

## <<计算机在化学化工中的应用>>

### 图书基本信息

书名：<<计算机在化学化工中的应用>>

13位ISBN编号：9787810581899

10位ISBN编号：7810581899

出版时间：2000-8

出版单位：上海大学

作者：吴若峰等编著

页数：138

字数：213000

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>

## <<计算机在化学化工中的应用>>

### 内容概要

本书除介绍化学化工领域中常用的曲线拟合、回归分析、高次方程求根、线性方程组求解、数值积分、微分子方程求解等经典算法外，特别对一些近年来在化学化工领域中得到广泛应用的计算技术作了详细介绍，如单纯形（simplex）优化技术、模式识别技术、人工神经网络方法、蒙特卡罗（Monte Carlo）方法、定量结构—活性相关分析（QSAR）等，并以相当篇幅介绍这些方法解决化学化工实际问题时的应用。

此外，对国外一些优秀的科技软件如Oringin、ACD / ChemSketch等也略作介绍。

附录中编写了常用算法的QBASIC程序。

本书可作为高等院校化学化工及相近专业本科生的教材或教学参考书，也可供化学工作者及其他科技工作者使用。

## &lt;&lt;计算机在化学化工中的应用&gt;&gt;

## 书籍目录

第一章 最小二乘法和曲线拟合 1-1 线性最小二乘法 1-2 用线性最小二乘法确定方程的系数 1-3 非线性方程变为线性方程 1-4 非线性最小二乘法 1-5 线性回归分析 习题 上机作业1 气体反应动力学方程的确定 上机作业2 用Origin软件进行曲线拟合 第二章 高次方程求解 2-1 扫描法 2-2 对分法和优选法 2-3 迭代法 2-4 牛顿法 习题 上机作业 用牛顿迭代法计算化学反应的平衡浓度 第三章 线性方程组求解 3-1 克莱姆法则 3-2 消元法 3-3 按列选主元素消去法 3-4 按列选主元素消去法的计算流程 习题 上机作业 通过求解线性方程组确定混合物的组成 第四章 数值积分 4-1 矩形和梯形法求积 4-2 辛普森法求积 4-3 高斯—勒让德法求积 4-4 Monte Carlo方法求积 习题 上机作业 等压加热过程中的热效应计算 第五章 常微分方程的数值解 5-1 欧拉法 5-2 改进的欧拉法—预测—校正法 5-3 龙格—库塔法 习题 上机作业 化学反应动力学计算 第六章 单纯形最优化方法 6-1 改变单因子法 6-2 单纯形法 6-2-1 基本单纯形法 6-2-2 改良单纯形法 6-2-3 初始单纯形的定位 6-2-4 单纯形迭代的结束 6-2-5 多维单纯形法 6-2-6 改良单纯形法的计算程序 6-3 单纯形法最优化实例 习题 第七章 模式识别与工业优化 7-1 模式识别与工业数据处理 7-2 模式识别方法的原理和基本概念 7-3 数据标准化处理 7-4 特征参数的抽提 7-5 常用模式识别方法简介 7-5-1 KNN法及其衍生法 7-5-2 主成分分析方法 7-5-3 多重判别矢量法 7-5-4 Fisher判别分析法 7-5-5 非线性映照法 7-6 人工神经网络简介 7-7 模式识别优化的应用 第八章 Monte Carlo方法 8-1 Monte Carlo方法的基本思想 8-2 Monte Carlo方法的特点 8-3 Monte Carlo方法的基本工具——随机数 8-4 随机变量的抽样 8-4-1 离散型分布随机变量的抽样 8-4-2 连续型分布随机变量的抽样 8-5 Monte Carlo方法在高分子研究中的应用 8-5-1 共聚反应的模拟 8-5-2 高分子邻基反应的模拟 8-5-3 高分子降解的模拟 8-5-4 高分子链构象的模拟 习题 上机作业1 二元共聚物链结构的Monte Carlo模拟 上机作业2 用Monte Carlo方法计算聚乙烯醇的最大缩醛化率 上机作业3 高分子无规降解的Monte Carlo模拟 上机作业4 高分子链构象的Monte Carlo模拟 第九章 定量构效相关分析方法——QSAR 9-1 QSAR方法的基本特点 9-2 用分子连接性指数法进行QSAR研究 9-2-1 分子连接性指数法的特点 9-2-2 分子连接性指数的计算方法 9-2-3 分子连接性指数的修正 9-2-4 分子连接性指数计算示例 9-3 QSAR分析示例 习题 上机作业 建立含氮杂环化合物结构与生物活性之间的关系 第十章 化学结构绘制软件ACD/ChemSketch的应用 10-1 软件的运行环境 10-2 软件的界面及工具按钮 10-3 化学结构3D显示和动画效果 附录 A 化学结构绘制软件ACD/ChemSketch使用说明 B QBASIC语言简介 C 常用QBASIC程序 参考文献

<<计算机在化学化工中的应用>>

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>