



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

Präsenzkurs: Chemometrik – Werkzeug in der Analytischen Chemie (142/21)

Mit Hygienekonzept

Grundlagen und Anwendungen

Prof. Dr. Jürgen W. Einax
PD Dr. Wolf von Tümping

- Elementarstatistik
- Statistische Aspekte der Probennahme
- Experimentelles Design
- Multivariate Datenanalyse
- Multivariate Kalibration



25. – 27. Oktober 2021 · Magdeburg



Anerkannt mit 45 Punkten
(www.zefo.org)

ZIEL

Die Anwendung neuer Analysenprinzipien und der Einsatz immer komfortablerer und komplexerer Messmethoden ermöglichen es, zunehmend komplizierte analytisch-chemische Aufgabenstellungen zu untersuchen. Im Ergebnis der Messungen werden meist große unübersichtliche Datenmengen „produziert“. Ziel des Kurses ist es, die Grundlagen wichtiger chemometrischer, d. h. statistischer und mathematischer, Methoden zu vermitteln, die es ermöglichen, Experimente und Messungen optimal zu planen, durchzuführen und auszuwerten, um ein Maximum an problembezogener Information aus den Daten zu gewinnen.

INHALT

Nach einer einführenden Wiederholung der Grundlagen der Elementarstatistik wird auf die statistische Versuchsplanung und Optimierung eingegangen. Es folgen Ausführungen zu statistischen Aspekten der Probennahme. Anschließend werden wichtige Methoden der multivariaten Datenanalyse behandelt. Dazu erfolgen Ausführungen zu Datenvorbehandlung, Clusteranalyse, Klassifikationsverfahren sowie faktoriellen Methoden. Methoden des Soft Modeling wie genetische Algorithmen, neuronale Netze sowie die PLS-Regression – schwerpunktmäßig angewendet zur multivariaten Kalibration – schließen sich an.

ZIELGRUPPE

Chemiker, Lebensmittelchemiker, Chemieingenieure und andere Naturwissenschaftler

VORKENNTNISSE

Grundkenntnisse der Elementarstatistik und der instrumentellen Analytik sollten vorhanden sein.

STOFFVERMITTLUNG

Die stofflichen Inhalte werden in Vortragsform vermittelt und diskutiert sowie von den Kursteilnehmern in Computerübungen anhand konkreter Fallstudien aus der Praxis der Analytischen Chemie vertieft. Eigene Datensätze können mitgebracht werden. Über deren Nutzung wird während des Kurses entschieden.

BEGLEITMATERIAL

Die Teilnehmer erhalten während des Kurses schriftliches Begleitmaterial sowie nach erfolgreicher Teilnahme ein GDCh-Zertifikat.

TEILNEHMERZAHL

maximal 12 Personen

Obwohl im Text häufig nur von Chemikern, Teilnehmern etc. die Rede ist, sind damit selbstverständlich alle Geschlechter gemeint.

MONTAG, 25. OKTOBER 2021

- 13.00 Begrüßung und Organisatorisches
- 13.15 Einführung und Elementarstatistik
- 14.45 Kaffeepause
- 15.00 Statistische Versuchsplanung
- 16.30 Kaffeepause
- 17.00 Computerübungen (Elementarstatistik, Statistische Versuchsplanung)
- 18.30 Voraussichtliches Ende des ersten Veranstaltungstages

DIENSTAG, 26. OKTOBER 2021

- 9.00 Probennahme
- 10.00 Kaffeepause
- 10.15 Multivariate Kalibration I
- 11.45 Mittagspause
- 13.00 Multivariate Datenanalyse I
- 14.30 Kaffeepause
- 15.00 Computerübungen (Uni- und Multivariate Kalibration)
- 16.30 Computerübungen (Datenanalyse)
- 18.00 Voraussichtliches Ende des zweiten Veranstaltungstages

MITTWOCH, 27. OKTOBER 2021

- 9.00 Multivariate Kalibration II
- 10.20 Computerübungen (Multivariate Kalibration)
- 11.20 Kaffeepause
- 11.30 Multivariate Datenanalyse II
- 12.30 Computerübungen (Datenanalyse)
- 13.30 Abschlussgespräch und Übergabe der Teilnahmebestätigungen
- 13.45 Voraussichtliches Ende der Veranstaltung

Änderungen und Ergänzungen vorbehalten

ANMELDUNG

Melden Sie sich bitte online unter www.gdch.de/14221 bis zum 27.9.2021 (Anmeldeschluss) bei der Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V. (GDCh) an.



Anke Moosbauer
Fortbildungsorganisation

T: +49 69 7917-291
a.moosbauer@gdch.de
www.gdch.de/fortbildung

GEBÜHREN

| | |
|---------------|---------|
| GDCh-Mitglied | € 910,- |
| Nichtmitglied | € 990,- |

Die Gebühren sind einschließlich Kaffeepausen- und Konferenzgetränken sowie Begleitmaterial und GDCh-Zertifikat, ausschließlich Unterkunft und Mittagessen zu verstehen. Sie unterliegen nicht der Mehrwertsteuerpflicht (Steuerbefreiung nach § 4 Nr. 21.a) bb) UStG).

