

Modélisation de l'impact des polluants organiques sur l'environnement

Azzeddine GRID

Soutenue en:

(Thèse en préparation)

Abstract: Les polluants organiques contaminent l'eau, l'air et la terre mettant en péril les humains et l'environnement et constituent un souci pour le développement durable. Le calcul direct des propriétés physicochimiques ou des activités biologiques de ces contaminants à partir du travail expérimental est très difficile, coûteux et même dangereux. Cela nécessite de rechercher d'autres outils robustes et fiables qui peuvent donner des informations sur des molécules organiques en se fondant sur la relation structure-propriété/activité. Des modèles quantitatifs de QSAR/QSPR présentent une solution statistique pour tirer des informations à partir des descripteurs numériques caractérisant la structure moléculaire dans le but de prédire les propriétés/activités des nouvelles structures. En exploitant les outils statistiques et informatiques (algorithmes) des modèles seront construits et développés. La validation et l'analyse des résultats peuvent prouver la robustesse et la stabilité des modèles

Keywords : QSPR, QSAR, Modèle, MLR, Liquides Ioniques, réseaux de neurones, SVM, descripteurs