



*8th Iranian Biennial
Chemometrics Seminar*



List of orations and posters in the 8th Biennial

Chemometrics Seminar

Nov. 10, 11- 2021

Tarbiat Modares University

عنوان مقاله	ارسال کننده	مشارکت کنندگان	موضوع	نحوه ارائه
Ensemble learners combined with handheld near infrared spectrometer for detection of hydrogen peroxide adulteration in milk	سمانه احسانی	احسانی، یزدانپناه، پرستار	تعیین اصالت و شیمی جنایی	سخنرانی
Application of Data Point Importance (DPI) Concept in Supervised and Unsupervised Pattern Recognition	زهرا زارع	زارع، والی زاده، عبد الهی	روش های آنالیز چند راهی	سخنرانی
Single-sensor voltammetry electronic tongue based on the pH variations and chemometrics preprocessing for the classification of the pharmaceutical samples by the neural networks	مهدی مقتدر	مقتدر، بهرام، فرهادی	تشخیص الگو	سخنرانی
Descriptive Definition of Multivariate Calibration Model Vector	سمیه ولی زاده	والی زاده، عبدالهی	کالیبراسیون چند متغیره	سخنرانی
Miniaturized Low-cost Paper-Based Electronic Noses for Discrimination of Volatile Organic Compounds by Chemometrics Method	شیوا پسران	پسران، شجاعی فرد، همتی نژاد، تشخوریان	تشخیص الگو	سخنرانی
QSAR study & Molecular docking of matrix metalloproteinase inhibitory activity of hydroxamate derivatives by MIA-QSAR & using OSC-GA-PLS	دلارام صالحپور کاهی	صالحپور کاهی، نیازی، محسن صرافی، یزدانی پور	ارتباط کمی ساختار-فعالیت	سخنرانی
Theoretical cross-reactivity neutralizing study of some nanobodies for receptor binding domain (RBD) of SARS-CoV-2 using covid-19 molecular docking server	زهرا پهلوان یلی	پهلوان یلی، فاطمی	ارتباط کمی ساختار-فعالیت	سخنرانی
Ligand-based virtual screening for isoform-selective histone deacetylase inhibitors (class I)	مرضیه سادات نی بند	نی بند، مانی ورنوسفادرانی، بنویدی	ارتباط کمی ساختار-فعالیت	سخنرانی
Comparison of embryo culture medium samples in IVF with infrared spectrometry using successive projections algorithm (SPA) - sum of ranking differences (SRD)	شیما زندباف	زندباف، خانمحمدی	تشخیص الگو	سخنرانی

10	Preparation and characterization of activated carbon from palm bio-waste by H3PO4 for the simultaneous removal of Basic dyes in binary aqueous systems: optimization by central composite design, equilibrium, kinetic and thermodynamic studies	فاطمه کیانی قلعه سردی	کیانی قلعه سردی، رضانی، معصوم	طراحی آزمایش	سخنرانی
11	Discriminating between patients with endometriosis and healthy women using gas chromatography-mass spectrometry and chemometrics techniques	محمد جواد مسرور سعادت آبادی	مسرور، مانی ورنوسفادرانی، گیلانی	متابولومیکس	سخنرانی
12	Prediction of RT-PCR results using multivariate investigation of important blood biomarkers in patients with covid 19	سمانه سادات مومن قزوینی	مومن قزوینی، خوشکام	متابولومیکس	سخنرانی
13	Non-target ROIMCR LC-MS study of the disruptive effects over time of TBT on the lipidomics of Daphnia magna	جمیله محمد جعفری	محمد جعفری، .Barta .Casas عبدالهی، Tauler	متابولومیکس	سخنرانی
14	Comparison of prediction uncertainty in first order multivariate calibration methods	طه کفیلی حاجلاری	کفیلی حاجلاری، ساجدی امین، احمدیه، ناصری	آنالیز بررسی انتشار انواع خطا	سخنرانی
15	Signal Contribution Effects on Error Propagation in Self-Modeling Curve Resolution Methods	سمانه طاوسی	عبداللهی، داداشی، طاوسی	آنالیز بررسی انتشار انواع خطا	سخنرانی
16	The effects of selectivity on accuracy of multivariate curve resolution (MCR) results	سمیه خدادادی کریموند	خدادادی کریموند، ولیزاده، ج. گمپرلین، عبدالهی	روش های تفکیک منحنی	سخنرانی
17	Exploring the independence of feasible solutions in two-component hyperspectral imaging data using mutual information map	فاطمه سادات هاشمی نسب	پرستار، هاشمی نسب	روش های تفکیک منحنی	سخنرانی

