



Der deltog 76 deltagere, der alle udviste en høj grad af engagement.

# DSK: Dating Symposium<sup>1</sup> for Kemometrikere?

**Dansk Selskab for Kemometri afholdte sin første 2 dages konference den 10.-11. januar på Hotel Nyborg Strand. Blæst og regn afholdt ikke Danmarks kemometrikere for at møde veloplagte til en konference, som gav god mulighed for at tilegne sig faglig viden, opdatere sit netværk, deltage i workshops og få et filosofisk overblik på kemometri.**

*Af Vibeke T. Svensson og Christian B. Zachariassen, Københavns Universiteter*

Lars Nørgaard, Københavns Universitet åbnede ballet ved at byde velkommen og gav ordet til konferencens åbningstaler Klaas Faber, 2CY. Titlen "Uncertainty in Chemometrics" dækkede godt over hvad foredraget indeholdt. Han understregede hvor vigtigt det er, at evaluere sine resultater i forhold til de usikkerheder der kan være i forbindelse med de forsøg, der ligger til grund for ens databehandling. Det »glemmes« ofte når man går fra univariat til multivariat databehandling. Og som professor Massart har udtalt: "Univariate calibration is nice and clean - multivariate calibration is wild west". Foredraget var vekslende mellem citater fra litteraturen, teoretisk gennemgang af usikkerheder og illustration med praktiske eksempler.

Resten af formiddagens program var mere procesorienteret. Christian L. Hansen, Københavns Universitet gav et foredrag med titlen: "Data Analysis for Dynamic Systems in Dairy Processes". I sit projekt har han opsat et laboratoriemejeri, hvor han laver letmælk ud fra en blanding af minimælk og sødmælk. Han konkluderede at Nær Infrarød (NIR) spektroskopi kan prædiktere den skiftende fedtkoncentration i blandingen. Jens Bo Holm-Nielsen, Aalborg Universitet Esbjerg, overraskede alle ved ikke at være en typisk »ung« ph.d. studerende. Foredraget

bar også tydeligt præget af at Jens laver projekt om et område han har stor passion for, og har beskæftiget sig med i mange år, nemlig "On-line monitorering af anaerobe processer til biogasproduktion". Biogas har stor bevågenhed, og som han nævnte, så produceres der i EU årligt gylle fra svin og kvæg svarende til 18½ mio. tons olie – hvoraf kun en brøkdel udnyttes til energifremstilling.

Formiddagskaffen blev efterfulgt af en opfordring fra Anders Larsen, Q-Interline, til at prøve kræfter med andre kemometriske metoder end de ofte anvendte og velkendte lineære metoder såsom Principal Component Analysis (PCA) og Partial Least Squares (PLS) regression. Nye instrumenter har en følsomhed, som gør at "almindelige" PLS kalibreringer ofte ikke giver det bedste resultat. Danmarks Tekniske Universitet var repræsenteret ved Nanna Pedersen som fortalte om "Analyse af NIR data fra *Sterptomyces coelicolor* fermenteringer". Her blev NIR testet til online monitorering i løbet af fermenteringer og de foreløbige resultater var positive, idet NIR kan prædiktere glukoseforbruget i løbet af fermenteringen.

Marianne Toft, Umetrics gav to eksempler i sit foredrag med applikation af "MSPC i lægemiddelindustrien". Hovedpunkter- ►

<sup>1</sup> Symposium betyder oprindeligt drikkelag (det græske verbum sympotein betyder »at drikke sammen«) men er siden hen kommet til at betyde akademisk konference, uanset om der drikkes eller ej. (frit oversat efter det engelske opslag på Wikipedia, 2008).



Det kemometriske speeddating indslag scorede godt ved evalueringen af konferencen.

ne var, at man med fordel kan anvende MSPC til batch modellering, hvis der foretages den rette opdeling af batchforløbet. Den anden pointe var, at det er muligt med Orthogonal PLS (OPLS) at fremme tolkingen af en MSPC model og ikke som ofte misforstået, at forbedre prædiktionen.

Formiddagens sidste indslag blev givet af Morten Allesø, Københavns Universitet. Og til trods for placeringen tæt på frokost, formåede han at holde forsamlingens opmærksomhed med foredraget "Exploring solvent space as a part of polymorph screening". Morten fulgte Anders Larsens inspiration om at tænke udover PCA og gennemgik en yderst lovende metode når der skal sammenlignes opløsninger vha. mange variable. Metoden hedder Self Organizing Maps (SOM) og er baseret på såkaldte Kohonen maps.

