

<<复杂体系仪器分析>>

图书基本信息

书名：<<复杂体系仪器分析>>

13位ISBN编号：9787122122551

10位ISBN编号：7122122557

出版时间：2012-3

出版时间：化学工业出版社

作者：梁逸曾 等著

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>

<<复杂体系仪器分析>>

前言

《复杂体系仪器分析——白、灰、黑分析体系及其多变量解析方法》一书即将出版，笔者有幸受邀为该书作序。

该书作者围绕运用仪器分析手段进行复杂多组分体系分析这一现代分析化学实践中具代表性的核心问题，阐述这种分析工作需要用到的相关化学计量学多变量解析方法的理论基础，以及在实际应用中可能遇到问题的解决途径。

从该书作者选定的题目，读者能感受到分析化学学科已经发展到一个前所未有的新水平：针对任何复杂样本对象，为了解决获取有关其化学组成和结构信息的问题，可以运用以各种谱学理论为基础构建的现代分析测试仪器，加上色谱等现代分离手段及各种联用组合，将与化学组成和结构相关的物理化学特性转化为分析讯号，再借化学计量学多变量分析方法解析获得的分析讯号，使其还原为相关化学组成和结构信息。

梁逸曾教授早年根据分析体系的复杂程度将其区分为白色、灰色与黑色三类。

根据作者这一分类，可以为不同体系选择最佳的分析仪器与化学计量学算法。

书中阐述的化学计量学方法基本上都具有通用性，即一种方法及其与其他方法的组合可适用于多种分析仪器及相关联用组合。

值得指出的是，该书收入的方法中包含了作者建立的不少重要方法。

例如直观推导式演进特征投影法（Heuristic Evolving Latent Projections, HELP），就是作者提出的能显著提高联用色谱分析效率的优秀化学计量学方法。

经典分析化学强调样品中各组分的完全分离，这虽能使随后的测定变得较易进行，但实现完全分离代价很高。

完全不做化学分离的“绿色”分析方法或许最为理想，化学计量学目前尚只能为待测组分数相对较少的情况实现这种无化学分离的“绿色”分析。

还在3年前，化学计量学奠基人B.Kowalski教授就曾强调要探索化学、物理分离与数学分辨之间的合理平衡。

他指出，完全的色谱分离实际上往往并不需要，因为未分离完全的峰可借助计算机分辨。

该书作者提出的HELP算法出色地实现了Kowalski早年的设想。

该书从理论原理到实际应用较全面地综合阐述了在用仪器分析手段分析复杂试样时用到的各类化学计量方法，这为读者提供了解决分析化学中的实际疑难问题时有用的参考指南。

为了使读者易于理解本书涉及的部分较艰深的数学原理，在末章提供了简明的统计学和应用数学基础知识介绍。

该书第一作者邀请长期从事化学计量学基础研究的中南大学数学学院许青松教授共同写作本书，这进一步保证了本书在数学表述方面的严谨性与高水平。

创造“chemometrics”一词的S.Wold教授曾指出，化学计量学的主要特征是将化学问题构建为可以通过数学关系表达的数学模型。

该书作者在书中提到，学习现代分析化学需要具备较经典分析化学更高深的数学基础。

这是现代分析化学发展一个可喜的趋势。

康德曾有一句名言：“在自然科学的各门分支中，只有那些能以数学表述的分支，才是真正的科学。”

该书以严谨的数学语言阐述的具有通用性的化学计量学方法，构成分析化学第二层次（即分析化学区别于化学其他分支学科）的基础理论的重要组成部分。

该书的出版，对丰富分析化学基础理论这一重要的学科基础建设工作做出了有益的贡献。

作者在运用化学计量学方法研究中药复杂分析体系的色谱指纹图谱与质量控制、近红外光谱用于模式识别、代谢组学高通量数据定性定量分析、生物标记物的发现、包括中药在内的代谢组学研究、蛋白组学高通量分析数据用于蛋白质定性分析等诸多生命科学前沿领域积累了丰富的经验，这使该书的应用篇具有很高的实用参考价值。

期望该书的出版能吸引更多读者关注这些新兴的分析化学前沿研究领域，使分析化学学科为国民经济的发展与人民生活品质的提高做出更大的贡献。

<<复杂体系仪器分析>>

211年8月于湖南大学

<<复杂体系仪器分析>>

内容概要

全书分为理论方法篇与应用篇两个部分，主要讨论了复杂多组分体系的直接仪器分析的化学计量学方法及其实际应用问题。

内容主要包括如何采用不同的化学计量学方法，分别对分析化学中频繁碰到的多种不同性质的白、灰、黑复杂多组分体系所得的不同分析仪器数据，进行解析和各种有用化学信息提取的理论与实际应用问题。

在应用方面，主要是对中药复杂分析体系的色谱指纹图谱与质量控制，近红外光谱应用于广义灰色复杂体系的分析，代谢组学高通量分析及其生物标记物的确定，蛋白组学的仪器分析及其生物信息学解析方法的讨论。

