

Schulung

***Chemometrische Spektroskopie: Vertiefungskurs zur quantitativen Analyse
mit der SL-Softwarefamilie unter Einbeziehung des neuen SL Calibration Wizard***

19.05.-21.05.2010 in Norderstedt

Der Kurs eignet sich zur systematischen Vertiefung bereits vorhandener Grundkenntnisse der multivariaten Kalibration.

Der gesamte Arbeitsablauf, von der Zusammenstellung der spektroskopischen Daten für die Kalibrierung bis hin zum sicheren Einsatz der erstellten Methoden im Routinemessbetrieb, wird mit leicht verständlichen theoretischen Konzepten und praktischen Übungen behandelt. Dabei können in größerem Umfang als bei den Einführungskursen in Workshop-Phasen auch nach Absprache von den Teilnehmern eingebrachte Datensätze in der Gruppe besprochen und bearbeitet werden.

Die Teilnehmer vertiefen ihre Fähigkeit zur Arbeit mit der SL-Datenbank und den kombinierten Einsatz von Werkzeugen der modularen SL-Softwarefamilie. Dazu gehören insbesondere auch Funktionen, die erstmals mit dem neuen SL Calibration Wizard zur Verfügung stehen. Viele der vermittelten Inhalte können auch von Benutzern anderer Softwarepakete in der Praxis genutzt werden.

Vorausgesetzt werden erste Grundkenntnisse der Anwendung chemometrischer Methoden in der quantitativen spektroskopischen Analytik.

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.

Themenplan:

1. Einführung: Gesamtablauf der Methodenentwicklung und Überblick über die entsprechenden Arbeitsschritte anhand des SL Calibration Wizard
2. Kritische Sichtung und Auswahl der Spektren
 - Visuelle Beurteilung
 - Verbesserung der Genauigkeit durch Wiederholmessungen
 - Subset Selection: Signifikanz-Auswahl (Gauss-Jordan-Verfahren) und andere Strategien
 - Exkurs: Einsatz qualitativer Modelle zur Beurteilung von Spektrenserien
3. Kritische Sichtung und Auswahl der Referenzwerte
 - Welche Rolle spielt der Fehler der Referenzmethode? Kann man ihn aus den Kalibrierdaten abschätzen?
 - Zusammenhang zwischen der Verteilung der Referenzwerte und dem Fehler des Regressionsmodells
 - Der „Local“-Effekt
 - Der Kostenfaktor: wie viele Proben?
4. Wiederholung: das Konzept der multivariaten Regressionsmodelle
 - Anschauliche Interpretation multilinearer Modelle
 - Wellenlängen- und Faktormodelle – ihre Stärken und Schwächen
5. Transformationen zur Spektrenvorbehandlung auswählen und optimieren, u.a.
 - Linearisierung und digitale Varianzfilter: wie wirken die gebräuchlichen Spektren-Transformationen?
 - Exkurs: Wirkung von Detrend, SNV und Ableitungen – einzeln und in Kombination
 - Auswahl nach Varianz- und Kovarianz-Gesichtspunkten

6. Qualitätsbewertung und Vergleich von Kalibrationsmodellen

- Das Optimum zwischen Underfitting und Overfitting
- Zum Zusammenhang zwischen Korrelationskoeffizienten, Bestimmtheitsmaßen und Standardabweichungen
- Praxis der Kreuzvalidierung
- Qualitätskenngrößen im Überblick

7. Ausreißerdiagnostik

- Was ist ein Ausreißer und was soll mit ihm passieren?
Kontroverse Interpretationen
- Wiederholung: die Ausreißertypen T, H, D und S in SL Calibration Workshop und Wizard

8. Test und Validierung

- Bleibt die Forderung nach Unabhängigkeit der Validierungsdaten in der Praxis unerfüllt?
- Ist das Kalibrationsmodell mit dem kleineren Prediction-Fehler tatsächlich das bessere? Vergleich alternativer Kalibrationsmodelle mit einem Signifikanztest (Snedecor-Cochran)

9. Kalibrationstransfer

- Prinzipielle Alternativen
- Konvertierung von Spektren mit Transfer-Modellen am Beispiel der Piecewise Direct Standardization (Kowalski et al.)

10. Vollautomatische Kalibrierung - Möglichkeiten und Grenzen

Abschlussdiskussion

Terminplan:

1. Schulungstag: Mittwoch, den 19.05.2010 von 13:00 – 18:00 Uhr
(mit anschließendem gemeinsamen Abendessen)
2. Schulungstag: Donnerstag, den 20.05.2010 von 09:00 – 17:30 Uhr
3. Schulungstag: Freitag, den 21.05.2010 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 19.05.2010. 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 12.05.2010.
Nach Eingang Ihrer Anmeldung erhalten Sie von uns eine Bestätigung und nach Ablauf der Anmeldefrist die Rechnung.
Die Teilnehmerzahl ist auf 15 begrenzt.

Die praktischen Übungen sollten möglichst 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

Anreise:

Informationen zur Anreise mit dem Auto oder mit öffentlichen Verkehrsmitteln im Hamburger Verkehrsverbund (HVV) finden Sie im Internet unter

<http://www.hotel-wilhelm-busch.com/html/anfahrt.html>

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 eMail an info@sensologic.com oder rufen Sie uns an unter +49 (0)40/52 95 67-0.

Wir würden uns freuen, auch Sie am 19.05.2010 in Norderstedt begrüßen zu dürfen.

ANMELDUNG

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

Ich nehme an der Schulung

Chemometrische Spektroskopie: Vertiefungskurs zur quantitativen Analyse mit der SL-Softwarefamilie unter Einbeziehung des neuen SL Calibration Wizard

vom 19.05.-21.05.2010 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
Rüdiger Hannig, Norderstedt