

Schulung

***Chemometrische Spektroskopie: Grundlagen und quantitative Analyse  
mit praktischen Beispielen unter Verwendung der SL-Softwarefamilie***

***in Norderstedt***

---

Der Kurs eignet sich sowohl als Einstieg in die multivariate Kalibration als auch zur systematischen Vertiefung bereits vorhandener Kenntnisse.

Der gesamte Arbeitsablauf, von der Zusammenstellung der spektroskopischen Daten für die Kalibration bis hin zum sicheren Einsatz der erstellten Methoden im Routinemessbetrieb, wird mit leicht verständlichen theoretischen Konzepten und praktischen Übungen behandelt.

Die Teilnehmer lernen dabei die SL-Datenbank und einige wichtige Funktionen der modularen SL-Softwarefamilie kennen. Die meisten der vermittelten Inhalte können jedoch auch von Benutzern anderer Softwarepakete unmittelbar in der Praxis angewandt werden.

Vorausgesetzt werden Grundkenntnisse der instrumentellen Analytik, jedoch keine Vorkenntnisse der Chemometrie und ihrer Methoden.

Die Schulung findet in deutscher Sprache statt.

*Der Referent:*

---

**Dr. Heinrich Prüfer,**

Dipl.-Chemiker, ist seit Ende 1998 geschäftsführender Gesellschafter der *SensoLogic* GmbH und befasst sich seit mehr als 20 Jahren mit chemometrischen Methoden für die Spektroskopie.

Die Themen:

1. Chemometrische Spektroskopie in Labor und Prozess: konzeptionelle Gemeinsamkeiten und Unterschiede
2. Gute Spektren, schlechte Spektren: die Rohdaten sind entscheidend.
  - Beispiele für Artefakte und ihre Ursachen
  - Ausfiltern oder korrigieren? Was bedeutet „repräsentativ“ in der Praxis? Wie viele Proben für den Kalibrationsdatensatz und wie verteilt ?
  - Einfach-, Doppel- oder Mehrfachbestimmung ?
3. ... was zusammengehört: das SL-Datenbankkonzept
  - Proben und Referenzdaten
  - Spektren, Serien und Bibliotheken
  - Transformationen
  - Kalibrationen, Methoden und Applikationen
4. Des Kaisers neue Kleider: multivariate Regressionsmodelle werden transparent
  - Wie funktionieren multilineare Modelle?
  - Wellenlängen- und Faktormodelle – der alte Streit um des Kaisers Bart: braucht man mehr als PLS?
  - Wozu braucht man nichtlineare Kalibrationstechniken?
5. Weniger ist mehr: Ableitungen und andere Techniken der Datenvorbehandlung
  - Linearisierung und digitale Varianzfilter: wie wirken die gebräuchlichen Transformationen?
  - Wie findet man die beste Vorbehandlung für welche Anwendung ?
  - Kann und sollte man diese Entscheidung automatisieren?
  - Gibt es eine universell beste mathematische Vorbehandlung?
6. Das Kreuz mit Kreuzvalidierung & Co.: Vorbeurteilung der Qualität eines Kalibrationsmodells im SL Calibration Workshop
  - Wie kann man die Leistungsfähigkeit einer Kalibration prognostizieren ?
  - Wie entscheidend ist der Korrelationskoeffizient?

- Wie aussagefähig ist die Kreuzvalidierung ?
  - Welche anderen Qualitätskenngrößen sind nützlich ?
7. „...ich hab’ nichts gegen Fremde. ... Aber diese Fremden da sind nicht von hier!“ – Ausreißerdiagnostik und Exkurs zur qualitativen Analyse
- Wie kann man grundsätzlich die Gültigkeit der Ergebnisse von Spektrenmessungen beurteilen?
  - Was sind Ausreißer? Welche Bedeutung haben die Ausreißertypen T, H, D und S im SL Calibration Workshop?
  - Ausreißerdiagnostik als Grenzfall der qualitativen Analyse: Exkurs zu Bibliotheks- und Clustermodellen
8. Testen, testen, testen – die Validierung
- Was bedeutet „repräsentativ“ für die Validierungsdaten? Das gleiche wie bei den Kalibrationsdaten?
  - Und wie sollte hier die Verteilung sein?
9. Wie gut ist meine Messung? – Messunsicherheit und andere Diagnosen zur Qualitätssicherung mit dem SL Predictor und darüber hinaus
- Welche Ausreißerdiagnostik ist in der täglichen Routine tauglich?
  - Wie kann man die Messunsicherheit der Einzelmessung schätzen?
  - Und wenn die Werte driften? Gibt es eine Chance zur Früherkennung?
  - Problembewertung nach dem Verursacherprinzip: liegt es an der Kalibration, am Spektrometer, an der Probennahme oder an der Probe selbst?
10. Die unendliche Geschichte – Kalibrationstransfer und -wartung
- Ein Ziel, drei Wege: Sollte man besser die Kalibrationen anpassen, die Spektren standardisieren oder nur extrem robuste Kalibrationen verwenden?
  - Welche Techniken gibt es im Einzelnen?

