

## **AK Chemometrik und Qualitätssicherung der GDCh-Fachgruppe Analytische Chemie Jahresbericht 2024**

Die Anzahl der Mitglieder ist 2024 konstant geblieben. Mit Stand 01.01.2025 hat der AK Chemometrik und Qualitätssicherung, wie im Vorjahr, 249 Mitglieder.

Neben dem neu gewählten Vorstand beteiligte sich 2024 Marcel Dahms als ständiger Gast sowohl an den Vorstandstreffen als auch in mehreren Taskforces und bei der Organisation des Doktorandenseminars. Der Vorstand des AK traf sich regelmäßig auf insgesamt acht Online-Meetings und am 09.08.2024 zu einer Klausurtagung am Julius Kühn-Institut (JKI) Berlin. Im Mittelpunkt standen hier vor allem die Festlegung der Finanzstrategie, die Besprechung von Datenschutzrichtlinien und die Planung von zukünftigen Veranstaltungen für 2025 wie beispielsweise des Doktorandenseminars und eines Workshops in Form eines Thementages.

Außerdem setzten die Taskforces „Lehre“ und „Leitlinien“ ihre im Vorjahr aufgenommenen Aktivitäten in 2024 fort. Zusätzlich wurden die Aufgaben der Taskforce „Webseite“ erweitert, so dass es sich nun um die Taskforce „Öffentlichkeitsarbeit“ handelt. Zu den Aufgaben dieser Taskforce zählt die Pflege der Homepages des AK genauso wie die Erstellung von Webseiten für vom AK organisierte Veranstaltungen. Für den AK wurde ein eigenes Logo in Auftrag gegeben. Das Logo steht in offenen und flächigen Varianten, nur als Symbol oder mit Namen des AK in Deutsch oder Englisch zur Verfügung.



AK Chemometrik &  
Qualitätssicherung



Working Group Chemometrics  
& Quality Assurance

Es kam erstmals auf der Analytica Conference zum Einsatz und wird seitdem bei der Gestaltung von Folien und Werbematerialien sowie Veranstaltungen verwendet. Des Weiteren hat der Arbeitskreis zur einfacheren Durchführung von eigenen Veranstaltungen Tassen angeschafft, die darüber hinaus als Aufmerksamkeit für Gastredner vorgesehen sind. Diese tragen ebenfalls das neu kreierte Logo.

Die Mitglieder der Taskforce „Lehre“ organisierten vom 31.07. - 02.08.2024 an der Hochschule Mannheim das Doktorandenseminar des AK Chemometrik und Qualitätssicherung, mit Vorlesungen von Philipp Weller (Hochschule Mannheim) über “Machine learning in volatilomics - principles, examples and perspectives” und Hadi Parastar (Sharif University of Technology, Tehran) zu “MCR in Gas Chromatography for qualitative and quantitative analysis”, sowie Robin Legner als Gastredner vom AK PAT zu “MCR in Gas Chromatography for qualitative and quantitative analysis”.

In Verbindung mit diesem Doktorandenseminar wurde die jährliche Mitgliederversammlung des AK in einem hybriden Format am 31.07.2024 durchgeführt. Die wichtigsten Tagesordnungspunkte umfassten neben dem Bericht über die Aktivitäten im letzten Jahr die Vorstellung des neuen Vorstands sowie die strategischen Ziele für die neue Amtsperiode. Über die geplanten Veranstaltungen wie Doktorandenseminar und Workshops sollen Weiterbildungsangebote für „Anfänger“ und „Fortgeschrittene“ zur Verfügung gestellt werden und über die Einladung externer Referenten die nationale und internationale Vernetzung auf dem Gebiet der Chemometrie und Qualitätssicherung befördert werden.

Ebenfalls im Rahmen der Taskforce Lehre verfassten S. Seifert und M. Dahms einen Bericht für den Bereich Chemometrie, der als Teil des Trendberichts Analytische Chemie im Heft April 2024 in den "Nachrichten aus der Chemie" erschien.

Die Task-Force „Leitlinien“ setzt sich seit April 2024 aus sieben festen Mitgliedern des AK zusammen und wurde von ebenso vielen Gästen besucht. Nach einer Sondierungsphase im Zeitraum November 2023 – April 2024 wurde im Rahmen mehrerer Online-Treffen entschieden, dass eine Guideline zum Thema „Multivariate Kalibrierung für die Spektroskopie“ erarbeitet werden soll. Im Rahmen eines Online-Treffens erfolgte ebenfalls die Kontaktaufnahme zu Eurachem über die Einladung des deutschen EUROLAB Vertreters, Jan Sunderkötter. Auf weiteren Online-Treffen und einem Präsenztreffen am 16.10.2024 an der BAM (Berlin) wurden weitere Details zu Inhalt und Struktur einer entsprechenden Guideline diskutiert.

Weitere Aktivitäten des AK umfassten Beiträge auf Konferenzen und Veranstaltungen:

- C. Beleites hielt auf dem Doktorandenseminar des AK PAT am 13. März einen Vortrag über Probenahme.
- Im Rahmen der Analytica Conference in München wurde durch C. Beleites und M. Dahms eine Session (10. April) zu Robustheit und Kalibriertransfer organisiert und betreut. Die Session war sehr gut besucht mit etwa 50 Zuhörern. Es sprachen J.-M. Roger (INRAE) über Calibration transfer and domain adaptation for spectrometry, Y. Monakhova (FH Aachen) zu Transfer of multivariate regression models between IR and NIR instruments: application to electronic cigarettes, P. Esseiva (Uni Lausanne) zu Deploying Portable NIR Devices for Illicit Drug Analysis: Ensuring Accuracy from Model Development to Calibration Transfer sowie R. T. Freire (BASF) „Chemometrics in BASF: Challenges and Opportunities in Industrial Applications“.
- Das Colloquium Chemicum der FFCh (Fachgruppe der freiberuflichen Chemiker und Inhaber freier unabhängiger Laboratorien) fand am 17. - 18. Oktober als Hybridveranstaltung am Julius Kühn-Institut in Berlin und online statt. Unter dem Motto „Daten lernen laufen“ wurden durch den AK Chemometrik Vorträge organisiert zu den Themen „Einführung in die Chemometrie – und ein selbstentwickelter Probenteiler“ (C. Beleites), „Über die Kommunikation von Risiken“ (F. Müller, BfR), „Fairness in der KI“ (C. Kern, LMU München), „Das Management von Forschungsdaten“ (N. Tron, JKI) und „Datenanalyse von NIR-Spektren“ (M. Dahms).

Vorsitz: Dr. Claudia Beleites, Chemometrix GmbH, Wölfersheim

stellv. Vorsitz: Prof. Stephan Seifert, Universität Hamburg

Schriftführung: Joscha Christmann, Hochschule Mannheim

Beisitz: Dr. Andrea Paul, BAM Bundesanstalt für Materialforschung, Berlin

Gast: Marcel Dahms, Light:Guard GmbH, Dresden