Die AGB finden Sie unter www.gdch.de/teilnahme.

HINWEIS AUF WEITERE VERANSTALTUNGEN**389/21 Präsenzkurs: Moderne Rietveld-Analyse**

Leitung: Prof. Dr. Robert E. Dinnebier
23. – 24. September 2021 · Frankfurt am Main

391/21 Präsenzkurs: Metabolomics: Proteomics und Genomics

Die Analytische Chemie, die hinter den modernen -omics-Verfahren steht
Leitung: Prof. Dr. Georg Pohnert
6. Oktober 2021 · Frankfurt am Main

506/21 Online-Kurs: NMR-Spektrenauswertung und Strukturaufklärung

Fortgeschrittenenkurs
Leitung: Prof. Dr. Reinhard Meusinger
6. – 27. Oktober 2021 (immer mittwochs) · Online

511/21 Hybrid: Die Qualitätssysteme GMP (Gute Herstellungspraxis) und GLP (Gute Laborpraxis) im Überblick – Ein Leitfaden der Guten Praxis

Kursmodul zum Geprüften Qualitätsexperten GxP (GDCh)
Leitung: Dr.-Ing. Barbara Pohl
22. November 2021 · Frankfurt am Main und Online

517/21 Qualitätsmanagement im analytischen Labor

Richtlinienkonformität und Kompetenzerhalt: technische Grundlagen qualitätsgerechter Laborarbeit (gemeinsam veranstaltet mit EUROLAB/Deutschland)
Leitung: Dr. Michael Koch
23. – 24. November 2021

VERANSTALTUNGSORT

Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung – UFZ
Brückstraße 3a
39114 Magdeburg

ANFAHRT

Aufgrund von umfangreichen Straßenbaumaßnahmen im Stadtgebiet von Magdeburg werden den Teilnehmern die Anfahrtsmöglichkeiten sowohl mit öffentlichen Verkehrsmitteln als auch mit dem Auto kurzfristig bekanntgegeben.

Die Deutsche Bahn bietet attraktive Konditionen für Ihre Anreise zu GDCh-Veranstaltungen an. Informationen erhalten Sie unter www.gdch.de/bahn.

UNTERKUNFT

Als geeignete Übernachtungsmöglichkeiten wurden nachfolgende Hotels genannt. Diese Hinweise erfolgen ohne jede Verbindlichkeit:

Jugendherberge Magdeburg, Leiterstraße 10, 39104 Magdeburg
T: +49 391 532-1010, magdeburg@jugendherberge.de
Internet: www.jugendherberge-magdeburg.de

Roncalli-Haus e.V., Max-Josef-Metzger-Str. 12/13, 39104 Magdeburg
T: +49 391 596-1400

Weitere Unterkünfte erfragen Sie bitte bei:
Tourist-Information Magdeburg
Magdeburg Marketing Kongress und Tourismus GmbH
Breiter Weg 22
39104 Magdeburg
T: +49 391 63601-402
info@visitmagdeburg.de

Wir weisen ausdrücklich darauf hin, dass die Haftung für bestellte und nicht abgenommene Zimmer beim Besteller liegt.

**INHOUSE-KURSE
Lokal oder digital**

Individuell, effizient, zeit- und kostensparend –
nutzen Sie das Expertenwissen und unser Know-how
als langjähriger Seminaranbieter, auch für Ihre Inhouse-Kurse
vor Ort oder digital.

Ihre Ansprechpartnerin: Melanie Sakarya
T: +49 69 7917-331 oder fb@gdch.de

LEITUNG

Prof. Dr. Jürgen W. Einax
Friedrich-Schiller-Universität Jena

Jürgen W. Einax ist seit 1992 Universitätsprofessor für Analytische Chemie an der Uni Jena. Seine Forschungsgebiete liegen in der Umweltanalytik, Chemometrie und Qualitätssicherung. Seit 2015 ist er emeritiert. Herr Einax war von 2008 bis 2015 Mitglied des Vorstandes der GDCh-Fachgruppe Analytische Chemie und von 2003 bis 2011 Vorsitzender des Arbeitskreises Chemometrie und Labordatenverarbeitung in der GDCh.



PD Dr. Wolf von Tümping
Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung – UFZ
Standort Magdeburg

Wolf von Tümping leitet seit 2000 die Abteilung Gewässeranalytik und Chemometrie am Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung – UFZ. Wesentliche Forschungsaktivitäten sind verbunden mit der Schadstoffdynamik in Fließgewässern, der analytischen Qualitätssicherung sowie der Chemometrie. Von 2011 bis 2019 war er Vorsitzender des Arbeitskreises Chemometrie und Qualitätssicherung in der GDCh-Fachgruppe Analytische Chemie.

REFERENTEN

Prof. Dr. Jürgen W. Einax Friedrich-Schiller-Universität Jena
(siehe Leitung)
Prof. Dr. Karl Molt Universität Duisburg-Essen
Dr. Simon Prikler PFEUFFER GmbH Kitzingen
PD Dr. Wolf von Tümping Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung – UFZ (siehe Leitung)