

dsk.2014.konference – endnu en succes

Den fjerde dsk.20xx.konference, arrangeret af Dansk Selskab for Kemometri, blev afholdt den 5.-6. november på Hotel Nyborg Strand med ca. 45 deltagere. Konferencen var en blanding af faglige indlæg, herunder bidrag fra tre internationale topnavne, netværksdannelse og –vedligehold samt socialt samvær.

Af Lars P. Houmøller, Vitalys

Dansk Selskab for Kemometri (DSK; se faktaboks) har opbygget en tradition for afholdelse af en national konference hvert andet år, og den fjerde blev som de tidligere afholdt i fine omgivelser og med gode faciliteter på Hotel Nyborg Strand. Formanden Per Waaben Hansen bød velkommen til et program med fem faglige sessioner, herunder en Keynote-session med indlæg fra de internationalt kendte kemometrikere Rasmus Bro, Age Smilde og Barry Wise.

Konferencen blev støttet af sponsorerne Arla, Foss og Q-interline.

Praktiske anvendelser

I den første session gav Jacob Christensen fra UMETRICS et indlæg om vigtigheden af at inddrage usikkerheder i optimering vha. forsøgsplanlægning. Henrik Toft fra Biogen Idec beskrev, hvorledes man gradvist har indført multivariabel procesovervågning, figur 1, og hvorledes der kan opnås større produktivitet og mindre variabilitet med avanceret proceskontrol.

Jacob Lercke Skytte fra DTU Compute viste, hvordan man kan beskrive mikrostrukturen i yoghurt vha. målinger af

2D lysspredningen fra det øverste lag af prøven. Teksturen, som er en kombination af den kemiske sammensætning og mikrostrukturen, har stor betydning for forbrugernes vurdering af yoghurt.

■ Faktaboks

Dansk Selskab for Kemometri (DSK) er et selskab under K-gruppen i Ingeniørforeningen i Danmark (IDA), som ledes af et kontaktudvalg på otte personer fra industri og universiteter.

DSK arrangerer faglige møder samt nationale og internationale konferencer og holder kontakt til de øvrige kemometriske selskaber i Skandinavien.

Informationer om dsk.2014.konference kan findes på <http://dsk2014.dk>, og præsentationerne er tilgængelige på <https://mit.ida.dk/IDAforum/U0602c/Sider/Forside.aspx>.

