

## VERANSTALTUNGSORT

Novotel Frankfurt City  
Lise-Meitner-Straße 2  
60486 Frankfurt am Main  
Tel.: +49 69 79303-0  
Fax.: +49 69 79303-930  
E-Mail: H1049@accor.com  
Internet: www.novotel.com

## ANFAHRT

Die Teilnehmer erhalten nach dem Anmeldeschluss eine ausführliche Wegbeschreibung zum Veranstaltungsort.

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

## UNTERKUNFT

Für die Teilnehmer haben wir im Veranstaltungshotel unter dem Stichwort „GDCh 643/19“ ein begrenztes Zimmerkontingent zu Sonderkonditionen reserviert. Dieses Kontingent gilt bis zum 02.06.2019. Bitte wenden Sie sich direkt an das Hotel (Adresse und Telefonnummer siehe „Veranstaltungsort“).

Weitere Unterkünfte erfragen Sie bitte bei:  
Tourismus+Congress GmbH  
Kaiserstraße 56  
60329 Frankfurt am Main  
Tel.: +49 69 21 230808  
Fax: +49 69 21 240512  
E-Mail: [info@infofrankfurt.de](mailto:info@infofrankfurt.de)  
Internet: [www.frankfurt-tourismus.de](http://www.frankfurt-tourismus.de)

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

### INHOUSE-SEMINARE

#### Schulungen nach Ihren Vorstellungen

Individuell, effizient, zeit- und kostensparend – nutzen Sie das Expertenwissen und unser Know-how als langjähriger Seminaranbieter auch für Ihre Inhouse-Seminare.

Ihre Ansprechpartnerin: Melanie Sakarya  
Tel.: +49 69 7917-331/-364 oder E-Mail: [fb@gdch.de](mailto:fb@gdch.de)

## ANMELDUNG

Melden Sie sich bitte online bis zum 27.5.2019 (Anmeldeschluss) bei der Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V. (GDCh) an:



Lena Rubner  
Fortbildungsorganisation

Telefon: +49 69 7917-364  
E-Mail: [l.rubner@gdch.de](mailto:l.rubner@gdch.de)  
[www.gdch.de/fortbildung](http://www.gdch.de/fortbildung)

## GEBÜHREN

GDCh-Mitglied € 1.230,-  
Nichtmitglied € 1.310,-

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

Ihr direkter Link zu unserer Internetseite:



Die AGB finden Sie im Internet unter [www.gdch.de/teilnahme](http://www.gdch.de/teilnahme).

## HINWEIS AUF WEITERE VERANSTALTUNGEN

- 036/19 **Klassische und nicht-klassische Kristallisation**  
Leitung: Prof. Dr. Helmut Cölfen  
25. – 27. Juni 2019 · Konstanz
- 596/19 **Tenside: Waschmittel, Kosmetik, technische Anwendungen**  
Leitung: Dr. Felix Müller  
23. – 24. September 2019 · Essen
- 642/19 **Big Data - Grundlagen, Methoden und praktische Umsetzung**  
Leitung: Prof. Dr. Uwe Kehrel  
27. – 28. November 2019 · Frankfurt am Main

NEU



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

## Einsatz der statistischen Software R: Grundlagen, Data-Mining & maschinelles Lernen

Optimierte Datenauswertungen in der chemischen Forschung und Produktion

Prof. Dr. Bernard Ludwig

- Einführung in die mächtige und freie statistische Software R:  
Aufbau, Objekte & Funktionen
- Einsatz von R für
  - Signifikanztests, Regressionen & Varianzanalysen
  - Chemometrie
  - Data Mining & maschinelles Lernen



643/19

24. – 26. Juni 2019 · Frankfurt am Main

## ZIEL

In vielen chemischen Bereichen in Forschung und Produktion werden Daten erhoben – u.a. für Qualitätskontrollen, Produktionsoptimierungen, Verkaufsprognosen und Mustererkennungen für Automatisierungen. Im Rahmen des Industrie 4.0-Konzepts ist zudem ein Verständnis künstlicher Intelligenz und damit von Data-Mining-Verfahren und maschinellem Lernen bedeutsam – u.a. für Optimierungen vernetzter Produktionssysteme. Ziel der Veranstaltung ist es, dass die Teilnehmer Auswertungen mit der mächtigen und freien statistischen Software R erlernen, die ein breites Methodenspektrum für Auswertungen bietet.

