



Chemometrische Ecke

Die Chemometrie ist eine wichtige Disziplin in der Nah-Infrarot-Spektroskopie und bei FOSS ist die Chemometrie ein Kernelement in der Produktentwicklung.

In der FOSS-Zentrale in Dänemark arbeiten in der Abteilung Produktinnovation zwanzig Chemometriker. Über fünfundzwanzig Anwendungsspezialisten weltweit nutzen die Chemometrie täglich. Die Chemometrie wird in den Entwicklungsprozess integriert, damit die Grenzen der Kalibrationsbildung weiter verschoben und hochmoderne Analyselösungen geliefert werden können, die die phantastischen Möglichkeiten der Chemometrie voll ausnutzen.

In dieser neuen Rubrik – Chemometrische Ecke – werden verschiedene Aspekte der Chemometrie behandelt. Darin werden grundlegende und zentrale chemometrische Methoden wie die Hauptkomponentenanalyse, PLS-Regression und Artificial Neural Networks (künstliche neuronale Netzwerke) vorgestellt, außerdem werden spezielle Themenbereiche präsentiert, u.a. wie viele Proben für eine Kalibration notwendig sind oder wie

eine NIR-Kalibration weniger Vorhersagefehler als die Referenzmethode erzeugt.

Wir beginnen mit einer Beschreibung des Zugpferds der Chemometrie – der Hauptkomponentenanalyse und der Anwendung dieser Methode bei Nah-Infrarot-Spektren.

Über den Autor

Lars Nørgaard (lno@foss.dk) ist bei FOSS Senior Manager der Chemometrischen Entwicklung. Er hat einen MSc-Abschluss in Chemietechnik, einen PhD-Abschluss in Chemometrie und Analytischer Chemie und ist Affiliate Professor für Chemometrie an der Wissenschaftlichen Fakultät der Universität von Kopenhagen.

Diese Kolumne wurde von den Gastautoren, Professor Rasmus Bro und Professor Søren Balling Engelsen, der Universität von Kopenhagen geschrieben.

 [Download Whitepaper](#)