

# WORKSHOP DEL GRUPPO DIVISIONALE DI CHEMIOMETRIA DELLA SOCIETÀ CHIMICA ITALIANA

*Pavia 21-23 maggio 2012*

## **Lunedì 21 maggio**

13.00-14.00 Registrazione

14.00-14.15 Apertura dei lavori

I Sessione – Chairman: Prof. Roberto Todeschini

14.20-14.35 Prof. Silvia Lanteri (Dipartimento di Chimica e Tecnologie Farmaceutiche e Alimentari, UniGE):  
Presentazione attività Gruppo

14.40-14.55 Dr. Monica Casale (Dipartimento di Chimica e Tecnologie Farmaceutiche e Alimentari, UniGE):  
Studio di segnali NIR da matrici alimentari (carne e probiotici)

15.00-15.15 Dr. Riccardo Leardi (Dipartimento di Chimica e Tecnologie Farmaceutiche e Alimentari, UniGE):  
Experimental design "andati a bagno"

15.20-15.35 Dr. Chiara Casolino (Dipartimento di Chimica e Tecnologie Farmaceutiche e Alimentari, UniGE):  
Caratterizzazione di olive da tavola

15.40-15.55 Dr. Paolo Oliveri (Dipartimento di Chimica e Tecnologie Farmaceutiche e Alimentari, UniGE):  
Multivariate exploratory strategies for analysis of hyperspectral maps. Applications in  
the fields of cultural heritage and clinical diagnostics.

*16.00 -16.20 Coffee break*

II Sessione – Chairman: Dr. Federico Marini

16.20-16.40 Prof. Alessandro Ulrici (Dipartimento di Scienze Agrarie, UniMORE):  
Presentazione attività Gruppo +

Metodi chemiometrici per lo sviluppo di un nuovo sensore per l'identificazione di  
precursori di droghe in fase gassosa

16.25-16.45 Dr. Carlotta Ferrari (Dipartimento di Scienze Agrarie, UniMORE):

Analisi multivariata di immagini iperspettrali: alcune applicazioni in campo alimentare

16.50-17.05 Prof. Max Barolo (CAPE-Lab, UniPD)

Presentazione generale delle attività di ricerca del gruppo CAPE-Lab nel  
campo della chemiometria

17.10-17.30 Dr. Pierantonio Facco (CAPE-Lab, UniPD):

Trasferimento tra impianti diversi di modelli statistici per il monitoraggio di processo

17.35-17.55 Dr. Emanuele Tomba (CAPE-Lab, UniPD):

Impiego di dati storici per lo sviluppo di nuovi prodotti: applicazioni  
all'industria farmaceutica

## **Martedì 22 maggio**

### III Sessione – Chairman: Dr. Riccardo Leardi

- 9.20- 9.40 Dr. Federico Marini (Dipartimento di Chimica, UniROMA1):  
Presentazione attività gruppo
- 9.45-10.05 Dr. Marta Bevilacqua (Dipartimento di Chimica, UniROMA1):  
ASCA & locally weighted PLS coupled to NIR for the evaluation of egg pasta quality parameters
- 10.10-10.30 Dr. Elisa Salvatore (Dipartimento di Chimica, UniROMA1 & Dipartimento di Chimica, UniMORE):  
Autenticazione del vino Lambrusco tramite HPLC-UV e tecniche chemiometriche

### *10.35-11.00 Coffee Break*

### IV Sessione – Chairman: Marina Cocchi

- 11.00-11.30 Dr. Lionel Blanchet (Researcher at UMC St Radboud):  
Integration of complex biological data: fusion from chemometrics point of view
- 11.40-11.55 Dr. Marco Calderisi (Kode Srl):  
Presentazione attività Kode – Chemiometria in R
- 11.55-12.10 Dr. GianMarco Polotti (Lamberti):  
Potenzialità dell'ambiente R per chemiometri
- 12.15-12.35 Dr. Alberto Manganaro (Kode Srl):  
Vega software

### *12.40-14.25 Lunch*

### V Sessione – Chairman: Prof. Raffaella Biesuz

- 14.30-14.50 Dr. Marina Cocchi (Dipartimento di Chimica, UniMORE):  
Presentazione attività gruppo – Focus su Coupling WT2D e MIA per analisi di immagini
- 14.55-15.15 Dr. Michele Silvestri (Dipartimento di Chimica, UniMORE):  
Multivariate Curve Resolution e DataFusion per lo sviluppo di modelli di tracciabilità geografica
- 15.20-15.50 Dr. Mario Li Vigni (Dipartimento di Chimica, UniMORE):  
NMR and Multivariate Analysis to study Oenological Products under Authenticity Regulation
- 15.55-16.10 Dr. Raffaele Vitale (Università di Lille):  
Tecniche spettroscopiche e chemiometria per la caratterizzazione di nanoparticelle fotocromiche

### *16.15-16.35 Coffee break*

- 16.35 – 18.30 RIUNIONE GRUPPO

*20.30 Cena Sociale*

**Mercoledì 23 maggio**

VI Sessione – Chairman: Prof. Silvia Lanteri

- 9.30 - 9.50 Roberto Todeschini (Università di Milano Bicocca):  
Presentazione attività gruppo
- 9.55-10.15 Roberto Todeschini (Università di Milano Bicocca):  
Nuove prospettive in chemiometria?
- 10.20-10.40 Kamel Mansouri (Università di Milano Bicocca):  
Assessing bioaccumulation of polybrominated diphenyl ethers for aquatic  
species by QSAR modelling
- 10.45-11.05 Faizan Sahigara (Università di Milano Bicocca):  
A novel distance measure towards Exploratory Data Analysis

*11.10-11.30 Coffee break*

- 11.30-11.50 Raffaella Biesuz (Dipartimento di Chimica, UniPV)  
Titolo da definire

12.00-12.30 Chiusura dei lavori