

## <<模式识别在化学化工中的应用>>

### 图书基本信息

书名：<<模式识别在化学化工中的应用>>

13位ISBN编号：9787030083937

10位ISBN编号：7030083938

出版时间：2000-9

出版单位：科学分社

作者：陈念贻

页数：323

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>

## <<模式识别在化学化工中的应用>>

### 前言

数据信息采掘和信息融合 (Data Mining and Data Fusion) 是当今信息科学一个新热点。其涵义是综合运用多种算法, 对从多种渠道来的大量数据进行计算机处理, 通过去粗取精、去伪存真、由此及彼、由表及里的信息加工, 抽提有用信息, 发现自然规律。化学、化工是实验科学, 是积存数据的“大户”, 是数据信息采掘和融合技术大有可为的“用武之地”。

它不仅可用于化工生产优化、辅助新产品试制, 而且在分子设计、材料设计、化合物和物系的性质预报等基础研究中也很有用。

此外, 环境保护、地质勘探、医疗诊断和生物信息科学研究中, 都可能利用它打开新局面。

我和我的同事从事化学化工数据信息采掘研究和应用20余年, 我们开发的算法和软件技术, 广泛应用于宝山钢铁公司、南京炼油厂、郑州铝厂等数十家大、中型企业, 取得了很好的效益。

在863高科技项目中, 辅助多种新材料研制取得实效。

与此同时, 我们还将这些算法用于相图计算和物性预报, 开拓了新的研究领域。

近年来, 我们开发的新算法和软件已开始在美国福特公司以及瑞士、新加坡、巴西等国的企业和科研单位推广应用, 并取得效果。

我们编写本书的目的就是希望推动我国更多的化学、化工、冶金等领域的科研、技术人员掌握和运用这一新技术, 为生产和研究工作做出贡献。

基于上述目的, 我们试图将本书编成“学以致用”的书, 不但介绍算法原理和应用成果, 而且能指导读者掌握使用我们的软件。

读者可从因特网免费下载我们软件的演示版, 也可以低价从代销点取得我们软件的简易版。

本书附录载有若干练习题, 读者可利用演示版或简易版针对练习题进行不同程度的上机实习。

如果读者需要, 也可从代销点购买我们的软件正版及其说明书, 将本书与说明书参照阅读, 可收到理论联系实际之效果。

本书附录为读者提供免费下载演示版和购买正版、简易版的网址, 以便读者阅读本书时, 可以边读边上机, 提高学习的兴趣。

本书包括的科学研究成果, 得到过863计划、国家自然科学基金和美国福特公司的资助, 本书的出版得到中国科学院出版基金的支持, 在此一并致谢。

化学、化工的数据信息采掘是一门边缘科学技术, 涉及面很广。

本书虽然是在我们20余年工作基础上编写的, 但也难免有“挂一漏万”之处, 我们欢迎广大读者在阅读、使用过程中, 向我们提出宝贵意见, 以便今后改进。

陈念贻 1999年9月于上海

## <<模式识别在化学化工中的应用>>

### 内容概要

《模式识别在化学化工中的应用》全面介绍了化学、化工中复杂数据信息处理的模式识别方法，以及与之结合的人工神经网络、遗传算法和非线性回归方法，列举了大批实际应用成果，并提供读者上机练习的机会，做到学以致用。

《模式识别在化学化工中的应用》可供化学、化工及相关领域的科研人员和工程技术人员阅读，亦可作为高等学校的教学参考书。

## <<模式识别在化学化工中的应用>>

### 作者简介

陈念贻，中国科学院上海冶金研究所研究员，上海大学化学系计算机化学研究室主任，上海交通大学模式识别研究所兼任研究员。

在计算化学及其应用方面工作多年，发展了一套复杂数据信息采掘的新方法，用于我国化工、炼油、钢铁、汽车制造等的生产优化和新材料研制，效益显著，近年来该方法已在美国、瑞士和新加坡等国推广使用。