سخنرانی	روش های تفکیک منحنی	نوروز یگانه، بهرام، Olivieri، عبدالهیی	فربیا نوروز یگانه	Area of Feasible Figures of Merit (AF-FOMs) for second-order multivariate calibrations in MCR methods	18
سخنرانی	روش های تفکیک منحنی	سفیدسفیده خوان، خوشکام، امیری	یاسمن سفیدسفیده خوان	Comparison of perturbation and augmentation to solve rank deficiency problem	19
سخنرانی	کالیبراسیون چند متغیره	علی نوری، حاجی علی گل، قرشی، زمانی جوهرستانی	امیر حسین علی نوری	Gaussian apodization factor analysis for Rank analyzing of Ion mobility spectra	20
پوستر	طراحی آزمایش	موسوی، زیباسرشت	راضیه موسوی	Experimental design optimization usage in pathogen detection utilizing green-synthesized re-generable nanocomposite	21
پوستر	متابولومیکس	محسنی، بهرام	نعیمه محسنی	A Colorimetric Chemical Nose with Unmodified Gold Nanoparticles for Multiplexed Detection and Discrimination of Catecholamine Neurotransmitteres	22
پوستر	کالیبراسیون چند متغیره	سندگل نظامی، باقری، گرمارودی	مهیار سندگل نظامی	Quantitative analysis of LC-PUFAs and Protein Content in Premature infant formula powders by ATR-FTIR Spectroscopy and Chemometrics	23
پوستر	کالیبراسیون چند متغیره	فولادوند، خانمحمدی، خرمی، محمدی	ملیکا فولادوند	Determination of heavy metal pollution (Pb, Ni and Cu) in groundwater by spectrometry –linear multivariate calibration	24
پوستر	تشخیص الگو	محافظت کار، نیازی، باقرزاده، کنوز، کریمخانی	زینب محافظت کار	Probing molecular interactions and anti-corrosion performance of a group of drugs as green corrosion inhibitors in acidic Environment : Theoretical studies	25
پوستر	کالیبراسیون چند متغیره	رحمانی، خانمحمدی، زندباف	الهه رحمانی	Determination of heavy metal pollution (Pb, Ni and Cu) in groundwater of Qazvin province by spectrometry –non-linear multivariate calibration	26
پوستر	کالیبراسیون چند متغیره	احمدیه، ساجدی امین، کفیلی، ناصر	فاطمه احمدیه	Outliers detection map in analytical chemistry calibrations	27