Metabolomics

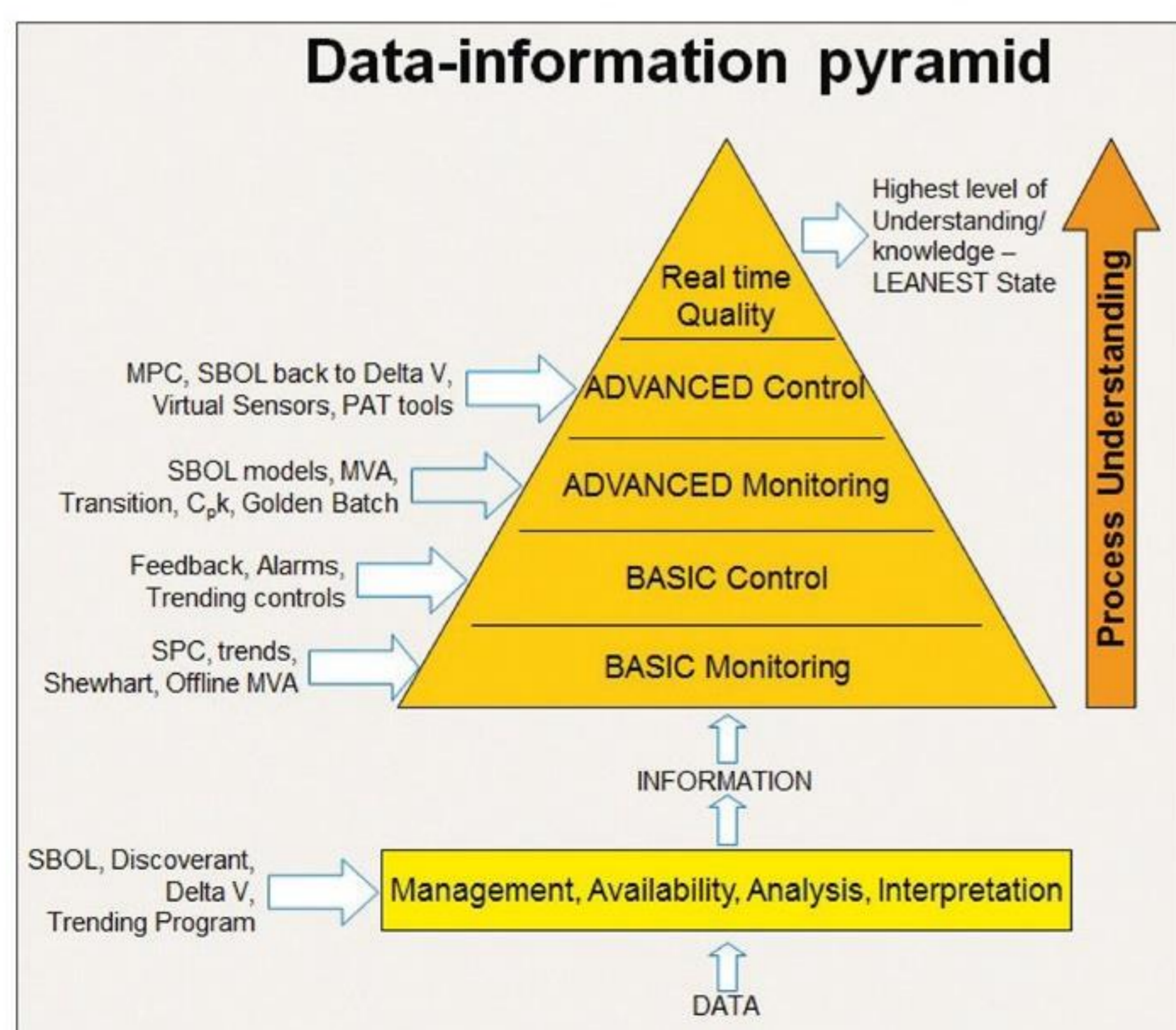
Lars Ove Dragsted fra Københavns Universitet beskrev identifikation (vha. LC-MS analyse) og anvendelse af biomarkører i fødevarer til beskrivelse af metabolismen, hvorefter Ulrik Kræmer Sundekilde fra Aarhus Universitet viste, hvordan man ud fra NMR og LC-MS data kan beskrive ændringer i mælk-sammensætning som funktion af tid, samt forskelle mellem mælk fra mødre til for tidligt fødte børn og til børn født til normal tid.