## &lt;&lt;模式识别在化学化工中的应用&gt;&gt;

## 书籍目录

《计算机化学化工丛书》序前言第一章 化学化工的复杂数据处理1.1 化学、化工中的几个共性课题1.2 复杂数据处理的困难和对策1.2.1 复杂数据处理的困难1.2.2 复杂数据处理的对策1.3 化学、化工复杂数据处理的意義和价值1.3.1 复杂数据处理是化学科学的一个薄弱环节1.3.2 复杂数据信息采掘是改进化工生产的捷径1.3.3 处理复杂数据必须综合应用多种计算方法1.4 复杂数据信息采掘的信息处理流程参考文献第二章 复杂数据信息采掘的主要方法之一——模式识别2.1 模式识别方法的原理和基本概念2.2 数据文件的标准化2.3 主成分分析及其衍生方法2.3.1 主成分分析的原理及KL变换2.3.2 主成分的特性2.3.3 主成分的贡献率2.3.4 主成分算法步骤2.3.5 限值响应问题2.4 白化变换-线性投影法(LMAP)2.4.1 LMAP的原理2.4.2 LMAP算法步骤2.5 最优判别平面方法2.5.1 ODP的原理2.5.2 讨论2.5.3 ODP算法步骤2.6 偏最小二乘法2.6.1 主成分的NIPALS算法2.6.2 PLS算法步骤和原理2.6.3 PLS的若干性质2.6.4 PLS预报步骤2.6.5 PLS成分数目的确定2.7 非线性映照2.7.1 线性映照的局限性2.7.2 NLM原理2.7.3 PCA-NLM、LMAP-NLM和PLS-NLM2.7.4 NLM的计算步骤2.8 相似分析法2.8.1 SIMCA的基本原理2.8.2 SIMCA信息分析2.8.3 SIMCA计算步骤2.9 KNN法及其衍生方法2.10 聚类分析方法2.10.1 分级聚类方法2.10.2 最小生成树法2.10.3 最短生成路径法2.10.4 判别聚类的势函数法2.11 模式识别的逆映照方法2.11.1 线性逆映照(LIM)2.11.2 非线性逆映照(NLIM)参考文献第三章 复杂数据信息采掘的主要方法之二——人工神经网络3.1 人工神经网络模型3.1.1 人工神经网络的节点3.1.2 人工神经网络的拓扑结构3.1.3 人工神经网络的运行3.1.4 人工神经网络的性质和特点3.1.5 人工神经网络的学习与训练3.2 误差逆传播神经网络3.2.1 误差逆传播(BP)学习算法的提出3.2.2 BP网络结构与学习规则3.2.3 BP算法学习规则的数学推导3.2.4 BP网络的简单评价3.3 多层前馈网络的SABP算法3.3.1 传统BP算法主要缺点及改进3.3.2 模拟退火算法3.3.3 三层前馈网络SABP算法原理3.4 自组织映射神经网络3.4.1 自组织特征映射3.4.2 算法设计3.5 人工神经网络结果的二维图象显示参考文献第四章 复杂数据信息采掘的主要方法之三——遗传算法4.1 演化算法4.1.1 概述4.1.2 自组织、自适应和自学习性(智能性)4.1.3 本质并行性4.2 遗传算法概述4.2.1 基本概念4.2.2 模式定理4.3 遗传算法设计4.3.1 遗传算法的基本结构4.3.2 设计遗传算法的基本步骤4.3.3 编码方案4.3.4 适应度4.3.5 选择策略4.3.6 遗传算子设计参考文献第五章 数据文件的建立、评估和数据类型考查5.1 数据文件的格式要求5.1.1 格式和要求5.1.2 多目标问题5.1.3 预加工5.2 数据文件的评估原理5.2.1 超多面体判据5.2.2 KNN留一法判据5.2.3 回归法判据5.3 数据评估的做法和标准5.3.1 超多面体判据5.3.2 KNN留一法的判据5.3.3 回归法的判据5.4 数据结构的初步分析5.4.1 近邻分析(nearestneighboranalysis)5.4.2 拓扑分析(topologicaltypeanalysis)5.4.3 近线性分析(near-lineariyanalysis)5.4.4 时间序列分析(timeseriesanalysis)5.4.5 Fisher指数分析(fisherindexanalysis)参考文献第六章 数据的相关分析方法6.1 相关分析的价值和局限性6.2 单因子相关分析和t-f图6.3 双因子分析和f-f图6.4 三因子分析及三维图的显示6.5 数据变换与相关分析相结合的算法6.6 f-f图的分级投影方法参考文献第七章 数据文件的样本筛选7.1 数据文件可分性不好的三个原因7.2 子空间局部考查7.3 添加自变量影响的考查7.4 离群点的删除参考文献第八章 数据文件的自变量筛选8.1 自变量筛选的意义8.2 自变量筛选的多义性8.3 相关分析的应用和局限性8.4 有关变量的共线性检查8.5 近线性数据文件的自变量筛选8.6 偏置型数据集的自变量筛选8.7 包容型数据集的自变量筛选8.8 子空间局部考查与自变量筛选8.9 自变量筛选必须结合专业知识进行参考文献第九章 数据文件的实用建模9.1 实用建模的要求和目标9.2 分类判别问题的超多面体模型9.3 最佳投影-自动矩形-分级投影方法9.4 增补测试样本的算法及应用9.5 实用建模中外推的方法9.6 实用建模中的回归方法9.7 人工神经网络的实用建模9.8 模式识别与人工神经网络相结合的方法9.9 限值响应问题的实用建模9.10 多目标优化模型的建立参考文献第十章 原子参数和分子参数10.1 原子和分子参数选择的原理10.2 原子的价电子数( $z$ )10.3 原子的电离势( $I$ )10.4 原子半径和离子半径( $R$ )10.5 电负性10.6 分子的拓扑参数和原子集团参数10.7 离子键化合物及物系的物性表征参数10.8 金属键化合物及物系的物性表征参数10.9 共价化合物及物系的物性表征参数参考文献第十一章 数据信息采掘在物性预报中的应用11.1 原子-分子参数-数据信息采掘方法11.2 若干热力学性质的计算机预报11.2.1 化合物熔点的计算机预报11.2.2 化合物包晶分解温度的计算机预报11.2.3 液态合金混合熵的计算机预报11.3 若干物理性质的计算机预报参考文献第十二章 数据信息采掘在相图计算中的应用12.1 相图计算的意义和相图计算的原子参数-模式识别方法12.2 原子参数-模式识别方法概述12.3 二元

