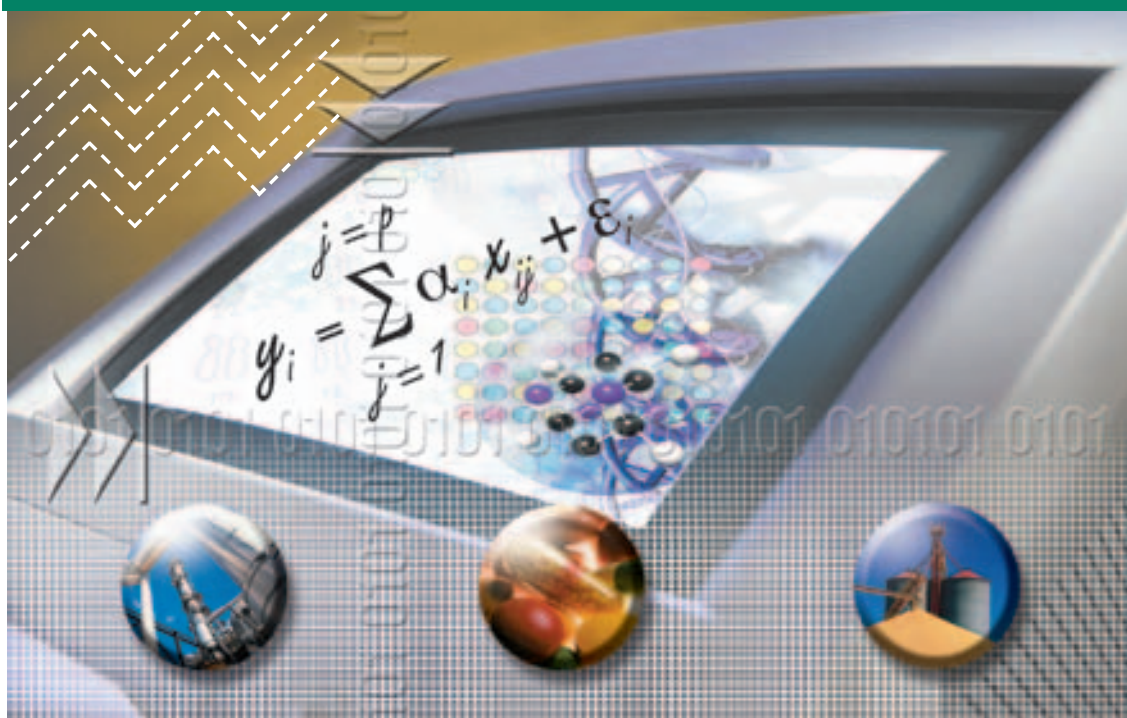


3-4 décembre 2003 - CNAM - PARIS



Chimio**m**étrie 2003

PROGRAMME



Groupe Français de Chimométrie

Avec le soutien de :



euofins





Thèmes scientifiques

Ce Congrès s'adresse à tous ceux pour qui la mesure et le traitement des informations expérimentales ont une importance capitale pour l'interprétation des phénomènes chimiques.

L'accent sera mis sur les domaines et thèmes suivants :

1. Pharmacie, chimie médicinale.
2. Cosmétiques, Parfums et Arômes.
3. Authentification des aliments, sécurité alimentaire.
4. Analyse sensorielle : agroalimentaire, cosmétique, automobile, confort de l'habitation...
5. Environnement.
6. Traitements d'images, résolution temporelle : spectroscopies vibrationnelles, spectrométrie de masse, chromatographie, microscopie...
7. Échantillonnage, Validation de méthode.
8. Génie des procédés : suivi et analyse de process et de batch.
9. Formulation et mélanges.
10. Modèle 2D et 3D en QSAR/QSPR.



web : <http://www.chimiometrie.org>



Publication

Les communications (orales ou par affiche) présentées lors du Congrès pourront être soumises pour publication dans une revue internationale. Les textes définitifs devront être remis à Jacques Goupy lors du Congrès.

