显著性水平1.6.2 χ^2 检验1.6.3 t检验1.6.4 F检验1.7 坏值的剔除第2章 一元回归分析2.1 一元线性回归2.1.1 一元线性回归方程的求法2.1.2 相关系数和显著性检验2.1.3 一元线性回归的方差分析2.1.4 斜率b和截距a的区间估计及斜率b的显著性检验2.1.5 x值和检测限的计算2.1.6 标准加入法2.1.7 借助回归线进行分析方法的比较2.1.8 权重回归分析2.2 一元非线性回归第3章 多元校正分析基础3.1 多元线性回归3.1.1 多元线性回归的原理3.1.2 多元线性回归模型的效果分析3.1.3 多元线性回归的应用3.2 经典最小二乘法3.3 反推最小二乘法第4章 主成分分析与多元校正4.1 主成分分析4.1.1 主成分分析的基本概念4.1.2 主成分的计算原理4.1.3 主成分的性质4.1.4 主成分的计算方法4.1.5 主成分数的判别4.2 主成分回归4.3 偏最小二乘回归法4.4 目标因子分析4.4.1 因子分析基本概念4.4.2 投影矩阵4.4.3 用投影矩阵进行目标因子分析4.5 秩消因子分析4.5.1 双线性数据矩阵4.5.2 秩消因子分析的原理和步骤4.5.3 广义秩消因子分析法4.5.4 残差双线性分解因子分析法第5章 模式识别方法5.1 数据的表示及预处理5.2 特征的提取和压缩5.2.1 特征的提取5.2.2 特征的压缩5.3 相似系数和距离5.4 模式识别方法5.4.1 有管理的模式识别方法5.4.2 无管理的模式识别方法5.5 显示方法5.5.1 线性映射5.5.2 非线性投影第6章 人工神经网络在化学中的应用6.1 人工神经网络6.1.1 人工神经网络的结构和功能6.1.2 人工神经网络的学习方法6.1.3 人工神经网络中的归一化问题6.1.4 BP人工神经网络6.2 人工神经网络信息流分析技术研究6.2.1 ANN模型输入节点的筛选6.2.2 人工神经网络的组织与运行6.3 人工神经网络的应用6.3.1 蛋白质的二级结构预测6.3.2 谱图分析6.3.3 定量构效关系6.3.4 模式识别6.3.5 化学反应产物及产率的预测第7章 构效关系研究和分子拓扑指数7.1 图论的基本概念7.2 化学结构和图论7.2.1 化学图7.2.2 分子的矩阵表示7.3 化学结构的二维连接表7.4 主要的拓扑指数及其应用7.4.1 距离矩阵指数7.4.2 邻接矩阵指数7.4.3 量子拓扑指数 a_N 及广义 a_N 指数第8章 分子模拟8.1 分子模拟基本方法8.1.1 量子力学8.1.2 分子力学8.1.3 QM / MM法8.1.4 分子动力学8.1.5 分子蒙特卡洛法8.2 分子模拟软件简介8.2.1 Chemoffice简介8.2.2 HyperChem简介8.2.3 Gaussian简介第9章 实验设计与优化9.1 化学实验设计基础9.1.1 试验指标9.1.2 因素和水平9.1.3 同时试验和序贯试验9.1.4 试验最优化和解析最优化9.1.5 有效实验存在的条件9.1.6 实验设计的基本原理.....第10章 MATLAB在化学中的应用附录参考文献

<<计算化学>>

章节摘录

仪器自动化发展迅速，内容包括数据采集（将仪器测得的模拟量通过模数转换电路转换为数字，以便计算机处理）、数据处理（自动记录、换算、校正、平滑）、自动控制（用程序控制进样、加压、升温、调节等操作）以及屏幕指导（操作人员不用带纸笔和操作规程，一切工作都由屏幕提示，人机对话，操作过程和结果都由机器打印记录）等。

仪器智能化是一个新的课题，是仪器自动化并配备专家系统的产物，其低级阶段是配备小型数据库，能选择实验条件，存贮、调用谱图等；其高级阶段是用专家系统指导人们工作，检查仪器，对操作人员辅导、答疑等。

2. 计算机在有机化学中的应用（简称计算有机） （1）谱图检索 物质的不同结构引起谱图上的不同特征。

因此，谱图的检索就成为有机分析的重要手段，常用的有红外、核磁、质谱等谱图。

例如，由实验测出未知物的红外谱图，把它和标准谱图对照，参照质谱数据求得相对分子质量，就可求得未知物的组成和结构。

但是，标准谱图数量太大，如果有18万张标准谱图，每2 s翻阅1张，一个人要半个月才能翻完一遍，还谈不上思考和比较。

若将谱图信息数字化，用计算机进行检索，就可以迅速指出实测谱图与哪一张标准谱图相同，或与哪几张标准谱图相似程度最大，这将为分析者提供解决问题的线索。

（2）差谱技术 实测谱图的可靠性通常存在一些问题，如溶剂、基体的影响，共存物质的干扰等。

一般试样本身就是未知物，欲将它提纯为纯化合物测谱是困难的，这就产生了差谱技术，即用差减的方法产生相应于纯化合物的谱图。

传统的差谱是用光学方法，如利用参比溶液、双光束补偿等方法，对于识别未知浓度的干扰物质有困难。

利用计算机执行差谱程序，可将干扰物质的标准谱图通过换算，与试样的谱图进行差减，达到扣除基体、数据平滑、多组分逐级差谱等效果，为有机物的成分、结构分析提供新的手段。

（3）结构解析 结构解析方法是利用已有的光谱、波谱数据，由人工归纳出结构单元与谱图性质关系的“知识规则”，存入计算机，作为逻辑判断的标准。

试样数据输入时，计算机推理判断，指出试样结构的若干种可能方案。

这种方法模拟了化学专家的智能，属于“化学专家系统”的研究。

结构解析的目标是结构自动分析，将未知物在红外光谱仪、核磁共振谱仪等几台仪器上同时测谱，所得数据联机送入计算机进行实时处理。

在屏幕上显示出平面或立体结构图形，不过这种工作仅在小范围内实现，要处理天然有机化合物等复杂问题为时尚早。

<<计算化学>>

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>