

AK Chemometrik und Qualitätssicherung Jahresbericht 2013

Der Arbeitskreis Chemometrik und Qualitätssicherung hat derzeit 190 Mitglieder (Stand: 01.11.2013). Mit 16 neuen Mitglieder und keinem Austritt hat der Mitgliederstand im Laufe des Berichtsjahres erneut leicht zugenommen.

Am Rande der interdisziplinären Doktorandentagung im Februar in Berlin fand die Vorstandssitzung statt. Beschlossen wurde dabei, die Mitglieder durch eine zentrale e-mail auf aktuelle Tagungen mit Schwerpunkten Chemometrik und Qualitätssicherung aufmerksam zu machen. Ein erster Versand an alle Mitglieder des AK fand dazu Ende April statt. Ein zweiter Newsletter steht noch aus.

Die geplante Mitgliederversammlung auf der Anakon 2013, über die ebenfalls bei der Sitzung diskutiert wurde, musste ausfallen, da der 1. Vorsitzende des AK kurzfristig erkrankt war. Per e-mail wurden die AK – Mitglieder über den Stand der Aktivitäten im Arbeitskreis informiert. Die Anfrage des Vorstandes an alle Mitglieder des Arbeitskreises: „Welche weiteren Aktivitäten würden die Mitglieder im Rahmen des Arbeitskreises begrüßen und wie können Mitglieder und Vorstand diese gemeinsam realisieren?“ führte zu keinen wesentlichen, neuen Erkenntnissen mit Bezug zu weiteren oder anderen Aktivitäten. Um den Bekanntheitsgrad des Arbeitskreises zu erhöhen, erfolgte die Verteilung des in 2012 maßgeblich durch Dr. von Frese erarbeiteten Flyer im Mitteilungsblatt der Fachgruppe Analytischen Chemie der GDCh.

Der interdisziplinäre Charakter der Chemometrik fand seinen organisatorischen Ausdruck in der bewährten Zusammenarbeit zwischen den AK Chemometrik und Qualitätssicherung, Chemo- und Biosensoren, Elektrochemische Analysemethoden sowie Prozessanalytik in der Fachgruppe Analytische Chemie und dem Ausschuss für Qualitätsmanagement von Eurolab/D. Nach dem erfolgreichen Start im Jahr 2007 wurde sich an der 7. interdisziplinären Doktorandentagung vom 24. – 26.02.2013 in Berlin beteiligt. Die auch fachlich sehr guten Vorträge sowie an den anschaulichen Posterpräsentationen ergaben sich eine Reihe von Gesprächen und Diskussionen u. a. auch zur Nutzung chemometrischer Methoden bei der Versuchsplanung bis hin zu Aus- und Bewertung. Der von PD Dr. v. Tümping gehaltene Einführungsvortrag zum Thema: "Qualitätssicherung im Labor" gab dabei zusätzlich noch den Anstoß, sich mit Chemometrik im analytischen Alltag auseinander zu setzen. Durch den Abschlussvortrag von Dr. von Frese zum Thema: "Chemometrie in der Praxis. Ein Streifzug durch industrielle Anwendungen" konnte den Zuhörern vermittelt werden, dass chemometrische Methoden neben der Anwendung im wissenschaftlichen Bereich auch in der Industrie nicht mehr wegzudenken sind. Der Vorstand des Arbeitskreises dankt in diesem Zusammenhang der „BAM“-Mannschaft vom AK Prozessanalytik insbesondere PD Dr. M. Maiwald für die sehr gute Vorbereitung und Durchführung der Doktorandentagung. Die nächste Doktorandentagung ist für den Februar 2014 erneut in Berlin geplant. Interessierte Doktorandinnen und Doktoranden sind zur Teilnahme aufgerufen. Detaillierte Informationen werden auf den Internetseiten der AK veröffentlicht.

Im März 2013 fand in Zusammenarbeit mit dem DIN-Unterausschuss Chemometrie (Obmann: Dr. M. Winterstein, Wessling Laboratorien Oppin) ein Diskusstreffen beim Ruhrverband in Essen statt und ein

weiteres im Oktober in Halle. Mit dem Ziel der Erarbeitung von Handlungsempfehlungen und Normen für den Praktiker, die in den Deutschen Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung (DEV) veröffentlicht werden, wurden die Arbeiten zum Schwerpunkt „Prüfung auf Grenzwertverletzung unter Berücksichtigung der Messunsicherheit sowie zeitlicher und räumlicher Variabilität“ weiter bearbeitet. Fachlich notwendige Diskussionen haben dazu geführt, dass der Abschluss erst Anfang 2014 zu erwarten ist. Interessierte Kolleginnen und Kollegen sind herzlich eingeladen mitzuarbeiten.

Wie auch schon in den Jahren zuvor haben Prof. W. Kessler und Dr. J. von Frese erfolgreich den Kurs: Data Mining mit multivariaten Methoden und Support Vector Machines in Stuttgart vom 10.-12.06.2013 abgehalten.

Bei einer Kurzzeitdozentur, gefördert durch den DAAD konnte PD Dr. W. v. Tümpling auch an der Universität Valdivia, Chile für die Nutzung chemometrischer Methoden bei der Qualitätssicherung werben und auf den AK aufmerksam machen. Erste Kooperationen mit Dr. Jorge Nimptsch haben sich daraus ergeben.

Gemeinsam haben Prof. Dr. J. W. Einax (Vorstandsmitglied der Fachgruppe Analytische Chemie und Mitglied des AK Chemometrik und Qualitätssicherung) und PD Dr. von Tümpling an der Universität in Leipzig im Rahmen des Aufbaustudiums „Analytik und Spektroskopie“ Blockvorlesungen mit dem Schwerpunkt Chemometrik gegeben. Das große Interesse der Studenten hat dazu geführt, dass für 2014 der Anteil am Aufbaukurs vergrößert wurde.

Neben den Vorlesungen über Chemometrie an der Hochschule Reutlingen hat Frau Prof. Kessler erfolgreich im Doktorandenseminar der Universität Wuppertal über den Einsatz der Versuchsplanung und der Auswertung mit Hilfe der multivariaten Datenanalyse auf dem Gebiet der Lebensmittelanalytik mitgewirkt.

Auf dem GDCh-Wissenschaftsforum CHEMIE 2013 bot sich für den 1. Vorsitzenden des AK die Möglichkeit, mit einem Vortrag zum Thema: „Chemometrik - Ein Tool zur Qualitätssicherung und Mustererkennung chemischer Gewässergüteuntersuchungen am Beispiel der Theiss, Ungarn“ für den Arbeitskreis zu werben.

Dankbar wurde durch den AK die Möglichkeit angenommen, bei der Analytica 2014 eine Session zum Thema: "Chemometrische Methoden - Optimaler Informationsgewinn aus analytischen und qualitätssichernden Daten" organisieren und moderieren zu dürfen. Frau Kießling gilt in diesem Zusammenhang der besondere Dank für ihre Bemühungen. Durch Vorträge von Prof. Dr. Einax, Dr. von Frese und PD Dr. von Tümpling ergeben sich so weitere Möglichkeiten auf die Aktivitäten des Arbeitskreises aufmerksam zu machen.

Wolf von Tümpling, Magdeburg
Jürgen von Frese, Utting am Ammersee
Waldtraud Kessler, Reutlingen
Heinrich Kippardt, Berlin