



Programme

Mardi 20 Janvier 2015

08h00 Accueil des participants

08h45 Discours de bienvenue

SESSION Métabolomique

Chairmen: Serge Rudaz / Julien Boccard

09h00 Conférence plénière

Towards a data pre-processing strategy

Lutgarde Buydens - Université Radboud (Pays-Bas)

09h45 **Exploratory strategy of metabolomic data based on variables clustering and noise cluster identification**

Evelyne Vigneau - ONIRIS Nantes (France)

10h05 **The "metaboscope": an integrated tool for metabolic profiling**

Julien Wist - Universidad del Valle (Colombie)

10h25 **Model creation with data selection for detection of blackcurrant adulteration by aronia berry**

Elodie Dubin - Eurofins Analytics (France)

10h45 - 11h15

Pause-café / posters / exposition

SESSION Plans d'expériences / validation

Chairwomen: Michelle Sergent / Claire Bordes

11h15 **What if uncertainty helps you to ascertain your results?**

Max Feinberg - Metarisk AgroParisTech (France)

11h35 **Transfert de méthodes d'analyses par l'utilisation du profil d'incertitude comme critère de décision**

Fayssal Jhilal - Faculté des Sciences Dhar El Mahraz (Maroc)

11h55 **Comparaison des méthodes de sélection pour la construction de sous-ensembles de calibration et validation**

Aurélie Beal - LISA/METICA Aix-Marseille Université (France)

12h15 **Definitive Screening Designs: a better start into development**

Bernhard Heinen - SAS Institute GmbH (Allemagne)

12h35- 14h00

Déjeuner/ posters / exposition

Programme

Mardi 20 Janvier 2015



SESSION Imagerie hyperspectrale

Chairmen: Ludovic Duponchel / Pierre Dardenne

14h00 Conférence plénière

Chemometrics in hyperspectral vibrational spectroscopic imaging

Paul Geladi - Université suédoise des sciences agricoles (Suède)

14h45 **Near infrared hyperspectral imaging for following imbibition of wheat kernels**

Benoît Jaillais - INRA Nantes (France)

15h05 **Distributional homogeneity index (DHI), a valuable tool during pharmaceutical development**

Pierre-Yves Sacré - Université de Liège (Belgique)

15h25 **Optimal partitioning of variables associated with wavelength intervals in spectral applications**

Véronique Cariou - ONIRIS Nantes (France)

15h45 - 16h15

Pause-café / posters / exposition

SESSION Séparation de sources

Chairmen: Douglas Rutledge/ Pierre Esseiva

16h15 **Spectral sources separation in the kinetic and mapping Raman study of an altered solid under extreme conditions**

Guillaume Guimbretière - CEMHTI-CNRS UPR3079 Orléans (France)

16h35 **Interest of Blind Source Separation methods for surfactant mixture deformulation**

Alexandra Gaubert - ISA Université Claude Bernard Lyon (France)

16h55 **Prediction of chemical characteristics of fibrous plant biomasses by their near infrared spectrum: comparing local versus partial least square models and cross-validation versus independent validations**

Bruno Godin - Walloon Agricultural Research Center (Belgique)

SESSION Challenge XVI CHIMIOMETRIE

Chairmen: Pierre Dardenne

17h15 **Présentation des meilleures contributions au challenge, synthèse et résultats**

18h00 **Soirée de gala au Bâtiment des Forces Motrices**



Programme

Mercredi 21 Janvier 2015

SESSION Nouvelles approches

Chairmen: Gilbert Saporta / Mohamed Hanafi

- 09h00 Conférence plénière**
Main bottlenecks in data analysis
Beata Walczak - Université de Silésie (Pologne)

09h45 Deviance residuals based sparse PLS and sparse kernel PLS regression for censored data
Philippe Bastien - L'Oréal Recherche Aulnay-sous-Bois (France)

10h05 Analyse d'un tableau de données dépendant de plusieurs facteurs : ANOVA-PLS
Angelina El Ghaziri - ONIRIS Nantes (France)

10h25 Analyse topologique des données : nos données ont une forme, les formes ont du sens
Ludovic Duponchel - LASIR Université des Sciences et Technologies de Lille

10h45 - 11h15 Pause-café / posters / exposition

SESSION Prédiction et procédés

Chairmen: Pierre Lantéri / Christophe Cordella

- 11h15 Multivariate statistical tools applied in product quality review assessment**
Abdelaziz Bouklouze - Université Mohammed V (Maroc)

11h35 Improving Research Octane Number (RON) prediction for gasolines using a PLS model combined to gas chromatography data
Fabien Chainet - IFP Energies Nouvelles Solaize (France)

11h55 PCA and PLS for road safety in fog conditions
Mario Marchetti - CEREMA Nancy (France)

12h15 Retention time prediction in reversed phase liquid chromatography: a tool to help steroid identification
Giuseppe Marco Randazzo - EPGL Université de Genève (Suisse)

12h35 - 14h00 Déjeuner/ posters / exposition

Programme

Mercredi 21 Janvier 2015



SESSION Méthodes multiblocs/multivoies

Chairmen: Jean-Michel Roger / Sébastien Préys

- 14h00 **Nway PLS for regression or discrimination : new properties and some clarifications**
Mohamed Hanafi - ONIRIS Nantes (France)
- 14h20 **Coupling multiresolution hyperspectral images: the Hylam project**
Marie-Françoise Devaux - ONIRIS Nantes (France)
- 14h40 **Analyse multitableaux pour l'intégration de données métabolomiques: application aux huiles essentielles de citron**
Florence Mehl - EPGL Université de Genève (Suisse)
- 15h00 **Multiple-block analysis to relate instrumental and sensory data**
Delphine Bouveresse - AgroParisTech (France)

SESSION de clôture

Chairman: Ludovic Duponchel

- 15h20 **Prix de thèse GFC: Chemometrics applied to Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) and Terahertz spectroscopy**
Josette El Haddad - NRC EME Québec (Canada)
- 15h40 **Remise des prix**
- 16h00 **Clôture du congrès**