另外还简要介绍了统计学和应用数学的相关基础知识。

此书可作为从事化学计量学学习与研究的分析工作者的参考书，亦可作为分析化学专业高年级本科生和研究生的教学参考书。

<<复杂体系仪器分析>>

书籍目录

第一部分 理论访求篇

第一章 概论

第一节 现代分析化学面临的机遇与挑战

第二节 化学计量学的多变量解析思路

第三节 化学计量学中的软模型和硬模型

参考文献

第二章 分析化学中的几个理论思考问题

第一节 分析化学的信息理论

第二节 张量校正理论

第三节 黑、白、灰多组分体系及仪器分析策略

参考文献

第三章 白色分析体系的多元校正方法

第一节 直接校正方法

一、多元线性回归方法

二、Kalman滤波法

三、加权最小二乘回归法

第二节 间接校正方法

一、K—矩阵法

二、P—矩阵法

三、主成分回归法

四、偏最小二乘法

第三节 通用标准加入法

第四节 广义内标法

第五节 非线性体系的人工神经网络校正方法

第六节 病态体系的岭回归法估计方法

第七节 多元校正的分析化学品质因数和可靠性分析

参考文献

第四章 灰色分析体系的多元校正方法

第一节 矢量校正方法

一、投影算法和多元校正模型的检验

二、标准加入迭代目标转换因子分析法

三、自适应Kalman滤波法

四、局部曲线拟合法

第二节 矩阵校正方法

一、秩消失因子分析法

二、广义秩消失因子分析法

三、残差双线性分解法

四、约束背景双线性分解法

参考文献

第五章 黑色分析体系的多元分辨方法

第一节 基于主成分分析的体系组分数确定方法

一、误差扰动下的协方差阵特征值变化限制

二、因子分析的误差理论

三、主因子数确定的几种方法

第二节 矩阵分辨方法

<<复杂体系仪器分析>>

- 一、自模式曲线分辨法
- 二、迭代目标转换因子分析法
- 三、渐进因子分析法及其相关方法
- 四、窗口因子分析法
- 五、盲观推导式演进特征投影法
- 六、正交投影分辨法
- 七、子窗口因子分析法
- 八、二维色谱的一阶微分矩阵顺序秩分析方法

第三节 张量分辨方法

- 一、投影旋转因子分析法
- 二、广义秩消失因子分析法

参考文献

第六章 广义灰色分析体系的多元校正模型

第一节 近红外光谱与广义灰色分析体系

第二部分 应用篇

<<复杂体系仪器分析>>

章节摘录

版权页：插图：正如在第一章讨论的分析化学的社会需求和挑战而面临新任务的情况，从20世纪80年代起，社会提出的新需求和新挑战大都与复杂多组分体系的分析分不开，如有机微量分析、物种鉴别分析（色谱分析、色谱指纹图谱技术）、基因与蛋白分析（毛细管电泳、液相色谱与串连质谱等、蛋白组学）、无损分析（近红外光谱为其代表）、高通量分析（蛋白组学、代谢组学、中药植物药分析、香精香料分析等），正因为这些需求的提出，对复杂样本多变量数据进行模式分析和模式识别解析，实际可看成是一种直接对样本进行定性分析的要求，也就成为了分析化学的一个新任务。

如何更有效地使用我们所拥有的分析仪器，并有效地从这些复杂的化学量测工具和手段中获取整体性表征样本特性的方法，以及如何对它们进行模式分析和识别，从而获取其他与样本相关的各种有用的化学和生物信息，正是本章将要讨论的问题。

复杂分析体系的多变量数据，如进行蛋白组学研究的二维电泳数据、芯片分析数据，代谢组学研究中的大量样本的NMR多变量数据，GC-MS、HPLC-MS/MS分析数据、基因组学中的芯片分析数据，中药色谱指纹图谱数据、香精香料质量控制与指纹分析数据等，不但所得数据量大，更为重要的是如何从中获取样本中化学家们和生物学家们所需的信息，如何对它们直接进行模式分析和识别，并在此基础上，进一步找到生物标志物（Biomarker）或生物标志模式（Biomarker Patterns），为基因组学、代谢组学和蛋白组学的研究提供进一步的科学依据，都成为目前分析化学中对样本直接进行定性分析需要关注的新问题。

针对这些问题，本章将就复杂分析体系的多变量分析数据的预处理方法、数据的模式识别及模式分析的各种方法，以及如何进一步获取生物标志物或生物标志模式来逐步进行必要介绍。

实际上，多变量数据的模式分析与模式识别一直是化学计量学研究中的一个十分重要的内容，它从化学量测数据（包括由多元校正和多元分辨取得的定性定量成分数据）出发，进一步揭示物质的隐含性质，为分析化学家提供了十分有用的决策性信息。

模式分析与模式识别的计算过程总的说来可有如下步骤：根据实验得来的一批多变量数据，构成训练点集，参照化学（或生物、物理）模型或经验规律提出一批特征量，在此基础上，进一步进行特征抽取和必要的的数据预处理，以求得合适的特征量，张成模式空间或特征空间，继通过机器学习的方法（模式分析与识别）进行训练和分类，并采用相应办法对所得模式进行校验，以确定模型的可用性和可用范围，以得到根据训练或分类所得的模式判据，即可对未知样本进行分析和判别（或称计算机预报）。

此过程可用如图7-1所示的框图表出。

<<复杂体系仪器分析>>

编辑推荐

《复杂体系仪器分析:白、灰、黑分析体系及其多变量解析方法》由国家科学技术学术著作出版基金资助出版。

<<复杂体系仪器分析>>

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>