

■ DET KEMOMETRISKE RUM



Vi har siden december 2007 haft den fornøjelse at skrive en månedlig klumme i Dansk Kemi. Tiden er moden til at afslutte disse, og vi vil gerne sige tak for denne gang.

Af Lars Nørgaard, FOSS, Rasmus Bro og Søren Balling Engelsen, Institut for Fødevarevidenskab, Københavns Universitet

I 2007 fik vi den glædelige nyhed, at Dansk Kemi gerne ville oprette Det Kemometriske Rum som en fast klumme i bladet. Det har ført til 53 klummer om forskellige kemometriske metoder, anvendelser og afarter herfra med bidrag og inspiration fra rigtig mange gode kollegaer.

Oversigten over de 53 klummer ser således ud:

1. Hvorfor multivariat dataanalyse? [12 2007]
2. Principal Component Analysis – den kemometriske arbejdshest [1 2008]
3. Principal Component Analysis af nærinfrarøde spektroskopiske data [2 2008]
4. Outlier's i PCA – fokus på individet! [3 2008]
5. PCA som eksplorativt værktøj – karakterisering af en dynamisk proces [4 2008]
6. Kalibrering i analytisk kemi – Principal Component Regression [5 2008]
7. Ekstrakt i øl bestemt med Principal Component Regression [8 2008]
8. Arbejdshesten i multivariat kalibrering – Partial Least Squares [11 2008]
9. En spektroskopisk hurtigmetode: Protein i hvedekerner [12 2008]
10. Forbehandling af spektroskopiske data [1 2009]
11. Intermezzo: tre ligninger med fire ubekendte [2 2009]
12. Krydsvalidering [3 2009]
13. Kemometrisk kvalitetskontrol af alginate – et eksempel fra den virkelige verden [4 2009]
14. Eksplorativ evaluering af samspillet mellem dioxin og fede syrer i fiskemel [5 2009]
15. Bestemmelse af dioxin i fiskemel ud fra fedtsyresammensætningen [6-7 2009]
16. Klassifikation med Principal Component Analysis [8 2009]
17. Sukker, fluorescens og SIMCA [9 2009]
18. Klassifikation med Partial least Squares-Diskriminant Analyse [10 2009]
19. Hvis fit er godt, hvad er overfit så? [1-2 2010]
20. Ud med skidtet behold kanelet: variabelseleksion [3 2010]
21. Interval PLS - når dine variable skal vælges med omhu [4 2010]
22. En kemisk forklaring! [5 2010]
23. Find få nåle i høstakken: forward selection [6-7 2010]
24. Jack-knifing – "cut the crap" [8 2010]
25. Tiderne skifter ... [9 2010]
26. CTRL-ALT-SHIFT [10 2010]
27. Når diskrimination er godt [11 2010]
28. Klassifikation af spektrale data med Extended Canonical Variates Analysis [12 2010]

29. Intervalbaseret klassifikation med iECVA [1-2 2011]
30. Analyse af blandinger med MCR [3 2011]
31. Separation af alkoholer med Multivariate Curve Resolution [4 2011]
32. Forbedret alginat-analyse med solid state NMR og Multivariate Curve Resolution [5 2011]
33. Hyperspektral imaging og MCR i farmaceutisk kvalitetskontrol af tabletter [6-7 2011]
34. Kemometri i metabonomics [8 2011]
35. Alt det gode ved at bruge mange variable I [9 2011]
36. Alt det gode ved at bruge mange variable II [10 2011]
37. Fra tabeller til kasser af data [11 2011]
38. Kromatografi i computeren [12 2011]
39. EEM + PARAFAC = Kromatografi [1-2 2012]
40. Se lyset i osten [3 2012]
41. PARAFAC, NMR og lipoproteiner [4 2012]
42. Når PARAFAC ikke virker [5 2012]
43. Multivejs-vekselvirkninger: Tucker3-modellering [6-7 2012]
44. Tucker3 kan håndtere alle typer af multivejsdata [8 2012]
45. Anvendelse af Tucker-modellering i miljøovervågning [9 2012]
46. Overlappende toppe i kromatografi [10 2012]
47. PARAFAC2: Et nyt kromatografisk redskab [11 2012]
48. Plante-metabolomics: opdagelse af nye bioaktive stoffer med PARAFAC2 [12 2012]
49. Multi-eksponentiel analyse: CuSO₄, relaxometri og multivejskemometri [1-2 2013]
50. Kalibrering med multivejsdata – teorien bag [3 2013]

