

<<计算药物分析>>

图书基本信息

书名：<<计算药物分析>>

13位ISBN编号：9787030172976

10位ISBN编号：7030172973

出版时间：2011-5

出版时间：科学出版社

作者：胡育筑

页数：352

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>

## <<计算药物分析>>

### 内容概要

本书介绍化学计量学的基本内容及其在药学研究和药品检验中的应用方法，包括常用算法、实验数据的处理和误差分析、实验设计和优化方法、药品检验分析方法的验证、化学数据库、聚类分析、模式识别、智能实验室及其在药学和化学中的应用等，章后均附有习题。

附录含Excel电子表格应用方法、MATLAB简介及常用数理统计表。

本书可作为高等学校药学、药物制剂学、制药工程、生物化工、生物技术、中药学等专业的教学用书，也可作为化学、化工、医学、环境等相关专业分析化学课程的教学参考书。

## &lt;&lt;计算药物分析&gt;&gt;

## 书籍目录

前言	第1章 绪论	1.1 分析化学的进展以及与本课程的关系	1.2 计算药物分析的任务、特点和教学方法
第2章 化学中常用的计算方法	2.1 矩阵概念及其基本运算	2.2 线性方程组的求解	2.2.1 高斯列主元消去法
2.2.2 矩阵解法	2.2.3 病态方程组及其判断	2.3 线性回归分析	2.3.1 一元线性回归
2.3.2 多元线性回归	2.4 高次方程和超越方程的求解	2.4.1 迭代法的基本思路	2.4.2 弦截法
2.4.3 牛顿-雷扶生法	2.5 其他常用基本算法	2.5.1 排序和检索	2.5.2 插值
2.5.3 拟合	2.5.4 数值积分法	习题第3章 实验数据的统计分析	3.1 统计分析的基本概念
3.1.1 基本术语	3.1.2 样本的数字特征	3.1.3 统计分析的一般步骤	3.2 实验数据的误差及分布
3.2.1 测试误差的分类和特点	3.2.2 分析测试中的误差传递	3.2.3 误差的正态分布和t分布	3.3 平均值的统计检验
3.3.1 u检验	3.3.2 t检验	3.4 方差的统计分析	3.4.1 两个方差的比较
3.4.2 单因素方差分析	3.4.3 双因素方差分析	3.4.4 回归方程的方差分析	3.4.5 多元逐步回归
3.5 非参数统计分析	3.5.1 $\chi^2$ 检验	3.5.2 中位数及其稳健性	3.5.3 盒图法描述一维数据
3.5.4 秩和统计检验	3.5.5 非参数回归和相关	习题第4章 化学试验设计与优化	4.1 试验中的设计与优化问题
4.1.1 因素、试验指标和试验设计	4.1.2 响应面和试验设计的关系	4.1.3 试验设计的基本原则和步骤	4.1.4 交互效应和单因素设计
4.1.5 试验设计和优化方法的分类	4.2 析因设计	4.2.1 二水平析因设计	4.2.2 不完全析因设计
4.2.3 一般析因设计	4.2.4 关联度分析	4.3 正交设计	4.3.1 正交表及其特点
4.3.2 正交设计方法	4.3.3 正交设计试验的数据处理	4.4 均匀设计	4.4.1 均匀设计表
4.4.2 均匀设计表的特点及应用	4.4.3 均匀设计试验结果的数据处理	4.5 序贯优化法	4.5.1 序贯优化法的特点
4.5.2 黄金分割法	4.5.3 单纯形法	习题第5章 分析测试中的质量保证	5.1 质量管理体系和质量保证
5.1.1 质量保证和质量控制	5.1.2 质量评定技术	5.2 对照品和标准物质	5.2.1 标准物质的研制和不确定度评定
5.2.2 标准物质的均匀性和稳定性试验	5.2.3 标准物质的稳定性试验	5.3 分析采样理论	5.3.1 采样的重要性
5.3.2 采样方法	5.3.3 抽样检验	5.4 分析方法的验证	5.4.1 法定分析方法的验证
5.4.2 药品检验分析方法的验证	5.4.3 药品检验标准方法的验证内容	5.4.4 分析方法验证的统计分析	习题第6章 药学研究中的模式识别技术
6.1 模式识别的基本概念	6.2 数据预处理	6.2.1 遗漏的数据、中心化与比例调整	6.2.2 协方差矩阵与相关矩阵
6.2.3 距离与相似性度量	6.3 聚类分析法	6.3.1 聚类分析的分类	6.3.2 系统聚类法
6.3.3 动态聚类法	6.3.4 模糊聚类法	6.4 降维和显示技术	6.4.1 因子分析技术简介
6.4.2 主成分分析法	6.4.3 图形分类法	6.4.4 其他因子分析方法	6.4.5 非监督模式识别方法的特点
6.5 有监督模式识别方法	6.5.1 贝叶斯判别法	6.5.2 Fisher线性判别分析	6.5.3 线性学习机
6.5.4 K最近邻域判决法	6.5.5 SIMCA分类法	6.6 模式识别在药学中的应用	6.6.1 药物定量构效关系的研究
6.6.2 对化学指纹谱的模式识别	6.6.3 在实验方法优化中的应用	习题第7章 计算分光光度法	7.1 双波长分光光度法
7.1.1 等吸收双波长消去法	7.1.2 系数倍率法	7.2 三波长分光光度法	7.2.1 三波长分光光度法
7.2.2 三波长校正法	7.3 导数光谱法	7.3.1 基本原理	7.3.2 导数光谱的定性方法
7.3.3 导数光谱的定量方法	7.4 多元校正分光光度法	7.4.1 多元线性回归法	7.4.2 因子分析法
7.5 线性规划和非线性规划法	7.5.1 线性规划法	7.5.2 非线性规划法	7.6 差谱技术简介
7.6.1 基本原理	7.6.2 在光谱分析中的应用	习题第8章 计算色谱分析法	8.1 色谱测试中的数据处理技术
8.1.1 概述	8.1.2 常用定性定量方法和谱峰拟合技术	8.2 色谱选择性优化的方法和策略	8.2.1 优化因素
8.2.2 优化指标	8.2.3 优化方法	8.3 色谱分析方法的质量控制	8.3.1 色谱峰纯度的定性
8.3.2 色谱定量方法的质量控制	8.3.3 色谱分析质量的综合评价	8.4 色谱指纹图谱技术及相关计算	8.4.1 标准指纹图谱的建立方法
8.4.2 色谱指纹图谱的测定和校正	8.4.3 指纹图谱相似度的计算	习题第9章 化学模拟和信号处理技术	9.1 化学模拟技术
9.1.1 蒙特卡罗模拟	9.1.2 谱峰实验曲线的拟合	9.1.3 化学反应过程的数字模拟	9.2 分析信号的处理
9.2.1 分析信号的平滑化	9.2.2 多项式卷积平滑法	9.3 傅里叶变换技术	9.3.1 傅里叶变换技术的基本原理
9.3.2 傅里叶变换红外光谱仪	9.4 小波分析简介	9.4.1 小波函数及变换	9.4.2 多分辨信号分解算法
9.4.3 在药物分析中的应用	9.5 信息量技术简介	习题第10章 动力学中的数值计算	10.1 动力学中的数学方法
10.1.1 常微分方程的初等解	10.1.2 常微分方程		