پوستر	آنالیز بررسی انتشار انواع خطا	دالوند، کمپانی زارع، داداشی	بهرام دالوند	Measurement error structure estimation and confirmation in a smartphone-based diffuse reflectance spectrophotometer	28
پوستر	ارتباط کمی ساختار- فعالیت	بهمئی، نیازی، کنوز، یزدانیپور	سمیه بهمئی	MIA-QSAR Modeling and Molecular Docking Analysis of Some Cis- β -lactam Compounds with Antimalarial Activity	29
پوستر	ارتباط کمی ساختار- فعالیت	اسکندری، نیازی، محسن صرافی، یزدانیپور	ریحانه اسکندری	An In Silico Study of the Epithelial Anticancer Activity of Caffeine Derivatives by using MIA-QSAR methods and Molecular Docking	30
پوستر	ارتباط کمی ساختار- فعالیت	میرشفیعی، نیازی، یزدانی پور	میترا میرشفیعی	Application of PLS, OSC-PLS and GA-PLS for a QSAR study of inhibitory activity of p38MAP kinase derivatives and design new compounds for kinas using image processing	31
پوستر	ارتباط کمی ساختار- فعالیت	میرشفیعی، نیازی، یزدانی پور	میترا میرشفیعی	Comparing the performance of PLS, GA-PLS, and OSC-GA-PLS models for QSAR Study of Inhibitory Activity of Pyrazolone Derivatives and Design of New Compounds Using Image Processing	32
پوستر	ارتباط کمی ساختار- فعالیت	ناصری، نیازی، کنوز، باقرزاده، صمدی خواه	معصومه ناصری	In Silico study of a group of antibiotics affinity toward aptamers for biosensor development: Molecular Dynamics Simulations and Molecular Docking Studies	33
پوستر	ارتباط کمی ساختار- فعالیت	ناصری، نیازی، باقرزاده	معصومه ناصری	Application of Image Processing for QSAR Study of Quinolone Derivatives as Anti-malaria Agents using different Chemometrics Methods	34
پوستر	روش های تفکیک منحنی	امینیان فر، فاطمی	آدینه امینیان فر	Characterization of the volatile profile of Iranian tea using chromatographic fingerprint combined with multivariate curve resolution: Toward improving quality control and authentication	35

پوستر	روش های آنالیز چند راهی	خداپرست، مسرور، مانی ورنوسفادرانی	دنیا خداپرست	Simultaneous determination of anti-breast cancer drugs in blood plasma by Excitation-emission Fluorescence Spectroscopy and N-Way Calibration Methods	36
پوستر	روش های تفکیک منحنی	علی نوری، حاجی علی گل، قرشی، زمانی جوهرستانی	امیر حسین علی نوری	Peak Resolution in dual mode handheld Ion mobility spectrometry	37
پوستر	کالیبراسیون چند متغیره	درویش زاده، باهر، رضادوست چهارده، کریمی لنجی	مریم درویش زاده	A Study of antioxidant properties of some different species of the Malvaceae family using HPTLC and multivariate analysis technique	38
پوستر	ارتباط کمی ساختار- فعالیت	دارسرائی، نی بند، مانی ورنوسفادرانی	مائده دارسرائی	Classification of CC Chemokine Receptor Inhibitors: A Computational Journey Leading to Drug Discovery	39
پوستر	تشخیص الگو	اسدزاده، بهرام	زرتشت اسدزاده	Classification of Fluoroquinolones based on colorimetric sensor array using modified silver nanoparticles and Artificial Neural Networks	40
پوستر	کالیبراسیون چند متغیره	پهلوان، خدادادی کریموند، H Kalivas، عبداللهی	علی پهلوان	Calibration updating Using Multivariate Curve Resolution Methods	41
پوستر	متابولومیکس	بهزاد، خوشکام،	رقیه بهزاد خامسلو	Quality control of olive oils based on class discrimination methods	42
پوستر	کالیبراسیون چند متغیره	چهارلنگی، تشخوریان، همتی نژاد	مهسا چهارلنگی	An inexpensive analytical method based on colorimetric sensor array and chemometrics data analysis techniques for fraud detection in cherry seed oil samples	43
پوستر	تشخیص الگو	رستم نژاد، فاطمی	فاطمه رستم نژاد	Exploring the interactions of some PAHs with bovine serum albumin: spectroscopic method and chemometrics approaches	44
پوستر	تشخیص الگو	خسروی، کمپانی زارع، غفاری	علی خسروی	Sorting different types of rice using smartphone based multispectral images	45

