1. Record Nr. UNINA9910467855803321 Autore Reh Eckhard Titolo Chemometrie: Grundlagen der Statistik, Numerischen Mathematik und Software Anwendungen in der Chemie / / Eckhard Reh Pubbl/distr/stampa Berlin, [Germany];; Boston, [Massachusetts]:,: De Gruyter,, 2017 ©2017 **ISBN** 3-11-045107-7 3-11-045103-4 Descrizione fisica 1 online resource (230 pages): illustrations, tables, graphs, charts 543.0072 Disciplina Soggetti Chemometrics Electronic books. Lingua di pubblicazione Inglese **Formato** Materiale a stampa Monografia Livello bibliografico Includes bibliographical references at the end of each chapters and Nota di bibliografia index. Nota di contenuto Frontmatter -- Vorwort -- Inhalt -- 1 Grundlagen der Chemometrie --2 Statistische Parameter und Prüfverfahren -- 3 Versuchsplanung, Prozessoptimierung -- 4 Univariate Regression, Kalibration -- 5 Analyse von Messreihen -- 6 Signaldekonvolution -- 7 Mustererkennung, Clusteranalyse -- 8 Multivariate Kalibration -- 9 Softwareanwendung -- A Anhang -- Abkürzungen --Stichwortverzeichnis Sommario/riassunto Chemometrie verfolgt das Ziel, ein Werk bereitzustellen, das auch Nicht-Spezialisten die Grundlagen der Chemometrie erschließt. So soll ihr Einsatz in diversen Disziplinen der Chemie, sowie die Anwendung der numerischen Mathematik und Informatik verbessert werden. Dabei achtet der Autor bei Abhandlung der Theorie bewusst darauf, die Themen auf das Wesentliche zu beschränken. Auf historische Entwicklungen, alternative Ansätze und Algorithmen wurde teilweise verzichtet, um etablierte und leistungsfähige Wege, Konzepte umso eingängiger zu präsentieren. Als Besonderheit werden für diverse Teilaspekte beispielhaft Anwendungen explizit vorgestellt, um anspruchsvolle Theorien, z.B. aus der linearen Algebra, ohne Hilfsmittel

anwenden zu können. Für alle Themen werden jeweils zwei Ansätze aufgezeigt. Zum Einen werden diverse, kommerzielle Software-Pakete

vorgestellt, die explizit für die jeweilige Thematik konzipiert sind. Zum Anderen wird, soweit wie möglich, das etablierte und kostenfreie Statistik-Paket R genutzt. Dieses Buch wendet sich insbesondere an Chemiker in der Industrie, die für reale Aufgaben chemometrische Ansätze nutzen wollen.