

## <<MATLAB与化学>>

### 图书基本信息

书名：<<MATLAB与化学>>

13位ISBN编号：9787122041326

10位ISBN编号：7122041328

出版时间：2009-1

出版时间：郑冀鲁 化学工业出版社 (2009-01出版)

作者：郑冀鲁

页数：178

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>



## <<MATLAB与化学>>

### 内容概要

讲述了如何利用MATLAB解决化学工作者遇到的作图、计算与数据处理问题。

内容包括MATLAB简介与简单计算、MATLAB作图、非线性方程求解、线性方程组求解、常微分方程与方程组的求解、插值、数值积分与数值微分、最优化、非线性方程组求解、曲线拟合、统计分析十一个专题。

《MATLAB与化学：作图、计算与数据处理》一方面讲述了解决上述问题的基本原理，使得读者做到知其然亦知其所以然，另一方面讲述如何使用MATLAB中的各种函数来解决上述问题而不需要读者自行编写程序代码。

此外在每个专题中均附带若干实例，实例中的问题长期困扰着广大化学工作者，而《MATLAB与化学：作图、计算与数据处理》给出了这些问题较为圆满的解决方案。

## 书籍目录

第1章 MATLAB 简介与简单计算1.1 MATLAB 的安装1.2 一个简单的计算实例1.3 矩阵与向量的定义1.4 矩阵合并1.5 引用矩阵中的元素与矩阵块1.6 矩阵元素与矩阵块的赋值1.7 矩阵运算与函数1.8 MATLAB 的结构化程序设计与流程控制语句1.9 MATLAB 的函数文件与脚本文件1.10 MATLAB 的函数句柄1.11 MATLAB 的复数、数据精度与常数1.12 使用 MATLAB 进行计算的一些注意事项1.13 利用 MATLAB 进行简单计算1.13.1 反应的标准摩尔焓变1.13.2 求解反应平衡常数第2章 MATLAB 作图2.1 曲线图2.1.1 基态氢原子径向分布函数图2.1.2 草酸各种存在形式的分布曲线2.2 折线图2.2.1 热解产品的产率与温度关系2.2.2 滴定曲线2.3 二元函数曲面图2.3.1 中压条件下氮气的  $P=f(v,T)$  曲面图2.3.2 水烃比和总压对乙苯转化率的影响2.4 隐函数作图2.4.1 中压条件下氮气的  $v=f(P,T)$ 2.4.2 不同过程膨胀功的比较2.5 饼图和柱形图2.5.1 我国 2002 年常规能源构成2.5.2 地壳中分布最广的 5 种元素的原子含量2.6 MATLAB 的图形格式第3章 计算——非线性方程与微分方程3.1 非线性方程的求解3.1.1 不动点迭代法与维格斯担 (Wegstein) 3.1.2 对分法3.1.3 roots 函数3.2 常微分方程的初值问题3.2.1 乙炔加氢3.2.2 生产乙酸乙酯3.3 一阶常微分方程组的初值问题3.3.1 平行反应各物质浓度与时间的关系曲线3.3.2 串联反应各物质浓度与时间的关系曲线第4章 计算——代数方程组4.1 线性方程的求解4.1.1 Gauss 主元消去法4.1.2 LU 分解4.1.3 病态现象4.1.4 矛盾线性方程组4.1.5 齐次线性方程组的通解4.2 最优化4.2.1 闭区间内单峰连续函数的最小值点4.2.2 函数在  $n$  维矩形闭区域内的最大值点4.2.3 平方和形式的函数的最小值点4.3 非线性方程组的求解4.3.1 复杂反应体系的化学平衡计算4.3.2  $H_3PO_4$  溶液中各种离子浓度的大小第5章 数据处理5.1 插值问题的提法5.1.1 拉格朗日插值5.1.2 分段低次插值5.1.3 山丘基样条插值5.2 数值微分与数值积分5.2.1 具有明确析式的函数的微分与积分5.2.2 由离散数据点表达的函数的微分或积分5.3 最小二乘法5.3.1 线性最小二乘法5.3.2 非线性最小二乘问题5.4 基于统计学的数据处理方法5.4.1 数据点的平均值、标准差与置信区间5.4.2 假设检验参考文献

章节摘录

插图：

## <<MATLAB与化学>>

### 编辑推荐

《MATLAB与化学:作图、计算与数据处理》可作为化学专业教学、科研人员进行作图、化学计算和数据处理的参考书,也可作为化学及相关专业学生的参考材料。

## <<MATLAB与化学>>

### 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>