Programme des conférences



- 8 h 00** Ouverture du secrétariat et accueil des participants.
- 8 h 30** Accueil par le Pr. Pierre LANTERI, Président du Comité Scientifique.
Le mot de Jacques GOUPY, Président du Groupe Français de Chimiométrie.
Présentation du site Web du GFC, Lalatiana RAKOTOZAFY.

Session A - Méthodes multidimensionnelles "n-ways"

Présidents de session :

Pr. Jean-Pierre HUVENNE / Pr. Alain DELACROIX.

- 9 h 15** Bilinear and trilinear data structures and models for the resolution and interpretation of complex chemical data systems.
Romà TAULER, *Institut d'Investigacions Químiques i Ambientals de Barcelona, Espagne.*

- 10 h 00** Pause / Posters / Exposition.

Session B - Méthodes multidimensionnelles / Applications

Présidents de session :

Dr Philippe BASTIEN / Dr Philippe GIAMARCHI.

- 10 h 30** Application de méthodes chimiométriques de résolution à l'analyse de mélanges complexes de biocides avec des colonnes courtes et couplage LC-DAD/MS.
Emma PERE-TREPAT, *Universitat de Barcelona, Espagne.*
- 10 h 50** Méthodes de résolution de spectres appliquées à l'analyse de polluants atmosphériques. Application à l'analyse de sulfates.
Nathalie DUPUY, *Université d'Aix-Marseille 3, Marseille.*
- 11 h 10** Approche bayésienne pour l'analyse de mélanges de spectroscopie.
Saïd MOUSSAOUI, *Université Henri Poincaré, Nancy I, Vandoeuvre-lès-Nancy.*
- 11 h 30** L'utilisation des méthodes multi-tableaux à partir de deux exemples.
Gérard MAZEROLLES, *INRA, Montpellier.*
- 11 h 50** Simplification et signification des composantes principales.
Stéphanie LEDAUPHIN, *ENITAA / INRA, Nantes.*
- 12 h 10** Déjeuner / Posters / Exposition.



Chimiométrie 2003

Pensez à consulter les dernières informations sur le site : web : <http://www.chimimetrie.org>

Session C - Méthodes multivoies / Analyse d'images

Présidents de session :

Pr. Jacques R. CHRETIEN / Pr. Désiré Luc MASSART.

-
- 13 h 30** Use of 3 ways PCA as data display method.
Riccardo LEARDI - *University of Genoa, Italie.*
-
- 14 h 15** "SegPCT-PCA : Analyse en composantes principales après transformée en composantes principales par segments".
Antonio BARROS, *Universidade de Aveiro, Portugal.*
- 14 h 35** Régression PLS basée sur des projections révélatrices.
Sven SERNEELS, *Universiteit Antwerpen, Belgique.*
- 14 h 55** Application de nouveaux outils d'analyse exploratoire locale à la visualisation et à la résolution des images spectroscopiques.
Anna DE JUAN, *Universitat de Barcelona, Espagne.*
- 15 h 25** Application de SVM (Support Vector Machine) pour la discrimination des particules végétales et animales en imagerie spectrale dans le proche infrarouge.
Pierre DARDENNE, *Agricultural Research Center, Gembloux, Belgique.*
- 15 h 55** Pause / Posters / Exposition.

Session D - Plans d'expériences / Chimométrie industrielle

Présidents de session :

M. Jean-Luc BLACHON / Pr. Jean-Luc VEUTHEY.

- 16 h 25** Fouille de données dans des bases de données de réactions :
Extraction de connaissances sur les méthodes de synthèse.
Claude LAURENCO, *École Nationale Supérieure de Chimie de Montpellier.*
- 16 h 55** Optimisation des conditions de traitement du beurre de cacao en vue de réduire la non-qualité.
Benjamin YAO, *Institut National Polytechnique, Toulouse.*
- 17 h 15** Optimisation des conditions expérimentales avec un plan d'expériences pour l'analyse du gadolinium dans les combustibles irradiés par ICP-MS-MC.
René BRENNETOT, *CEA Saclay, Gif sur Yvette.*
- 17 h 35** Plans d'expérience optimaux pour la prédiction inverse dans les modèles de calibration non linéaires.
Bernadette GOVAERTS, *Université Catholique de Louvain, Belgique.*
- 17 h 55** Fin de la première journée.