## INHALT

Im I. Teil wird eine Einführung in R gegeben. Die Teilnehmer werden in die Lage versetzt, Zielvariablenoptimierungen (z.B. Produktausbeute) in Abhängigkeit kategorialer (z.B. Produktionsverfahren) und quantitativer Variablen (z.B. Temperatur) und Signifikanztests (z.B. Reinheitsvergleich) durchzuführen und chemometrische Verfahren anzuwenden. R wird eingesetzt für:

- Deskriptive und inferentielle Statistik (u.a. klassische Tests, Varianzanalyse)
- Explorative Statistik (u.a. statistische Modellierung und Regressionen)
- Chemometrie (u.a. Hauptkomponentenanalyse und Partial Least Squares-Regression)

Im II. Teil werden der Einsatz von R in Data-Mining-Verfahren und maschinellem Lernen anhand von Fallbeispielen vermittelt. Behandelt werden Klassifikations- und Regressionsprobleme bei unüberwachtem und überwachtem Lernen. Vorgestellte Methoden sind:

- Cluster- und Faktorenanalysen
- Random Forest und Support Vector Machine-Klassifikationen und Regressionen
- Neuronale Netze

## ZIELGRUPPE

Die Veranstaltung richtet sich an Chemiker, Pharmazeuten, Chemie-Ingenieure und chemisch-technische Mitarbeiter – in Industrie und Hochschule – die an der Datenauswertung beteiligt sind, ausgehend von klassischen Signifikanztests (z.B. Einsatz von R für den Vergleich verschiedener Produktchargen mithilfe von Signifikanztests) über Standard-Regressionen und Varianzanalysen (z.B. Ausbeutenmaximierung) zu neueren Verfahren des Data-Mining und maschinellen Lernens (z.B. für verbesserte Mustererkennungen und Regressionen bei multivariaten Datensätzen).

## VORKENNTNISSE

Grundlagenkenntnisse in einfachen statistischen Auswertungen in der Chemie und in EDV-Anwendungen sind wünschenswert. R-Kenntnisse werden nicht vorausgesetzt.

## TEILNEHMERZAHL

maximal 20 Personen

## MONTAG, 24. JUNI 2019

- 10.00 Begrüßung der Teilnehmer und Vorstellung
- 10.30 Einführung in R: Datentypen, Vektoren, Datenrahmen und Einlesen von Daten
- 12.30 Mittagspause
- 13.30 Einsatz von R für Zielvariablenoptimierungen I: klassische Tests und Regressionen mit Laptop-Übungen
- 15.30 Kaffeepause
- 16.00 Einsatz von R für Zielvariablenoptimierungen II: Varianzanalysen mit Laptop-Übungen
- 18.15 Voraussichtliches Ende des ersten Veranstaltungstages
- 18.30 Ausklang des ersten Seminartages in informeller Runde auf Einladung der GDCh

## DIENSTAG, 25. JUNI 2019

- 9.00 Klassifikationsprobleme in der Forschung: u. a. Hauptkomponentenanalyse mit Laptop-Übungen
- 10.00 Kaffeepause
- 10.15 Optimierungsprobleme in der Produktion: u.a. PLS-Regression mit Laptop-Übungen
- 12.30 Mittagspause
- 13.30 Data Mining & maschinelles Lernen: Wozu braucht man das?
- 14.30 Kaffeepause
- 15.00 Einsatz verschiedener R-Pakete für Mustererkennungen, Prognosen und Optimierungen
- 17.30 Ende des zweiten Seminartages

## MITTWOCH, 26. JUNI 2019

- 9.00 Data Mining & maschinelles Lernen I: allgemeines zu Klassifikationen und Regressionen
- 10.00 Kaffeepause
- 10.15 Data Mining & maschinelles Lernen II: Random Forest mit Laptop-Übungen
- 12.30 Mittagspause
- 13.30 Data Mining & maschinelles Lernen III: künstliche neuronale Netze mit Laptop-Übungen
- 14.30 Kaffeepause
- 15.00 Data Mining & maschinelles Lernen IV: Support Vector Machine mit Laptop-Übungen
- 17.00 Teilnehmer-Feedback und Verabschiedung
- 17.30 Voraussichtliches Ende der Veranstaltung

## LEITUNG



**Prof. Dr. Bernard Ludwig**  
Universität Kassel  
Fachgebiet Umweltchemie

Prof. Dr. Bernard Ludwig leitet seit 2002 das Fachgebiet Umweltchemie an der Universität Kassel. Seine Forschungen behandeln u.a. umweltchemische, bodenkundliche und spektroskopische Themen, bei denen statistische und Data-Mining-Verfahren und maschinelles Lernen unter Verwendung der Software-Pakete R und SAS eingesetzt werden. Der Fokus vieler seiner in internationalen Fachzeitschriften publizierten Studien liegt auf Methodvalidierungen und -optimierungen. In der Lehre vermittelt er Methoden der angewandten Statistik, Data-Mining und maschinelles Lernen für Datenauswertungen.

## REFERENT

Prof. Dr. Bernard Ludwig                      Leiter des Fachgebiets Umweltchemie,  
(siehe Leitung)                                      Universität Kassel

## STOFFVERMITTLUNG

Statistisches Hintergrundwissen wird in verständlicher Form erläutert und Anwendungen der R-Software werden anhand von Fallbeispielen aus Forschung und Produktion gezeigt. Ein Schwerpunkt liegt auf den Laptop-Übungen, so dass die Teilnehmer in die Lage versetzt werden, R für eigene Fragestellungen einzusetzen.

## BEGLEITMATERIAL

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