

1. Record Nr.	UNINA9910526400603321
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
Disciplina	543.0072
Soggetti	Chemometrics
Lingua di pubblicazione	Inglese
Formato	Materiale a stampa
Livello bibliografico	Monografia
Nota di bibliografia	Includes bibliographical references at the end of each chapters and 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.
