



Organització

Societat Catalana de Química
Secció de Ciències i Tecnologia, Institut d'Estudis Catalans
Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua, CSIC

Amb el suport de

Departament de Química Analítica
de la Universitat de Barcelona
Departament de Química
de la Universitat Autònoma de Barcelona
Departament de Química Analítica i Química Orgànica
de la Universitat Rovira i Virgili
Departament d'Enginyeria Química
de la Universitat Politècnica de Catalunya
Departament de Química de la Universitat de Girona
Departament de Química de la Universitat de Lleida
Departament de Química Ambiental
de l'IDAEA-CSIC de Barcelona
Departament de Mètodes Quantitatius, IQS,
Universitat Ramon Llull

Comitè organitzador

Dr. Joaquim JAUMOT, IDAEA-CSIC
Dr. Romà TAULER, IDAEA-CSIC

LA REVOLUCIÓ DEL BIG DATA EN LA QUÍMICA

XVI CONFERÈNCIA ENRIC CASASSAS

SOL·LICITUD D'INSCRIPCIÓ

L'assistència a la jornada és gratuïta,
però cal que formalitzeu la inscripció
abans del 12 de desembre emplenant
aquest **formulari telemàtic**

Societat Catalana de Química - Institut d'Estudis Catalans

Carrer del Carme, 47 - 08001 Barcelona
Tel 935 529 106 - Fax 932 701 180
A/e: scq@iec.cat

D'acord amb la Llei orgànica 15/1999, del 13 de desembre, de protecció de dades de caràcter personal, us informem que les vostres dades seran incorporades en un fitxer que és responsabilitat de l'Institut d'Estudis Catalans, amb la finalitat de gestionar l'acte al qual us inscriviu i de fer-vos arribar comunicacions de les activitats i publicacions de l'Institut d'Estudis Catalans i de les seves societats filials. Podeu exercir els drets d'accés, rectificació, cancel·lació i oposició de les vostres dades personals adreçant-vos per escrit a l'Institut d'Estudis Catalans (carrer del Carme, 47, 08001 Barcelona) o bé enviant un correu electrònic a l'adreça lopd@iec.cat.

Barcelona

14 de desembre de 2016

**Centre d'Investigació
i Desenvolupament (CID-CSIC)**

Sala d'actes

c/ de Jordi Girona, 18-26

PRESENTACIÓ

En els darrers anys, les noves tecnologies de la informació generen conjunts massius de dades cada vegada més complexes, és el que s'anomena *big data*. Aquests conjunts de dades són tan grans que són difícils de manipular i analitzar directament utilitzant metodologies estadístiques i eines de programació tradicionals. Aquests conjunts massius de dades existeixen en moltes disciplines, i la química no n'és cap excepció. La majoria de químics estan familiaritzats amb el creixement del gran nombre de compostos químics registrats en bases de dades de domini públic, la major part dels quals porten associats un gran nombre de propietats i altra informació relacionada amb ells. Molts químics també han de conviure, en la seva feina habitual, amb conjunts de dades experimentals i d'informació cada vegada més voluminosos, sovint emmagatzemats en sistemes i eines de computació amb capacitats limitades.

En aquest sentit, els químics analítics estan fent grans esforços en la manipulació i interpretació de la gran quantitat de dades proporcionades per la instrumentació analítica actual a partir de la utilització de les eines que proporciona la quimiometria. És el cas, per exemple, de l'acoblament dels mètodes cromatogràfics (GC×GC o LC×LC) amb les diferents espectroscòpies, com l'espectrometria de masses. O també el dels mètodes espectromètrics multidimensionals i de les tècniques d'anàlisi d'imatges hiperespectrals. D'altra banda, els avenços tecnològics recents han permès fer l'anàlisi exhaustiva (*highthroughput*) dels perfils (bio)químics (gens, seqüenciació d'ADN, proteïnes, metabòlits, lípids...) dels sistemes biològics, d'una manera relativament poc costosa i eficaç. Aquest cost més baix de la generació exhaustiva de milions de dades químiques i biològiques ens porta cap al *Big (Bio)Chemical Data (BBCD)*, el qual ens proporciona noves oportunitats, però també produeix reptes nous.

XVI CONFERÈNCIA ENRIC CASASSAS

La revolució del *big data* en la química

PROGRAMA

10 h

Presentació de la jornada

10.10 h

Big data: Keeping humans in the loop

a càrrec del **Dr. Harald MARTENS**, del Departament d'Enginyeria Cibernètica de la Universitat de Ciències i Tecnologia de Noruega

10.50 h

Desmitificació de les dades massives

a càrrec del **Dr. Jordi VITRIÀ**, del Departament de Matemàtiques i Informàtica de la Universitat de Barcelona

11.30 h

Cafè

12 h

ioChem-BD: Taming the Big Data in Computational Chemistry

a càrrec del **Dr. Carles BO**, de l'Institut Català d'Investigació Química

12.40 h

Making sense of big omics data: towards knowledge Integration

a càrrec del **Dr. Joaquim JAUMOT**, de l'Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua (CSIC, Barcelona).

13:20 h

Fi de la jornada