

PROGRAMME

1^{er} & 2 Décembre 2011



Université Paul Cézanne - Aix Marseille III
Faculté des Sciences et Techniques

Avenue Escadrille Normandie Niémen - 13397 Marseille cedex 20

Partenaires



Jeudi 1 Décembre 2011

09h00 ► **Accueil des participants**

09h30 ► **Ouverture du Congrès par le Doyen de la Faculté des Sciences et Techniques de Marseille et par le Président de la Société Française de Statistique**

Méthodes spectroscopiques

10h00 ► **Conférence plénière: Spectroscopy and Chemometrics for the Pharmaceutical Industry - Process Analytical Technology, Spectral Imaging and Chemical Profiling of Counterfeit**
Yves Roggo, F. Hoffmann - La Roche, Suisse

10h45 ► **Caractérisation de racines d'essences ligneuses par spectroscopie proche infrarouge et analyse chimiométrique**
P. Vanloot, Université Aix-Marseille

11h15 ► **Pause café / Posters / Exposition**

11h45 ► **Lab-on chip for liquid metrology : the example of sub-terahertz hydratation probing**
L. Duponchel, Université de Lille

12h15 ► **Preprocessing spectral data penalized and adaptive methods : from baseline correction to artifact removal**
O. Devos, Université de Lille

12h45 ► **Déjeuner / Posters / Exposition**

Analyse multivariée et Multi-tableaux

14h30 ► **Conférence plénière: A Backward Variable Selection method for PLS regression BVSPS**
Pierre Dardenne, Wallon Agricultural Research Centre, Gembloux, Belgique

14h50 ► **Sparse PLS Deviance Residuals**
P. Bastien, L'Oréal

15h20 ► **Comparison of different strategies of three-way discrimination**
S.S.Ouertani, ONIRIS

15h50 ► **Pause café / Posters / Exposition**

16h20 ► **Deux nouvelles méthodes pour la détermination du nombre optimal de composantes indépendantes : Application à l'étude de dégradation des huiles végétales au cours du chauffage par Analyse en Composantes Indépendantes**
F. Ammari, AgroParisTech

16h50 ► **A new simple method for removing the 1st order rayleigh scatter in 3d front-face fluorescence spectroscopy landscapes**
C. Cordella, INRA/AgroParisTech

17h20 ► **Présentation flash des posters**

17h45 ► **Challenge**
Pierre Dardenne - Wallon Agricultural Research Centre, Gembloux, Belgique

18h30 ► **Cocktail**

▶▶▶▶▶ Vendredi 2 Décembre 2011

Chimométrie : spécial Applications

09h00 ▶ **Conférence plénière : Retour sur le parcours de 20 ans d'application du NIR en raffinerie : différents points et difficultés rencontrés dans l'industrie en matière d'utilisation de la chimométrie**
S. de-Lopez, TOTAL

09h45 ▶ Transfert d'étalonnage dans un cas complexe
Application dans le cadre d'un modèle de discrimination du potentiel aromatique des vins
J. Lallemand, Ondalys

10h15 ▶ **Pause café / Posters / Exposition**

10h45 ▶ Une vue d'ensemble des Plans d'expériences et leurs applications
P. Lantéri, Université Lyon 1, M. Sergent, Université Aix-Marseille

11h15 ▶ Construction de plans uniformes avec variables discrètes
Jenny Santiago, Université Aix-Marseille

11h45 ▶ Génération d'une liste optimale de solvants pour l'analyse de solubilité selon l'approche de Hansen.
Couplage de fonctions de désirabilité à l'algorithme WSP
Adrien Benazzouz, Université de Lille

12h15 ▶ **Déjeuner / Posters / Exposition**

14h00 ▶ Approche pédagogique des plans d'expériences pour l'optimisation d'une mousse au chocolat
Christel Pierlot, Université de Lille

14h30 ▶ Application des plans d'expériences à l'optimisation multicritères de la séparation
par électrophorèse capillaire de résidus d'explosion
J. Vial, ESPCI

15h00 ▶ Quality by design-compliant automated method development and robustness in liquid chromatography
B. Debrus, Université de Genève

15h30 ▶ Application d'une nouvelle méthodologie de développement de méthodes chromatographiques pour lutter contre la contrefaçon des médicaments anti-inflammatoires
A. Dispas, Université de Liège