Torsdagens formelle program sluttede af med fire parallelsessioner, som blev gentaget to gange, så man havde mulighed for at høre to ud af de fire foredrag; eller få gentaget det samme foredrag to gange, hvis ikke man fik det hele med første gang!

## Kemometri på guitar

Carsten Ridder, Lattec og Lars Houmøller, Arla gav en "Introduktion til kemometri". Carsten illustrerede mange kemometriske pointer med sin guitar og fik på den måde både overfittet og underfittet sangen "Jeg ved en lærkerede". Lars spillede på NIR og fik både klassificeret farmaceutiske tabletter med PCA, PLS og neurale netværk. Den anden parallelsession, som Anders Sparén, AstraZeneca holdt, omhandlede »Kalibreringsoverførsel« fra et instrument til et andet (og et tredje.....) Det kan heldigvis lade sig gøre, men det er en god idé at overveje, før sit eneste instrument er gået i stykker! Per Brockhoff, Danmarks Tekniske Universitet gav en forelæsning om "Statistik for kemometrikere" om sammenhængen mellem traditionelle »kemometriske« fejlmål og statistiske konfidensintervaller. Endeligt gav Rasmus Devantier, Novozymes et indlæg om "Forsøgsdesign i praksis". Der blev gennemgået screenings-, optimerings- og blandingsdesign med eksempler primært omhandlende enzymer.

## Speeddating for kemometrikere

Et af de mere sociale indslag var *speeddating* for kemometrikere, som løb af stablen torsdag før aftenmaden. Speeddating er et fænomen, som nok mest er kendt blandt singler, der færdes i storbyernes cafémiljø. Typisk er det organiseret ved at 20 kvinder placeres ved 20 borde og 20 mænd skiftes til at besøge kvinderne. Man har så 4 minutter til at finde ud af om man »passer« sammen. Efter sessionen bliver det så afsløret om man matcher hinanden.

I kemometrikereggi måtte man dog nøjes med seks personer.

Sessionen, blev styret med hård hånd af Merete Norsker, Labo-rantskolen og Georg Rønsch, DONG Energy. Holdene var delt ind på forhånd på tværs af køn, alder, erfaring og arbejdssted. Efter samme »dating« princip, fik man så tildelt 4 minutter til at spørge hinanden ud om arbejdsområde og fælles interesser, og selvom man kunne »risikere« at møde en man kendte i forvejen, kunne man nok opdatere hinanden alligevel. Efter støjniveauet i lokalet at dømme, var der en hel del der matchede, så mon ikke der blev udvekslet en del mobiltelefonnumre og hotmail adresser i løbet af sessionen?!?

## Se ikke-destruktivt på Verden

Fredagen startede med endnu en parallelsession. Den første omhandlede »Fælles Dataanalyse«, hvor Carsten Ridder, Lattec og Lars Houmøller, Arla gennemgik et datasæt omhandlende fluorescensmålinger på sukker fra forskellige sukkerfabrikker. Deltagerne havde selv medbragt computer og kunne selv »følge med« og deltage i tolkningen af de kemometriske modeller. Parallelt med dette var der en session om avanceret dataanalyse, hvor Frans van den Berg, Københavns Universitet, egentlig skulle holde indlæg om "Andre Kemometriske Teknikker end PCA og PLS", men som han gav udtryk for, ville han hellere fokusere på antitesen "Kemometri er *kun* PCA og PLS". Antitesen viser sig at holde stik langt hen ad vejen! PLS kan ses som en variant af PCA; godt nok med en heftig matematisk omskrivning. Men man kommer langt med blot PCA og PLS, og en anden af Frans' pointer var, at man kun har behov for et nyt stykke værktøj, når det gamle ikke duer. Man kan således løse mange problemer med en hammer!

Ville man, trods alt, gå lidt mere delikat til værks, kunne Christian Zachariassen og Lars Nørgaard, begge fra Københavns Universitet underholde om henholdsvis "Multivariate Curve Resolution – et Supplement til PARAFAC modellering" og "Extended Canonical Variates Analysis (ECVA)". Førstnævnte omhandlede en fleksibel metode til at opløse multivejs spektre på og sidstnævnte en klassifikationsmetode, der bruger en PLS-lignende algoritme til at maksimere forskelle mellem klasser.