Abschlussdiskussion

Terminplan:

1. Schulungstag: Mittwoch, den xx.xx.201x von 13:00 – 18:00 Uhr  
(mit anschließendem gemeinsamen Abendessen)
2. Schulungstag: Donnerstag, den xx.xx.201x von 09:00 – 17:30 Uhr
3. Schulungstag: Freitag, den xx.xx.201x von 08:30 – 12:00 Uhr

Veranstaltungsort: Hotel Wilhelm Busch  
Norderstedt GmbH  
Wilhelm Busch Platz  
Segeberger Chaussee 45  
22850 Norderstedt

Teilnehmerbeitrag: EUR 750,- zuzüglich der gesetzlichen Umsatzsteuer

Im Preis enthalten ist das Schulungsmaterial sowie Pausenbewirtung inkl. Mittagessen am xx.xx.201x. Weiterhin steht am Anreisetag mittags ein kleiner Imbiss zur Verfügung. Am Abend des ersten Schulungstages laden wir Sie herzlich zu einem gemeinsamen Abendessen ein.  
Reise- und Übernachtungskosten sind nicht im Teilnehmerbeitrag enthalten.

Anmeldung:

Ihre verbindliche Anmeldung senden Sie uns bitte per Fax oder E-Mail mit dem beiliegenden Anmeldeformular. Anmeldeschluss ist der xx.xx.201x.  
Nach Eingang Ihrer Anmeldung erhalten Sie von uns eine Bestätigung und nach Anmeldeschluss gesondert die Rechnung.  
Die Teilnehmerzahl ist auf 15 begrenzt.

Die praktischen Übungen sollen auf selbst mitgebrachten Laptops der Teilnehmer durchgeführt werden. Bitte vermerken Sie auf dem Anmeldeformular, ob Sie von dieser Möglichkeit Gebrauch machen werden.

Unterkunft:

Den Veranstaltungsteilnehmern steht für beide Übernachtungen im Hotel Wilhelm Busch ein vorreserviertes Zimmerkontingent zur Verfügung und kann bei Bedarf dort direkt gebucht werden.

Preis pro Nacht (inkl. Frühstück):  
EUR 71,00 im Einzelzimmer

Tel.: +49(0)40/52 99 00-0  
Fax: +49(0)40/52 99 00-19  
E-mail: [info@hotel-wilhelm-busch.com](mailto:info@hotel-wilhelm-busch.com)

Anreise:

Aus Richtung Süden kommend fährt man auf der A7 durch den Elbtunnel und verlässt die Autobahn an der Ausfahrt Schnelsen-Nord.

An der ersten Ampel nach dieser Ausfahrt hält man sich rechts (Norderstedt ist bereits ausgeschildert). Dieser Hauptstraße (Oldesloer Straße, B432) folgt man immer geradeaus und gelangt so auf die Ohechaussee, die in Norderstedt an einer großen Kreuzung in die Segeberger Chaussee übergeht.

Nach ca. 300 m liegt das Hotel auf der linken Seite dieser Straße.

Parkplätze stehen direkt am Haus zur Verfügung. Außerdem kann ein Stellplatz in der Tiefgarage für EUR 6,00 pro Tag genutzt werden.

Rückfragen:

Wenn Sie Fragen zu Inhalten, Ablauf oder Organisation der Veranstaltung haben, senden Sie uns bitte eine E-mail an [info@sensologic.com](mailto:info@sensologic.com) oder rufen Sie uns an unter +49(0)40/52 95 67-0.

Wir würden uns freuen, auch Sie am xx.xx.201x in Norderstedt begrüßen zu dürfen.

## **ANMELDUNG**

**FAX: +49(0)40/52 95 67-99**

Ich nehme an der Schulung

### ***Chemometrische Spektroskopie: Grundlagen und quantitative Analyse mit praktischen Beispielen unter Verwendung der SL-Softwarefamilie***

vom xx.xx.-xx.xx.201x in Norderstedt zum Preis von EUR 750,- zuzüglich der gesetzlichen Umsatzsteuer teil.

#### Teilnehmer:

Name, Vorname: .....

Firma/Organisation: .....

Straße: .....

PLZ/Ort: .....

Telefon: .....

Fax: .....

E-Mail: .....

Ich nutze den eigenen Laptop für die praktischen Übungen: Ja ( ) Nein ( )

#### Rechnungsempfänger (bitte ausfüllen, falls abweichend zu den Teilnehmer-Angaben)

Firma/Organisation: .....

Abt.: .....

Straße: .....

PLZ/Ort: .....

Telefon: .....

Fax: .....

E-Mail: .....

Unterschrift: .....

#### **Teilnahmebedingungen:**

Der Teilnehmerbeitrag versteht sich inkl. Schulungsmaterial sowie einem Mittag- und Abendessen und der Pausenbewirtung. Reise- und Übernachtungskosten sind nicht im Teilnehmerbeitrag enthalten. Den Eingang Ihrer Anmeldung bestätigen wir Ihnen umgehend. Erst nach Ablauf der Anmeldefrist erhalten Sie eine Rechnung, die sofort nach Erhalt zur Zahlung fällig wird.

#### **Anmeldebestätigung durch SensoLogic GmbH:**

---

SensoLogic GmbH  
Software + Sensor Systeme

Tel: +49(0)40/52 95 67-0  
Fax: +49(0)40/52 95 67-99

Sitz: Norderstedt  
Amtsgericht Kiel HRB 4122 NO

Hummelsbütteler Steindamm 78A  
22851 Norderstedt

E-mail: info@sensologic.de  
URL: http://www.sensologic.de

Geschäftsführer:  
Dr. Heinrich Prüfer, Kaltenkirchen