پوستر	متابولومیکس	خوشکام، مرادی	لیلا مرادی	The effect of experimental factors on quality of extracted essential oils from sweet fennel using GC-MASS with the aid of chemometrics	46
پوستر	روش های تفکیک منحنی	محمد رحیمی، داداشی کلو، بهرام	رضا داداشی	The use of MCR-ALS to study the simultaneous release of combined drugs moxifloxacin and Pseudoephedrine based on spectrophotometric spectra obtained	47
پوستر	روش های تفکیک منحنی	غیاثوند محمدخانی، خوشکام، کمپانی زارع	لیلا غیاثوند محمدخانی	Nonnegative matrix factorization in ASCA modeling of graphene oxide toxic metabolomics 1H-NMR data	48
پوستر	ارتباط کمی ساختار-فعالیت	پهلوان یلی، پهلوان یلی	زهرا پهلوان یلی	A new insight into a wide range of protease inhibitors for covid-19 therapy using consensus molecular docking	49
پوستر	ارتباط کمی ساختار-فعالیت	پهلوان یلی، فاطمی	زهرا پهلوان یلی	Molecular docking study and mapping the binding site of some antiviral nanobodies against receptor binding domains (RBDs) of SARS-CoV-2 B.1.617	50
پوستر	ارتباط کمی ساختار-فعالیت	نی بند، مانی ورنوسفادرانی، بنویدی	مرضیه سادات نی بند	Comparison of variable selection methods to classification isoform selective Bcl-2 and Bcl-xL inhibitors	51
پوستر	تعیین اصالت و شیمی جنایی	مهندس دستگردی، دشتی، یزدان پناه، پرستار، کبارفرد	عیسی مهندس دستگردی	Development and validation of two handheld near infrared spectrometers to investigate water adulteration in bovine raw milk and comparison with Fourier transform infrared spectroscopy	52
پوستر	تعیین اصالت و شیمی جنایی	حمیدی، جهانی، پرستار، یزدان پناه، کبارفرد	زینب حمیدی	The use of handheld near-infrared spectroscopy combined with chemometrics techniques for detecting adulteration in industrial lime juice samples	53
پوستر	تعیین اصالت و شیمی جنایی	جمال زاده، یزدان پناه، کبارفرد، جهانی، پرستار	آیه جمال زاده	Detection of citric acid-adulterated industrial lime juices using portable Linksquare visible-near infrared spectrometer and class modelling approach	54

پوستر	متابولومیکس	کیانی	سجاد کیانی	Hyperspectral Imaging System to Determine Volatile Oils Content of Medicinal Plants	55
پوستر	طراحی آزمایش	مقصودلو	مهران مقصودلو	Documenting science: an initial formal experience	56
پوستر	تعیین اصالت و شیمی جنایی	رحمانی، مانی ورنوسفادرانی	نیلوفر رحمانی	Classification of Iranian rice varieties using FTIR spectroscopy and sparse Linear Discriminant Analysis	57
پوستر	روش های آنالیز چند راهی	زارعی، مانی ورنوسفادرانی	علی زارعی حسین آبادی	Simultaneous determination of antiviral drugs in biological fluids using excitation-emission fluorescence spectroscopy and chemometrics	58
پوستر	متابولومیکس	لطفی خاتون آبادی، و ثوق	رضا لطفی خاتون آبادی	Combining NMR and LC-MS Using Hierarchical Modeling: Untargeted Metabolomics Study of Opium Users and Healthy Controls	59
پوستر	ارتباط کمی ساختار- فعالیت	محمودی ریحانی، رازع شاهآبادی، عباسی تبار	مهروی محمودی ریحانی	QSAR Modeling for the In Silico Rational Design and Virtual Screening of Bioactive Peptides	60
پوستر	ارتباط کمی ساختار- فعالیت	محمودی ریحانی، رازع شاهآبادی، عباسی تبار	مهروی محمودی ریحانی	An efficient method for measuring the similarity of protein sequences based on physicochemical properties	61
پوستر	متابولومیکس	قاضی، مقدسی، پرستار شهری، فیضی	نیکتا قاضی	Untargeted metabolomics based on gas chromatography-mass spectrometry and advanced chemometric tools for identifying responsible metabolites in lettuce exposed to emerging contaminants	62
پوستر	طراحی آزمایش	قربانی، دمیری، پوراعتدال	جواد قربانی	Central Composite Design for Experimental Study and Statistical Modelling of Solubility Parameters of RDX and HMX in Solution of Diethylene Glycol and Ammonium Acetate	63
پوستر	ارتباط کمی ساختار- فعالیت	کاوه، نی بند، مانی ورنوسفادرانی	سارا کاوه	Identification of important structural features for selective inhibition of cyclin-dependent kinase inhibitors using machine learning techniques	64