Billedanalyse

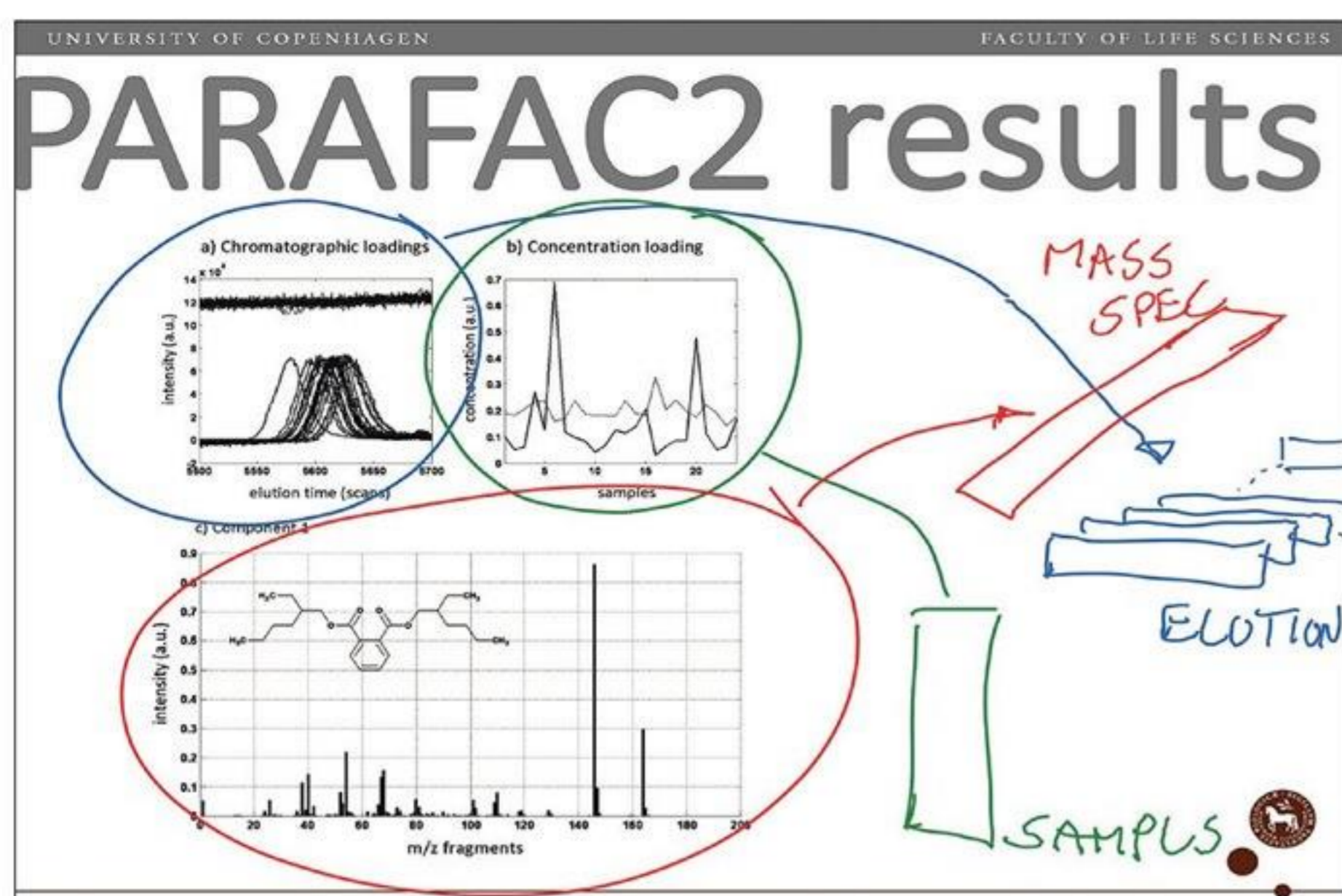
Jens Michael Carstensen fra Videometer omtalte teori bag og praktiske anvendelser af billedanalyse, bl.a. eksemplificeret ved klassificering af ris og hvede.

Flemming Møller fra DuPont Nutrition Biosciences beskrev teknikker til at fjerne støj i billeder forud for den egentlige analyse samt til at fjerne effekter af skygger og refleksioner, eksemplificeret med billeder af farmaceutisk pulver og brød. Endvidere blev der beskrevet segmenteret modellering til klassificering af indholdet i uhomogene fødevarer, eksemplificeret med kød og fedt i salami.

Otto Højager Attermann Abildgaard fra DTU Compute viste anvendelser af photon time of flight (PToF) spektroskopi til adskillelse af absorptions- og spredningsbidrag i NIR-spektre. Med farmaceutiske tabletter som eksempel kan absorptionsdelen anvendes til kvantificering af aktiv ingrediens, og



Figur 1. Avanceret proceskontrol hos Biogen Idec (indlæg af Henrik Toft).



Figur 2. PARAFAC2 til analyse af GC-MS data (indlæg af Rasmus Bro).

spredningsdelen til beskrivelse af kompakteringsgrad og partikelstørrelse.

Kalibrerings-vedligehold

Anders Larsen fra Q-interline introducerede et nyt net-baseret system til at administrere data, kalibreringer og udstyr. Systemet er ikke begrænset til udstyr eller kalibreringsprogrammel fra bestemte leverandører og er derfor meget generelt anvendeligt.

Åsmund Rinnan fra Københavns Universitet beskrev metoder til automatisk bestemmelse af antallet af faktorer i PLS-kalibreringer – et endnu ikke afsluttet projekt.

