



Comitè organitzador

Romà TAULER, Roma.Tauler@idaea.csic.es

Xavier TOMÁS, xtom@iqs.url.es

Anna DE JUAN, anna.dejuan@ub.edu

Organització

Societat Catalana de Química, Institut d'Estudis Catalans
Secció de Ciències i Tecnologia, Institut d'Estudis Catalans

Amb el suport de

Departament de Química, Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química Analítica, Universitat de Barcelona

Departament de Química, Universitat de Girona

Departament de Química, Universitat de Lleida

Departament d'Enginyeria Química, Universitat Politècnica de Catalunya

Grup d'Estadística Aplicada, Institut Químic de Sarrià, Universitat Ramon Llull

Departament de Química Ambiental, Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua, Consell Superior d'Investigacions Científiques de Barcelona (IDAEA-CSIC)

LA QUIMIOMETRIA: PERSPECTIVES DE FUTUR

IX MEMORIAL ENRIC CASASSAS IX MEMORIAL ENRIC CASASSAS

Barcelona

2 de desembre de 2009

Sala multimèdia

Institut Químic de Sarrià

Via Augusta, 390

08023 Barcelona

PRESENTACIÓ

En els darrers mesos s'ha reactivat el debat sobre el futur de la disciplina de la quimiometria (GELADI, P.; HOPKE, P. «Is there a future for chemometrics? Are we still needed?». *Journal of Chemometrics*, vol. 22, núm. 5 (2008), p. 289-290 i *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, vol. 91, núm. 2 (2008), p. 99-100). D'una banda, després de l'empenta inicial, ara fa gairebé vint-i-cinc anys, molts dels pioners en aquest camp ja no hi són o ja no es troben actius; de l'altra, s'han assolit molts dels objectius inicials de reconeixement d'aquesta disciplina en els diferents àmbits químics i, alhora, l'ús de les metodologies quimiomètriques s'ha estès a moltes branques científiques i ha ultrapassat l'àmbit químic inicial.

Paral·lelament, s'ha observat un èmfasi més gran en la difusió dels aspectes més aplicats de la disciplina que no pas en els aspectes de desenvolupament i metodologia. Per exemple, el nombre d'articles d'aplicació de la quimiometria en revistes científiques augmenta de manera considerable, mentre que el nombre d'articles en les dues revistes més especialitzades d'aquesta disciplina s'està estabilitzant i no creix en la proporció que ho va fer en anys passats. Davant aquesta situació, s'ha expressat la preocupació per la deserció d'una part important dels científics que han estat actius en aquest camp en els darrers anys, atrets per altres camps d'aplicació de nova creació, i s'ha mostrat el neguit per la potencial pèrdua de la capacitat creativa que ha existit fins fa poc en l'àmbit de la quimiometria, en tant que disciplina amb identitat pròpia.

Aquesta problemàtica requereix que en els propers anys es produeixi una mobilització important de recursos econòmics i humans en favor de la conservació i l'extensió de la quimiometria com a disciplina. En primer lloc, perquè creiem que desenvolupar-la i aplicar-la és imprescindible per al progrés de les diferents branques de la química i, en segon lloc, perquè creiem que la quimiometria està molt lligada a la incorporació i al desenvolupament de les noves tecnologies per al tractament de la informació en àmbits tan rellevants com la química, la bioquímica o les ciències —«òmiques» o l'estudi global del medi ambient. Cal, doncs, en comptes d'adoptar una posició pessimista davant aquesta situació, reaccionar positivament i amb convenciment, consolidar la disciplina de la quimiometria en els camps que li són propis i promoure la sinergia amb nous camps d'aplicació, sense deixar de reivindicar la identitat i la denominació de la disciplina, per damunt d'altres terminologies de nova creació que apareixen constantment. Per aquest motiu, pensem que l'organització d'aquest acte pot contribuir en aquesta direcció.

Volem destacar també la relació existent entre l'acte presentat i la personalitat del doctor Casassas, que va ésser un dels principals impulsors de la quimiometria a casa nostra en els primers anys d'aquesta disciplina. Cal recordar que va ésser ell precisament, conjuntament amb el professor Michele Forina (Universitat de Gènova), qui va impulsar la celebració del primer congrés de quimiometria a l'Estat espanyol, el Colloquium Chimimetricum Mediterraneu, a la seu de l'Institut d'Estudis Catalans, a Barcelona, l'any 1987. Volem esmentar també que va ésser a l'Institut Químic de Sarrià on va sorgir, als anys vuitanta, el primer equip d'investigació en quimiometria, liderat pel professor Xavier Tomás.

Us animem, doncs, a participar en aquesta jornada, i especialment, a contribuir a la discussió dels temes presentats a la taula rodona, a la qual s'invitarà també diferents persones interessades en la quimiometria.

PROGRAMA

9.30–9.45 h

Presentació, benvinguda i inici de l'acte
Dr. Romà TAULER, Societat Catalana de Química, Institut d'Estudis Catalans
Dr. Xavier TOMÁS, Institut Químic de Sarrià

9.45–11.00 h

*Non specific physical information:
the best seller of chemometrics*
Dr. Michele FORINA, Departament de Química i Tecnologia Farmacèutica i Alimentària, Universitat de Gènova

11.00–11.30 h

Pausa (cafè)

11.30–12.30 h

*Estrategias de análisis de datos en quimiometría:
selección vs. compresión*
Dr. Alberto FERRER, Departament d'Estadística i Investigació Operativa Aplicades i Qualitat, Universitat Politècnica de València

12.30–13.30 h

*La resolució multivariant en química:
a la cerca de la bella simplicitat de la mesura*
Dra. Anna DE JUAN, Departament de Química Analítica, Universitat de Barcelona

13.30–15.30 h

Dinar

15.30–17.00 h

Taula rodona: La quimiometria: perspectives de futur
M. FORINA, A. FERRER, A. DE JUAN, X. TOMÁS, R. TAULER i els membres presents de la xarxa de quimiometria

17.00 h

Cloenda

IX MEMORIAL ENRIC CASASSAS

SOL·LICITUD D'INSCRIPCIÓ

L'assistència a la jornada és gratuïta, però cal que ens feu arribar, per fax o correu electrònic, les dades personals que us sol·licitem abans del 28 de novembre de 2009.

Societat Catalana de Química
Institut d'Estudis Catalans

Carrer del Carme, 47
08001 Barcelona

Tel 933 248 580
Fax 932 701 180
A/e: scq@iec.cat

LA QUIMIOMETRIA: PASSAT, PRESENT I FUTUR

Nom i cognoms

Adreça

Població

Codi postal

Telèfon

Fax