**Session E - Méthodes multidimensionnelles / Applications en spectroscopie**

Présidents de session :

Pr. Max FEINBERG / Pr. Roger PHAN TAN LUU.

-
- 9 h 00** Chemometrics in Bioprocess Engineering.
José Cardoso DE MENEZES, *Universidade de Lisboa, Portugal.*
-
- 9 h 45** Prédiction des teneurs en alcaloïdes, cendres, azote et sucres réducteurs du tabac grâce à des modèles MPLS développés à partir de données proche infrarouge.
Catherine POISSON, *ALTADIS, Bergerac.*
- 10 h 05** Application de la Procédure de Calibration "LOCAL" pour la Prédiction des caractéristiques chimiques du Tabac en Spectroscopie visible et proche infrarouge.
Sandra AUBERT, *ALTADIS, Bergerac.*
- 10 h 25** Pause / Posters / Exposition.

Session F - Méthodes multivoies : applications agroalimentaires

Présidents de session :

M. Jean-Paul BIESSE / Dr Dominique VAILHEN.

- 10 h 55** Analyse statistique des courbes de Temps-Intensité en analyse sensorielle.
Nancy FRANÇOIS, *Université catholique de Louvain, Belgique.*
- 11 h 15** Classification de 6 variétés de fraise analysées par SPME/GC/MS, à l'aide des cartes de Kohonen. Influence du lieu de récolte.
Virginie DE BOISHEBERT, *Université Bordeaux I, Périgueux.*
- 11 h 35** Adultération des miels par des sirops de sucres industriels, modélisation au moyen de la SIMPLS.
Christophe CORDELLA, *AFSSA, Sophia-Antipolis.*
- 11 h 55** Déjeuner / Posters / Exposition.



Session G - Chimométrie industrielle : plans de mélanges / modélisations

Présidents de session :

Pr. Gilbert SAPORTA / Dr Jacques GOUPY.

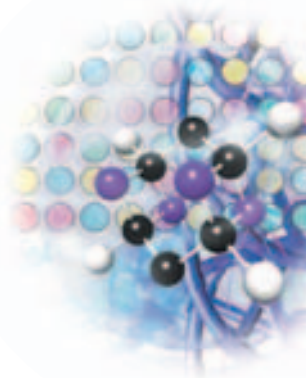
- 13 h 30** Plan de mélanges appliqué à la formulation de chapes liquides à base de Fluoroanhydrite.
Amel KAMOUN, École Nationale d'ingénieurs de Sfax, Tunisie.
- 13 h 50** La réponse d'un plan de mélange est une courbe.
Michel GENETAY, SANITEC, Selles sur Cher.
- 14 h 10** Apport de la Régression PLS dans l'Optimisation par Plan d'Expériences d'un Broyeur Industriel d'Oxyde de Titane.
Pierre CHAGNON, RHODIA RECHERCHE, Aubervilliers.
- 14 h 30** Multivariate Statistical Process Control: A novel approach to batch monitoring.
Christian AIRIAU, GlaxoSmithKline, Tonbridge, UK.
- 14 h 50** Analyse des profils de concentration par corrélation de fonctions mathématiques.
Guillaume ERNY, University of Manchester, UK.
- 15 h 10** Pause / Posters / Exposition.

Session H - Perspectives en chimométrie

Présidents de session :

Pr. Douglas N. RUTLEDGE / Pr. Pierre LANTERI.