## &lt;&lt;计算药物分析&gt;&gt;

的数值解 10.1.3 拉普拉斯变换 10.2 化学动力学中的数值计算 10.2.1 化学动力学概述 10.2.2 化学动力学中的数值计算 10.3 药物动力学中的数值计算 10.3.1 药物动力学概述 10.3.2 药物动力学模型 10.3.3 药物动力学参数 10.3.4 生物利用度和生物等效性实验的基本方法 10.3.5 药物动力学中的数值计算 10.4 药物的化学稳定性和有效期预测 10.4.1 经典恒温法 10.4.2 线性变温法 10.4.3 自由变温法 习题第11章 计算药物分析新技术及其进展 11.1 数据库、人工智能和专家系统 11.1.1 数据库技术 11.1.2 人工智能和专家系统 11.2 人工神经网络技术 11.2.1 神经网络理论的起源 11.2.2 神经网络理论基础 11.2.3 感知机 11.2.4 误差反向传播网络 11.2.5 在药物分析中的应用 11.3 近红外光谱分析及相关计算 11.3.1 近红外光谱分析简介 11.3.2 近红外光谱分析的定量原理 11.3.3 近红外光谱分析中常用的计算方法 11.3.4 在药学领域中的应用 习题主要参考文献附录附录 Excel电子表格的基本应用方法 附表1-1 常用Excel函数 附表1-2 数据分析工具的主要功能附录 MATLAB简介 附表2-1 常用的工具包及功能 附表2-2 最常用的内部函数 附表2-3 特殊矩阵的建立方法 附表2-4 关系操作符和逻辑运算符 附表2-5 MATLAB常用命令和函数表附录 常用数理统计表 附表3-1 标准正态分布的累积分布表 附表3-2 正态分布数值表 附表3-3 t分布的双侧分位数表 附表3-4 F分布临界值表 附表3-5 X<sup>2</sup>分布数值表 附表3-6 配对比较的秩和检验中丁的临界值表 附表3-7 秩和U检验临界值表 附表3-8 相关系数r的临界值表

## <<计算药物分析>>

### 编辑推荐

《计算药物分析》在吸收目前国内外先进教材的优点，突出药学特色，坚持理论联系实际，介绍化学计量学的基本内容及其在药学研究和药品检验中的应用方法，章后均附有习题。

附录含Excel电子表格应用方法、MATLAB简介及常用数理统计表。

《计算药物分析》可作为药学各专业药物分析方向本科生教材，也可用于研究生教学。

<<计算药物分析>>

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>