

Seit 35 Jahren entwickelt und fertigt AMA Instruments analytische Systeme zur Messung organischer Komponenten. Unsere Geräte dienen zur Überwachung industrieller Prozesse und leisten einen wichtigen Beitrag zum Schutz von Mensch und Umwelt.

Im Rahmen der Neuentwicklung einer Steuer- und Auswertesoftware für unsere Online-GC-Systeme möchten wir eine Bachelorarbeit zu folgendem Thema vergeben:

## **Auswahl und Implementierung numerischer Verfahren zur Auswertung von Chromatogrammen**

Im Rahmen dieser Bachelorarbeit sollen folgende Aufgaben bearbeitet werden:

- Durchführung einer Literaturrecherche zu numerischen Verfahren und Algorithmen für die Auswertung von Chromatogrammen
- Auswahl geeigneter numerischer Verfahren zur Identifizierung von Peaks in Chromatogrammen
- Auswahl geeigneter numerischer Verfahren zur Integration von Peaks (Ermittlung von Retentionszeit, Basispunkten, Peakfläche, Peakhöhe, Halbwertsbreite) unter Berücksichtigung verschiedener, in der Praxis häufig vorkommender Fälle (getrennte Peaks, überlagerte Peaks, Schulterpeaks, ansteigende/abfallende Grundlinie, ...)
- Implementierung der ausgewählten numerischen Verfahren durch Entwicklung geeigneter Softwarealgorithmen in C# zur Auswertung von Chromatogrammen (MS Visual Studio 2010)
- Verifizierung der implementierten Algorithmen durch Vergleich der berechneten Daten mit den Ergebnissen kommerziell erhältlicher Software zur Auswertung von Chromatogrammen

Die angebotene Bachelorarbeit kann auch mit einem Praktikum verbunden werden.

In diesem Fall besteht ggfs. die Möglichkeit das Thema der Bachelorarbeit um die Implementierung folgender Software-Algorithmen zu erweitern:

- die graphische Darstellung von Chromatogrammen
- die Zuordnung von Peaks (Setzen von Retentionszeitfenstern)
- die Gerätekalibrierung (Zuordnung der ermittelten Daten aus den Chromatogrammen zu vorgegebenen Prüfgaskonzentrationen und Berechnung der Kalibrierfunktion)
- die Berechnung der gemessenen Konzentrationen auf Basis der ausgewerteten Daten und der zuvor ermittelten Kalibrierfunktion

Die Bachelorarbeit könnte somit die weitgehend komplette Entwicklung einer Software zur Auswertung von Chromatogrammen umfassen.

Von Seiten der Universität Ulm wird die Arbeit von Herrn Prof. Dr. Karsten Urban, Institut für Numerische Mathematik, betreut. Bei Interesse nehmen Sie bitte direkt Kontakt mit Herrn Prof. Dr. Urban auf:

E-Mail: karsten.urban@uni-ulm.de, Raum 162, Tel.: 0731 50-23535