Keynote

Sessionen indledtes af professor Rasmus Bro fra Københavns Universitet, som viste anvendelse af PARAFAC2 til bestemmelse af antal komponenter under overlappende (og evt. forskudte) kromatografiske toppe, figur 2.

Age Smilde fra Amsterdam Universitet beskrev brugen af forskellige challenge tests (f.eks. indtagelse af glukose eller medicin) og måling af metabolitter som funktion af tid til opstilling af modeller for metabolisme.

Barry M. Wise fra Eigenvector Research afsluttede med en diskussion om det u hensigtsmæssige i at bruge ressourcer på

at forsøge at modellere ”ubrugelige” data, samt hvordan man på pædagogisk og diplomatisk vis kan informere herom til de kunder/brugere, som har leveret data. Barry introducerede en ny betegnelse for vurdering af kalibreringer: ”Skele”-testen (engelsk: ”squint”), som består i simpel visuel vurdering af relevante plot – statistiske tests har begrænset værdi, da forudsætningerne sjældent er opfyldt.

dsk.faktor

Foruden ovenstående sessioner var der igen den populære dsk.faktor, hvor fire ph.d.-studerende fik fem min. til at fremlægge deres arbejde, og tilhørerne kunne derefter stemme på deres foretrukne kandidat.

Alle fire overholdt tiden, og vinder af konkurrencen blev Carina Svendsen med titlen ”Get to know your yoghurt bacteria and save the world”.

dsk.dating

Før konferencemiddagen torsdag aften var der en times dsk.dating, hvor man med fem min. intervaller skiftede samtalepartner og dermed fik mulighed for at udvide sit netværk. At dømme efter støjniveauet i lokalet var dette tilbagevendende indslag igen en stor succes.

Morgenløb

En anden traditionel aktivitet var morgenløbet fredag kl. 7, som blev ledet af John Holm med kraftig pandelygte i efterårsmørket. Denne aktivitet havde kun vindere, idet det lykkedes alle at gennemføre og finde tilbage til Nyborg Strand og morgenmaden.

Gode fremtidsudsigter

Kemometrien har traditionelt stået stærkt i de skandinaviske lande, og dsk.2014.konference viste, at aktiviteterne stadig er på et højt niveau, og at metoderne finder anvendelse inden for stadig flere fagområder. Der er god grund til at forvente, at kemometrien i Danmark vil opretholde det høje niveau inden for både industri og forskning, og vi ser frem til at mødes til næste dsk.20xx.konference og høre om den seneste udvikling!

E-mail:

Lars P. Houmøller: lph@vitalys.dk

Industripris 2014

Danmarks Naturvidenskabelige Akademi har tildelt Akademiets Industripris for 2014 til Mogens Rysholt Poulsen, Institutdirektør for DTU Nanotech, Danmarks Tekniske Universitet.

Mogens Rysholt Poulsen modtager DNAs industripris for fremragende og imponerende bidrag til at forbinde grundforskningen med anvendt forskning og innovation.

Mogens Rysholt Poulsen er i dag direktør for DTU Nanotech, tidligere Mikroelektronik Centret (MIC), hvor forskning og uddannelse af højeste standard går hånd i hånd med innovation og teknologioverførsel til industrien. Gennem de seneste seks år, hvor Mogens Rysholt Poulsen har været institutdirektør for DTU Nanotech, er instituttets innovations-output steget meget markant – bl.a. er antallet af anmeldelser af opfindelser pr. år næsten fordoblet til i dag at udgøre ca. en fjerdedel af DTU's samlede antal pr. år; antallet af spin-out virksomheder og spin-out virksomheder under forberedelse er steget betydeligt gennem de sidste år, alene i 2014 er der indtil nu etableret seks nye virksomheder, samtidigt med at samarbejder med eksisterende industri

også er steget. Og dette er opnået uden at gå på kompromis med kvaliteten af forskningen og uddannelserne – tværtimod. Denne styrke bevidnes også af, at DTU Nanotech nok er den største aktør hos Højteknologifonden. Mogens Rysholt Poulsen har stået i spidsen for denne udvikling, og det er i høj grad hans evne til at se muligheder og behov hos industrien og sammenholde og afstemme disse med kompetencerne i forskningen, der gør en forskel.