



AK Chemometrik und Qualitätssicherung – Jahresbericht 2025

Die Anzahl der Mitglieder ist 2025 annähernd konstant geblieben. Mit Stand 02.01.2026 hat der AK Chemometrik und Qualitätssicherung 254 Mitglieder, mit 33 Ein- und 28 Austritten. Neben dem gewählten Vorstand beteiligte sich, wie auch im Vorjahr, Marcel Dahms in 2025 als ständiger Gast an der Vorstandsarbeit.

Die Mitgliederversammlung des Arbeitskreises fand in Verbindung mit dem Workshop „From Data to Insight: Mastering Visualization for Quality Control and Chemometrics“ (s.u.) am Abend des 2. April 2025 in hybridem Format statt. Dabei waren zehn Mitglieder vor Ort und zwei Mitglieder des Arbeitskreises online anwesend. Auf der Tagesordnung standen dabei der Bericht des Vorstandes sowie die Finanzstrategie des AK, Berichte zu den durchgeführten Veranstaltungen sowie Neuigkeiten aus den Taskforces. Es wurde beschlossen, die Task-Force Öffentlichkeitsarbeit aufzulösen und die Aufgaben vorerst themenbezogen zu integrieren.

Darüber hinaus traf sich der Vorstand des Arbeitskreises Chemometrik und Qualitätssicherung regelmäßig auf insgesamt acht Online-Meetings und am 21.11.2025 in Berlin an der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM).

Vom 2. bis 3. April 2025 veranstaltete der Arbeitskreis den Workshop „From Data to Insight: Mastering Visualization for Quality Control and Chemometrics“, am Paul-Ehrlich-Institut (PEI) in Zusammenarbeit mit dem Team „Raman Spectroscopy & Data Science“ der Abteilung „Central Method Development“ in Langen. Die Veranstaltung umfasste drei Hauptvorträge und praxisorientierte Übungen. Claudia Beleites (Chemometrix GmbH), Kai Lawonn von der Friedrich-Schiller-Universität Jena und Claus O. Wilke (University of Texas, Austin) präsentierten jeweils Vorträge, in denen die effektive visuelle Kommunikation von Daten und Ergebnissen im Vordergrund stand. In praxisorientierten Workshops konnten die TeilnehmerInnen darüber hinaus zwischen Übungen in R, Python, LibreOffice oder Excel wählen. Insgesamt 35 TeilnehmerInnen besuchten den Workshop. Ein Bericht dazu ist im Mitteilungsblatt der FG Analytische Chemie der GDCh in der Ausgabe 4/2025 erschienen. Dieses Format wird auch in den folgenden Jahren weitergeführt, wobei der nächste Workshop am 25. - 26. Februar im IPHT in Jena unter dem Titel „From Data to Insight: Efficient Data Management for Chemometrics and Quality Control“ geplant ist.

Das Doktorandenseminar des Arbeitskreises fand vom 10. bis 12. September 2025 an der Universität Hamburg statt und wurde von 24 TeilnehmerInnen besucht (siehe auch Bericht im Mitteilungsblatt der FG Analytische Chemie der GDCh, Ausgabe 4/2025). Es startete mit einem Workshop zum Thema „Versionskontrolle mit Git“, der durch Harald von Waldow (Johann Heinrich vom Thünen-Institut in Braunschweig, assoziiert mit Software Carpentry) geleitet wurde. Vorträge und Posterbeiträge befassten sich mit der Auswertung spektroskopischer und spektrometrischer Daten zur Analyse von Impfstoffen, Tabletten und Lebensmitteln. Drei Keynote-Vorträge der nationalen und internationalen Spezialisten Stephan Seifert (Hamburg School of Food Science), Tom Fearn (University College London) und Frank Westad (Norwegian University of Science and Technology in Trondheim & Idletechs) widmeten sich den Themen Random-Forest, Grundprinzipien der multivariaten Kalibrierung sowie Validierung. Das wissenschaftliche Programm wurde abgerundet durch zahlreiche Präsentationen und Poster junger WissenschaftlerInnen. Präsentationen von Sponsoren sowie eine Exkursion zu GALAB, einem Dienstleistungslabor in Hamburg, boten zudem Gelegenheit, potenzielle zukünftige Arbeitgeber kennenzulernen.

Seit April 2024 arbeiten, neben einem Vorstandsmitglied, fünf ständige Mitglieder aus der Fachgruppe sowie eine variable Anzahl von Gästen in der Task-Force „Leitlinien“ an einer Guideline mit dem Arbeitstitel „Multivariate Kalibrierung“. In regelmäßigen virtuellen Treffen standen 2025 insbesondere die gemeinsame Sichtung und Analyse geeigneter Referenz-Datensätze, die als Bestandteil der geplanten Guideline ebenfalls veröffentlicht werden sollen, im Vordergrund.

Im Arbeitskreises Chemometrik und Qualitätssicherung werden Sponsorengelder für Veranstaltungen akquiriert und die AK Webseite gepflegt. Zudem wurde ein Folienmaster für einheitliche Präsentationen erstellt. Zukünftige Aufgaben werden die Erstellung von Flyern und Aufstellern sowie die Vorbereitung von Social-Media-Auftritten umfassen.

Dr. Claudia Beleites, Chemometrix GmbH, Wölfersheim

Prof. Dr. Stephan Seifert, Universität Hamburg

Joscha Christmann, Hochschule Mannheim

Dr. Andrea Paul, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Berlin