Formiddagen sluttede med en eksplorativ vitaminindsprøjtning af Professorerne Lars Munck, Københavns Universitet og Kim Esbensen, Aalborg Universitet Esbjerg. Lars Munck gav et filosofisk input på "En Ny Holistisk Tilgang til Biologiske Systemer Evalueret med NIR" og argumenterer for, at Verden er et netværk af selv-organiserende processer, som skal observeres med ikke-destruktiv analyse. Især sidstnævnte pointe med "ikke-destruktiv analyse af Verden" er vi mange, der er enige i. Kim Esbensen pointerede at fokus *ikke* skal være på prøvens facit, forstået som resultatet af den kemometriske kalibrering; men derimod hele prøvens rejse fra første prøveudtagning og



Lars Nørgaard, Københavns Universitet åbner konferencen og præsenterer sponsorerne.

efterfølgende neddeling, kemisk måling og kemometrisk modellering. Fokus skulle i stedet være på datakvalitet frem for det kvantitative resultat.

Og således sluttede det sidste foredrag fredag med samme pointe som det første foredrag torsdag: Man skal kende sine usikkerheder og sin datakvalitet.

## Masser af succes

Konferencen blev afholdt for fulde huse, 76 deltagerne fordelt over hele Danmark var mødt op. Der var en god fordeling af deltagerne, der var repræsenteret af både universiteterne, industrien og instrument- og softwareleverandører. Foredragene var også spredt over alle områder og var også flot repræsenteret af ph.d. studerende. Hele konferenceprogrammet inkl. mange præsentationer er tilgængeligt på <http://equationz.homepage.dk/dsk2008/>

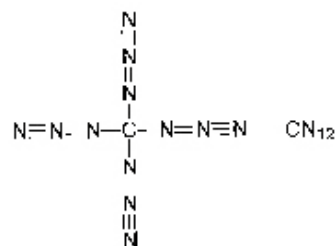
Konferencen gav en bredt udbud på hvad der er på færde i danske kemometrikredse og som stemningen også bar præg af, er Dansk Selskab for Kemometri som en stor familie. Netværksdatingen var et festligt indslag og en god mulighed for nye kemometriaspiranter til at lære de ældre familiemedlemmer at kende.

Konferencen blev gennemført med støtte af sponsorer og udstillere: IDA, Camo A/S, Einar Willumsen A/S, Laborant-skolen, FOSS, SFK, Novozymes A/S, Q-Interline, Umetrics, Epital, Videometer og Aalborg Universitet, Esbjerg. Dansk Selskab for Kemometri stod for det praktiske sammen med IDA. Konferencen var en varmt indslag i det danske våde vintervejr og efter 2 dage må det siges at folk vendte hjem med et godt overblik over hvad dansk kemometri kan byde på. Så

det er med spænding at vi venter på hvad dansk kemometri har at byde på om 2 år.

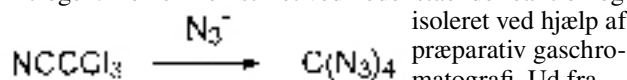
[czachariassen@gmail.com](mailto:czachariassen@gmail.com)

## Nyt om...



## ... tetraazidomethan

Tetraazidomethan er en højeksplosiv væske, der skal behandles med yderste forsigtighed. Den indeholder 93,3% nitrogen. Den er fremstillet ved nedestående reaktion og er isoleret ved hjælp af præparativ gaschromatografi. Ud fra retentionstiden, der ligger mellem *n*-nonans og *n*-decans, anslås kogepunktet for forbindelsen til ca. 165°C.



Carl Th.

The Exciting Chemistry of Tetraazidomethane, *Angewandte Chemie Int. Ed.* 45, 2007, 1168.

## BROEN REDLINE

- nødbrusere iht. EN-norm 15154 - 1&2



Rekvirer ny REDLINE brochure hos BROEN

- ✓ Mangeårig erfaring med professionelle nødbruserløsninger i ind- og udland
- ✓ Nye fleksible løsninger giver nem og hurtig montage
- ✓ Skaber sikkerhed på arbejdspladsen
- ✓ I henhold til EN-norm 15154 - 1&2
- ✓ Unik kombination af kvalitet og design

## BROEN

*for the Professionals*

BROEN LAB GROUP · Skovvej 30 · DK-5610 Assens · Tlf. 64 71 20 95 · Fax 64 71 24 76 · E-mail: [lab@broen.com](mailto:lab@broen.com)

[www.broen.com](http://www.broen.com)

AI