65	Functionality of Rotational Ambiguity in Self-Modeling Methods to Signal Contribution of Chemical Component	حمیده بخشی	بخشی، عبدالهی	روش های تفکیک منحنی	پوستر
66	Study the inhibitory effect of some antiviral flavonoids against main protease of COVID-19 by molecular docking	زهرا پهلوان یلی	پهلوان یلی، فاطمی	ارتباط کمی ساختار-فعالیت	پوستر
67	Determination of saffron adulteration thorough the package using Vis-NIR hyperspectral imaging and chemometric techniques	منا استوار	استوار، هاشمی نسب، پرستار	تعیین اصالت و شیمی جنایی	پوستر
68	Determination of 2, 4, 6 trinitrotoluene in soil samples by flow injection analysis followed chemometrics methods	فریده باتقوا	باتقوا، حیدری	کالیبراسیون چند متغیره	پوستر
69	Application of vibrational spectroscopy tandem with chemometrics in the assessment of authenticity and adulteration of sport whey protein supplements	هانیه نوبری مقدم	نوبری مقدم، تمیجی، حاجی محمودی	روش های آنالیز چند راهی	پوستر
70	A green approach for electrospun fiber-in-tube solid phase microextraction of acidic red dyes from juice samples	سیده سارا نصرالهی	نصرالهی، یمینی، مانی ورنوسفادرانی	طراحی آزمایش	پوستر
71	Authentication of ink samples with ATR-FTIR spectroscopy associated with PLS-DA method	شیمیا زندباف	زندباف، باقری گرمارودی	تعیین اصالت و شیمی جنایی	پوستر
72	A Poly(arylene ethynylene)-Based Microfluidic Fluorescence Sensor Array for Discrimination of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons	الهام قوهستانی	قوهستانی، همتی نژاد، شریفی، تشخیصوربان، BUNZ، Seehafer، Bojanowski، Smarsly	تشخیص الگو	پوستر
73	The Role of Metabolomics in Diagnosis of Covid-19 for Inhibition of Coronavirus Pandemic	مریم کاشی	کاشی	متابولومیکس	پوستر

74	Spectrophotometric determination of Dexamethasone using dispersive liquid-liquid microextraction combined with chemometrics	ياسمن سفیدسفیده خوان	سفیدسفیده خوان، رحیم پور، خوشکام، امیری، جویبان	طراحی آزمایش	پوستر
75	Developing a novel biosensing system and investigation of interactions of acarbose with normal and glycated human serum albumin	مریم نظری	نظری، کاشانیان، پرنیانچی، جلالوند	کالیبراسیون چند متغیره	پوستر
76	A simple paper based optoelectronic nose by MoS2 QDs and organic dyes for discrimination of original and fraud cigarette brands	فرشته محمدی قرقانی	محمدی قرقانی، مصطفی پور، آخوند، همتی نژاد	تعیین اصالت و شیمی جنایی	پوستر
77	Statistical optimization of removal of Cr(VI) by Pistacia Atlantica-based activated carbon nano-structures using experimental design	سودابه سیفی	سیفی	طراحی آزمایش	پوستر
78	Discrimination of Heavy Metal Ions using an Optoelectronic Tongue-Sensor Array on a Paper Device	هدا شریفی	شریفی، تشخوریان، همتی نژاد،	تشخیص الگو	پوستر
79	Analyzing imaging mass spectrometry data by implementation of sparsity Constraint on multivariate curve resolution	محمد فرزانه	فرزانه، مانی	روش های تفکیک منحنی	پوستر
80	Development and optimization of microwave-assisted extraction of Satureja bachtiarica Bunge. essential oil using response surface methodology and its comparison with traditional method	سیده منصوره معمارزاده	معمارزاده، غلامی قاسمی پیربلوطی، معصوم	طراحی آزمایش	پوستر