- 15 h 40** De l'Intérêt des Réseaux RBF en Chimométrie.
Frédéric ROS, SchlumbergerSema, Orléans.
- 16 h 10** "IN SILICO" Design of New Potential Metal Binders.
Alexandre VARNEK, ULP, Strasbourg.
- 16 h 40** Utilisation de l'information mutuelle pour la sélection de variables spectrales avec des modèles non-linéaires.
Nabil BENOUDJIT, Université Catholique de Louvain, Belgique.
- 17 h 10** Remise des Prix :
- le Prix Junior par Claude MORDINI,
 - les Prix Posters par Jacques GOUPY et Max FEINBERG.
- 17 h 30** Conclusion du Congrès,
par Jacques GOUPY, Président du Groupe Français de Chimométrie.
- 17 h 40** Fin.



- AF01** Inhibition de l'activité des phénoloxydases de pomme et de champignon par des produits de la réaction de Maillard issus de systèmes modèles glucose / glutathion. Optimisation de leur formation par la méthodologie des surfaces de réponse.
Catherine BILLAU, *CNAM, Paris.*
- AF02** Étude de la robustesse du système Infrarouge dans l'analyse des betteraves sucrières.
Jacqueline MAALOULY, *Institut National Agronomique, Paris.*
- AF03** Modélisation de l'efficacité de la réaction de Fenton pour le traitement d'effluents phénolés.
Olivier CHEDEVILLE, *CNAM, Paris.*
- AF04** Analyse de mélanges par des méthodes de "curve resolution" : applications d'OPA.
Sébastien GOURVENEK, *Université de Bruxelles, Belgique.*
- AF05** Formulation en colorimétrie : extension de la théorie de Kubelka-Munk.
Michel DALIBART, *Université de Bordeaux I, Talence.*
- AF06** Utilisation de plans d'expériences sur mesure pour l'étude de la décomposition de l'eau oxygénée par le Lanthane(III).
Christel PIERLOT, *LCOM, ENSCL, Villeneuve d'Ascq.*
- AF07** Les coefficients de partage dans les systèmes 1,2-dichloroéthane/eau et n-octanol/eau, révélateurs d'interactions inter- et intramoléculaires.
Alexandra GALLAND, *Université de Lausanne, Suisse.*
- AF08** Optimisation des Méthodes multivoies : application au dosage des HAP et à la détermination du TAV du vin.
Michel DALIBART, *Université de Bordeaux I, Talence.*
- AF09** L'effet du centrage sur la robustesse des modèles d'étalonnages multivariés.
Magida ZEAITER, *CEMAGREF, Montpellier.*
- AF10** Analyse en Composantes Communes et Poids Spécifiques : principes d'interprétation et représentations Biplot.
Mohamed HANAFI, *ENITIAA /INRA, Nantes.*
- AF13** Étalonnage d'un système multi-variables de capteurs de gaz à partir de mesures réelles de pollution.
Marc KAMIONKA, *École des Mines de Saint-Étienne.*

