



Spektroskopische Kalibrierung

WARUM SPEKTROSKOPISCHE KALIBRIERUNG?

In den letzten Jahren haben sich immer mehr Firmen für (On-line-) NIR-Kalibrierungsmodelle als Alternative zu zeitaufwändigen und teuren Laboranalysen entschieden. Dies trifft häufig auf den gesamten Produktionsprozess zu, um die Qualität des vorhandenen Rohmaterials zu prüfen, zeitgerecht Informationen über verschiedene Prozessabläufe zu gewinnen und die Qualität des Endproduktes zu quantifizieren.

Kontinuierliche chemometrische Entwicklungen lassen die Zahl der Anwendungen der spektroskopischen Kalibrierung – insbesondere NIR – trotz der starken Überlappung spektraler Bänder und Spitzen in der NIR-Region steigen.

KURSVERLAUF

In diesem Kurs werden die verschiedenen Stufen durchlaufen, die für eine erfolgreiche spektroskopische Kalibrierung erforderlich sind: von der Probenwahl über Validierung und Interpretation der Modelle, bis hin zu Richtlinien und Empfehlungen für die Aufrechterhaltung und Aktualisierung von Kalibrierungsmodellen in der Zukunft. Da die Praxis im Vordergrund steht, wechseln theoretische Aspekte mit praktischen Übungen ab.

ZIELSETZUNG DES KURSES

In diesem Kurs entwickeln TeilnehmerInnen ein Gefühl für den multivariaten Weg zur spektroskopischen Kalibrierung, gelangen Einblick in die zugrunde liegenden Methoden, erlernen die Durchführung einer multivariaten Kalibrierung in "normalen" Situationen und das Erkennen von Problemsituationen.

ZIELGRUPPE UND VORKENNTNISSE

Wenn die Zielsetzung die Durchführung multivariater Kalibrierungen und/oder die korrekte Interpretation der Ergebnisse ist, wird dieser Kurs Ihre Erwartungen erfüllen. Keine Vorkenntnisse erforderlich.



KURSinHALT

Tag 1:

- NIR Einführung
- Explorative multivariate Analyse
 - Visualisierung von Informationen in großen Datensätzen
 - Principal Component Analysis (PCA)
 - Cluster-Analyse: Ermittlung von Gruppen gleicher Proben

Tag 2:

- Grundlegende Prinzipien von Kalibrierungstechniken
 - Multiple Lineare Regression (MLR)
 - Principal Component Regression (PCR)
 - Partial Least Squares (PLS)
- Interpretation von Kalibrierungsmodellen
- Modellvalidierung
- Vorverarbeitung und Skalierung von Spektren

Tag 3:

- Nachweis von Ausreißern und Nicht-Linearitäten
- Vorhersage mit Kalibrierungsmodellen
- Wahl von Kalibrierungsproben
- Standardisierung von Kalibrierungsmodellen
- Überwachung der Leistung von (On-line-) Kalibrierungsmodellen

ALLGEMEINE INFORMATIONEN

Jeder Kurstag findet von 9:00 h bis etwa 17:00 h statt. Die Kursgebühr und die Kursdaten finden Sie in dem beiliegenden Anmeldeformular. In den Kursgebühren sind Unterlagen und Mittagessen enthalten. Für die Anmeldung retournieren Sie bitte das Anmeldeformular spätestens 30 Tage vor Kursbeginn.