16h00 ▶ Experimental design used for the determination of influencing factors on the gamma radiolysis of ion exchange resin
Cathie Rébuffa, Université Aix-Marseille

16h30 ▶ **Remise des Prix - Clôture**

17h00 ▶ **Pause café / Posters / Exposition**

Fin

CONTACTS

www.chimimetrie.fr
www.chimimetrie2011/chemom2011
chemom2011@chimimetrie.fr

Les objectifs du congrès

Le congrès annuel du Groupe Français de Chimiométrie, **Chimiométrie 2011**, vise à rassembler Universitaires et Industriels pour faire le point sur les avancées de la Chimiométrie, allant de la collecte de l'information aussi efficacement et précisément que possible à partir de plans d'expériences, à l'analyse et à la modélisation des données. Ce congrès, qui depuis plusieurs années réunit théoriciens et expérimentateurs de tout domaine, a pour vocation de promouvoir l'utilisation de la Chimiométrie au delà même de l'application des Statistiques dans le domaine de la Chimie. C'est un lieu privilégié de rencontres et d'échanges, qui donne la possibilité aux Universitaires et Industriels, sans restriction disciplinaire, de communiquer en faisant état de leurs expériences, de leurs préoccupations et/ou de leurs besoins actuels et futurs.

Challenge 2011

Les challenges organisés par le GFC sous l'autorité de Pierre Dardenne et Juan Antonio Fernández Pierna du centre Wallon de Recherches Agronomiques, CRA-W (<http://cra.wallonie.be/>), se présentent sous la forme d'une énigme. Il s'agit de trouver les réponses d'un ou de plusieurs fichiers-tests à partir d'un fichier d'étalonnage. Les données de ce dernier fichier peuvent être polluées (données manquantes, données aberrantes, etc.). Le fichier d'étalonnage et les fichiers-tests sont mis à la disposition de tous sur le site du GFC. L'analyse des solutions se fait au cours du congrès du GFC et la meilleure solution est primée. Un article paraît dans la revue Chemolab pour faire la synthèse des solutions.

Les Prix du Congrès

Les sociétés BRUKER, CAMO, INFOMETRIX, JUMP, MINITAB et le Centre de Compétence en Chimie et Toxicologie Analytique récompenseront les lauréats des prix :

- Le Prix du jeune chimiométricien
- Le Prix du «Challenge 2011»
- Le prix des meilleures communications (orale et affiche)
- Le prix de la meilleure application en spectroscopie.

Comité Scientifique

Président

Michelle SERGENT - *Université Paul Cézanne, Marseille*

Membres

Philippe BASTIEN - *l'Oréal Recherche, Aulnay-sous-Bois*

Dominique BERTRAND - *INRA, Nantes*

Delphine BOUVERESSE - *INRA, Paris*

Jacques R. CHRETIEN - *BIOCHEMICS, Orléans*

Pierre DARDENNE - *CRA, Gembloux*

Ludovic DUPONCHEL - *LASIR- Université de Lille I*

Philippe GIAMARCHI - *Université de Bretagne Occidentale Brest*

Pierre LANTERI - *Université Lyon 1/CPE Lyon*

Georges OPPENHEIM - *Université Paris Sud - Orsay*

Jean-Michel ROGER - *Unite Mixte de Recherche Cemagref - SupAgro, Montpellier*

Serge RUDAZ - *Université de Genève*

Douglas N. RUTLEDGE - *INRA-AgroParisTech, Paris*

Claude-Alain SABY - *TOTAL France, Solaize*

Gilbert SAPORTA - *CNAM, Paris*

Jérôme VIAL - *ESPCI*

Comité d'organisation

Président

Michelle SERGENT - *Université Paul Cézanne, Marseille*

Membres

Sandrine AMAT - *Université Paul Cézanne, Marseille*

Magalie CLAEYS-BRUNO - *Université Paul Cézanne, Marseille*

Christophe CORDELLA - *INRA/AgroParisTech, Paris*

Nathalie DUPUY - *Université Paul Cézanne, Marseille*

Yveline LE DREAU - *Université Paul Cézanne, Marseille*

Cathie REBUFA - *Université Paul Cézanne, Marseille*

Exposition

Les congressistes pourront s'informer des développements récents en instrumentations et des nouveautés en logiciel ou en édition. Une exposition permettra un contact direct avec les commerciaux des sociétés d'instrumentation et éditrices de logiciels :