- AF14** Estimation de l'arrière-plan de spectres par différentes méthodes dérivées des moindres carrés.
Vincent MAZET, *Université Poincaré, Vandoeuvre Lès Nancy.*
- AF15** Conduite des procédés environnementaux de décontamination des sols.
Julien TROQUET, *BIOBASIC ENVIRONNEMENT, Clermont-Ferrand.*
- AF16** Chromatographie en phase liquide à haute température : mise au point et optimisation des paramètres permettant l'utilisation d'un détecteur à ionisation de flamme.
Davy GUILLARME, *Université Claude Bernard, Villeurbanne.*
- AF18** Classification d'amidons de différentes origines végétales.
Comparaison des résultats obtenus dans le proche et le moyen infrarouge.
Nathalie DUPUY, *Université d'Aix-Marseille 3, Marseille.*
- AF19** Étude de la capacité de la technique de réseaux de neurones à prédire la taille d'une émulsion.
Maysoun DAMES, *Institut National Polytechnique de Toulouse.*
- AF21** Caractérisation des huiles végétales et authenticité des huiles d'olive par combinaison de signaux.
Nathalie ESTEPHAN, *Institut National Agronomique, Paris.*
- AF22** La base de données "EuroSpec" : un outil potentiel pour les chimométriciens.
Nathalie ESTEPHAN, *Institut National Agronomique, Paris.*
- AF23** Quelques applications de Direct Orthogonal Signal Correction (DOSC) comme méthode de prétraitement spectral.
Jan LUYPAERT, *Vrije Universiteit, Bruxelles, Belgique.*
- AF24** Optimisation par la méthode des surfaces de réponse des performances photocatalytiques d'une fibre optique recouverte d'un dépôt de TiO_2 : application à la dégradation de polluants.
Anne DANION, *IFoS, Ecully.*
- AF25** Analyse d'échantillons de cannabis par microextraction en phase solide combinée à la chromatographie en phase gazeuse : apport de l'ACP.
Serge RUDAZ, *School of Pharmacy, Geneva University, Suisse.*

Chimiométrie 2003



Société de Chimie Industrielle
Groupe Français de Chimiométrie
28, rue Saint-Dominique
75007 paris

Informations générales

Conditions générales d'inscription et de règlement

Les frais d'inscription comprennent la participation aux conférences, les pauses, les déjeuners des 2 jours, la documentation congressiste, à l'exclusion des frais de déplacement, d'hébergement et de restauration (hors Congrès).

L'accès aux conférences n'est possible qu'après règlement complet de l'inscription :

- par chèque à l'ordre de la SCI ;
- par virement bancaire : Société Générale
RIB : FR 76 30003 03052 000 50 27003 4 19 ;
- par bon de commande ;
- par carte bancaire, uniquement via le paiement en ligne sécurisé, sur le site internet : <http://www.scifrance.org/congres/chimiometrie03>

Les administrations et organismes publics peuvent effectuer leur règlement à l'issue du Congrès par virement administratif à la condition de remplir de façon complète le bulletin d'inscription ci-joint **accompagné d'un bon de commande**. Une facture sera adressée dès réception du bulletin d'inscription, dûment complété, accompagné du règlement.

Si vous désirez ne pas figurer sur la liste des participants qui sera publiée, veuillez le signaler en cochant la case réservée à cet effet sur le bulletin d'inscription.

Convention de formation

Les frais d'inscription au Congrès peuvent faire l'objet d'une prise en charge au titre de la formation continue, la SCI étant enregistrée sous le n° 11 75 35 78 075.

La subrogation n'est pas autorisée.

La facture tiendra lieu de convention de formation.

Annulation

Toute annulation doit faire l'objet d'une notification écrite, datée et signée par lettre recommandée avec A.R., le cachet de la poste faisant foi.

Aucune annulation transmise par téléphone, e-mail ou par télécopie ne peut être acceptée.

La non présentation au Congrès ne constitue pas un motif d'annulation réglementaire, quelles qu'en soient les causes.

Pour les annulations parvenues avant **le 20 novembre 2003**, le paiement de l'inscription (fait par chèque, CB, virement bancaire ou bon de commande) sera dû à hauteur de 50 % de son tarif. Passé cette date, le paiement de la totalité de l'inscription sera exigé.

Accès et transports

CNAM, 2 rue Conté - 75003 Paris.

Méto : Arts et Métiers (*ligne 3 ou 11*).

Secrétariat du Congrès

Société de Chimie Industrielle
Groupe Français de Chimiométrie

28, rue Saint-Dominique 75007 Paris

Tél. : 01 53 59 02 16

Fax : 01 45 55 40 33

@ : chimiometrie@scifrance.org

@ : jgrolere@wanadoo.fr



www.chimiometrie.org



Groupe Français
de Chimiométrie