## &lt;&lt;模式识别在化学化工中的应用&gt;&gt;

合金相图中间相的形成规律12.4 原子参数与三元合金相形成的关系——取代对的概念12.5 非过渡金属间三元化合物的形成规律12.6 过渡金属间三元化合物的形成规律12.7 过渡金属和非过渡金属间三元化合物的形成规律12.8 氧化物系相图中的中间化合物的形成规律12.9 二元液态合金的相互作用系数和液相分层的计算机预报12.10 相图中间相熔化类型的判别12.11 三元相图液相面的计算机预报参考文献第十三章 数据信息采掘在新材料、新产品研制中的应用13.1 材料设计和分子设计的意义13.2 材料设计专家系统13.3 材料设计专家系统用于已有数据的加工13.4 材料设计专家系统辅助实验探索13.5 材料设计辅助材料智能加工参考文献第十四章 数据信息采掘在化工生产优化中的应用14.1 化工过程复杂反应体系的量纲分析14.2 数据信息采掘和优化建模在炼油工业中的应用14.3 数据信息采掘在高分子材料生产优化中的应用14.4 数据信息采掘在染料色光控制中的应用14.5 数据信息采掘在醋酸乙烯催化合成中的应用14.6 数据信息采掘用于提高有机合成产率14.7 数据信息采掘在化工环保中的应用14.8 数据信息采掘在产品检验自动化中的应用14.9 数据信息采掘在化工设备防腐方面的应用14.10 数据信息采掘在其他化工过程中的应用参考文献第十五章 数据信息采掘在冶金生产优化中的应用15.1 炼焦配煤的优化15.2 模式识别在降低焦比中的应用15.3 模式识别方法分析炼钢转炉炉龄的影响因素15.4 连铸坯表面质量的模式识别分析15.5 模式识别在合金钢生产中的应用15.6 联合法生产氧化铝净溶出率的模式识别优化15.7 烧结法碳酸化分解终点的优化控制15.8 电解铝电流效率的优化模型15.9 电解铝阳极导电合金成分优化15.10 钢铁表面氮化过程的质量优化15.11 汽车零部件光亮镀铬的质量优化15.12 热法炼镁质量与配料比的关系参考文献附录A 为初学者按“向导方式”上机实习的操作指南B 上机实习C 附表

<<模式识别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>