

Universitäre Ausbildung im Fach „Chemometrie“ in der Lebensmittelchemie

Positionspapier der Arbeitsgruppe Hochschullehre

Stand: März 2022

Die nicht-zielgerichtete Analytik von Lebensmittelinhaltsstoffen und die damit verbundene Multivariate Datenauswertung gewinnen zunehmend an Bedeutung. Daher sollte angestrebt werden, das Fach „Chemometrie“ in die universitäre Ausbildung von Lebensmittelchemiker/innen einzubinden und in die Studienpläne zu integrieren. An einigen Universitäten werden bereits Lehrveranstaltungen mit derartigen Inhalten angeboten und Lehrinhalte anwendungsbezogen in die Praktika integriert. Die Arbeitsgruppen Chemometrie und Hochschullehre der Lebensmittelchemischen Gesellschaft haben deshalb in enger Abstimmung die folgenden Lehrinhalte zur Ausbildung im Master- bzw. Hauptstudium erarbeitet. Die inhaltlichen Empfehlungen sind nachstehend zusammengefasst. Hierbei wird davon ausgegangen, dass die Studierenden im Rahmen von einer im Grundstudium/BSc üblichen Vorlesung wie „Mathematik für Chemiker/innen“ Grundkenntnisse in univariater Statistik und Vektoralgebra erworben haben. Wichtig hierbei ist der Praxisbezug durch Üben an Beispieldatensätzen. Fokus sollte nicht auf der mathematischen Durchdringung liegen, sondern in einer kompetenten Anwendung.

Signalverarbeitung (*signal processing*)

z. B. Präprozessierung, Umgang mit “missing values“

Optimierung und statistische Versuchsplanung

z. B. Design of Experiment (DoE), Varianzanalyse

Qualitative Methoden / Visualisierung von Daten / Mustererkennung und Klassifizierung

z. B. Hauptkomponentenanalyse (Principal Components Analysis, PCA) und/oder Clusteranalyse (cluster analysis)

Quantitative Methoden / Modellierung und Kalibration (*modelling and calibration*)

z. B. Partial Least Squares (PLS)

Analytische Qualitätssicherung (*quality assurance*)

z. B. Möglichkeiten und Grenzen der multivariaten Methoden, Validierung von multivariaten Klassifizierungs- und Kalibrations-Methoden