51. Trevejs-data skal modelleres med trevejs-modeller [4 2013]
52. Anden-ordens kalibrering – et paradigme-skift i analytisk kemi [5 2013]
53. Anden-ordens kalibrering i praksis [6-7 2013]

Kemometri i Danmark

Det kemometriske miljø i Danmark blomstrer som aldrig før, både på universiteterne og i industrien. I 1980'erne var Danmark bagud i forhold til vores nabolande Sverige og Norge, men det er nu ændret, så DK er med i front, bl.a. som spydspids inden for multivejsanalyse, procesanalytisk teknologi samt spektroskopiske applikationer.

Med hensyn til sidstnævnte kan det nævnes, at der var betydelig dansk deltagelse ved den netop vel gennemførte internationale nærinfrarød spektroskopikonference ICNIRS 2013, og for første gang er det lykkedes at få konferencen til Danmark med Søren Balling Engelsen som chairman (i 2017 i København).

Outro

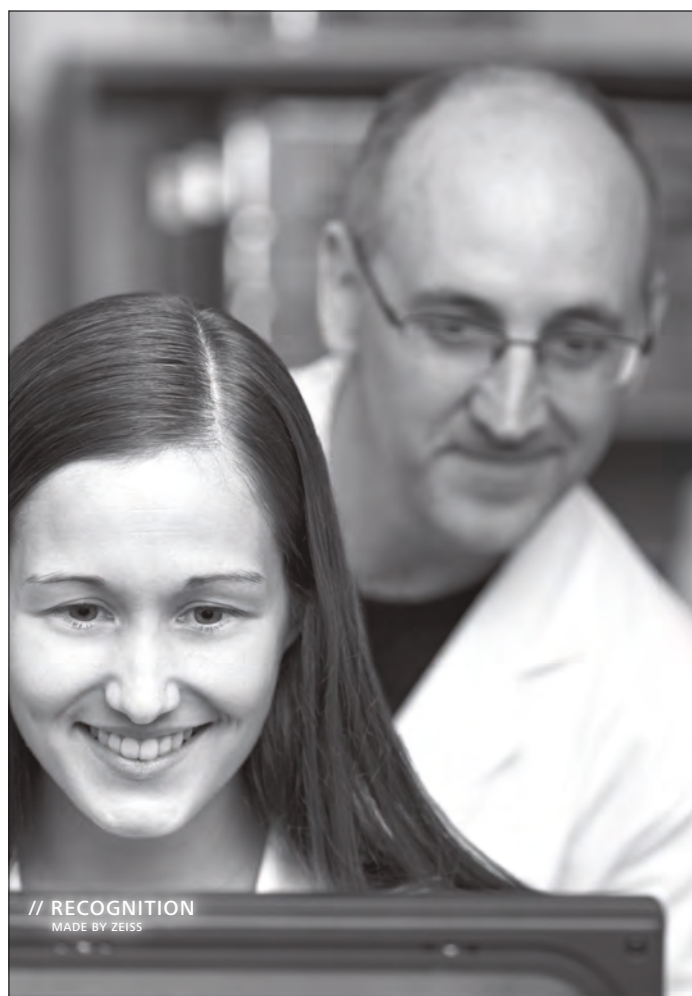
Vi takker Dansk Kemi for rigtigt godt samarbejde gennem de seneste 5½ år samt eventuelle læsere. Der er planlagt en historisk opfølgingsklumme om udviklingen af kemometri i Danmark i et senere nummer af Dansk Kemi.

E-mail-adresser

Rasmus Bro: rb@life.dk.

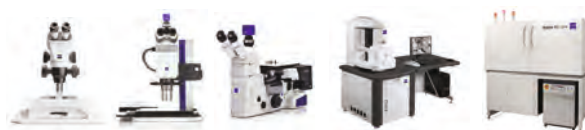
Søren Balling Engelsen: se@life.ku.dk

Lars Nørgaard: lno@foss.dk



// RECOGNITION
MADE BY ZEISS

The moment your data change
scientific minds.
This is the moment we work for.



As the leading manufacturer of microscope systems we offer complete solutions for biomedical research, the healthcare sector and high-tech industries. Our product line spans a broad spectrum of light, confocal and electron microscopes for your tasks and applications. **NEW!** X-ray microscopes for three-dimensional imaging.

Brock & Michelsen A/S
A Carl Zeiss Company
www.zeiss.dk

