

# VU Research Portal

## **Separable nonlinear models: theory, implementation and applications in physics and chemistry**

Mullen, K.M.

2008

### **document version**

Publisher's PDF, also known as Version of record

[Link to publication in VU Research Portal](#)

### **citation for published version (APA)**

Mullen, K. M. (2008). *Separable nonlinear models: theory, implementation and applications in physics and chemistry*. [PhD-Thesis - Research and graduation internal, Vrije Universiteit Amsterdam].

### **General rights**

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain
- You may freely distribute the URL identifying the publication in the public portal

### **Take down policy**

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

### **E-mail address:**

[vuresearchportal.ub@vu.nl](mailto:vuresearchportal.ub@vu.nl)

## ABSTRACT

Scheidbare niet-lineaire modellen: theorie,  
implementatie en toepassingen in natuur- en scheikunde

**Katharine M. Mullen**

Dit proefschrift behandelt scheidbare niet-lineaire modellen met additieve Gaussische witte ruis en applicaties daarvan in de natuur- en scheikunde. Daarbij wordt het variabele projectie algoritme gebruikt om zulke modellen met kleinste kwadraten criteria te fitten aan meerdimensionale data. Er zijn uitbreidingen van het variabele projectie ontwikkeld om de conditioneel lineaire parameters te beperken, samen met methodologie om de precisie van de parameters te schatten. Software om de scheidbare niet-lineaire modellen onder de kleinste kwadraten conditie aan data uit de natuur- en scheikunde te fitten is geïmplementeerd als het pakket TIMP voor de R taal en omgeving voor computationele statistiek. Toepassingen van scheidbare niet-lineaire modellen op meerdimensionale data uit de spectroscopie, tijdsopgeloste microscopie en tijdsopgeloste massaspectrometrie zijn uitgebreid onderzocht.