

RELATION STRUCTURE/SOLUBILITE AQUEUSE DE HAP PRIORITAIRES

Reçu le 01/09/2008 – Accepté le 23/06/2009

Résumé

Une relation structure/solubilité aqueuse des HAP retenus comme prioritaires par l'agence environnementale américaine (US-EPA) a été recherchée en favorisant l'approche hybride algorithme génétique/régression multilinéaire, les paramètres structuraux étant calculés avec le logiciel DRAGON. Parmi la centaine de modèles à 2 régresseurs obtenus nous avons sélectionné celui qui présente les meilleures valeurs du paramètre de prédiction (Q^2) et du coefficient de détermination (R^2) :

$\log S = 23,624 - 8,6316 \text{ VEA1} - 11,145 \text{ Kp}$;

$n=15$; $ES=0,464$; $Q^2(\%)=98,38$; $R^2(\%)=98,90$; $F=544,19$; $P=0,000$

La première variable explicative (VEA1) est associée aux propriétés locales d'une molécule, alors que la seconde reflète sa forme globale.

Mots clés: structure/propriété, hydrocarbures aromatiques polycycliques, descripteurs moléculaires

Abstract

A structure/aqueous solubility relationship was searched for PAHs considered as important by the US Environmental Protection Agency, while promoting the hybrid genetic algorithm/multilinear regression approach, the structural parameters being calculated with the software DRAGON. Among about a hundred of 2 regressor models gotten, we selected the one that present best values of the prediction parameter (Q^2) and of the determination coefficient (R^2).

$\log S = 23.624 - 8.6316 \text{ VEA1} - 11.145 \text{ Kp}$;

$n=15$; $SD=0.464$; $Q^2(\%)=98.38$; $R^2(\%)=98.90$; $F=544.19$; $P=0.000$

The first explanatory variable (VEA1) is related to the local properties of a molecule, whereas the second reflects its global shape.

Keywords: structure/property ; polycyclic aromatic hydrocarbons; molecular descriptors.

I.TOUHAMI
D.MESSADI

¹Laboratoire de Sécurité
Environnementale et Alimentaire
(LASEA)
Université BADJI Mokhtar BP12 –
Annaba – 23000
ALGERIE

ملخص

العلاقة بنية / د وبنانية مانية بالنسبة للهيدروكربونات العطرية المتعددة الحلقة المصنفة بالأولوية حسب الوكالة الأمريكية للبيئة (US.EPA) التي تم تحقيقها بتفضيل برنامج هجين وراثي / التراجع الخطي المتعدد. المقاييس البنيوية تم حسابها بالبرنامج DRAGON.

من بين مئة نموذج لمتغيرين تم اختيار أفضل مقياس دو أحسن قيم المتنبأ Q^2 وأحسن معامل التحديد : R^2 .

$\log S = 23.624 - 8.6316 \text{ VEA1} - 11.145 \text{ Kp}$;

$n=15$; $SD=0.464$; $Q^2(\%)=98.38$; $R^2(\%)=98.90$; $F=544.19$; $P=0.000$

المتغير التوضيحي الأول (Kp) مرتبط بالخواص المحلية للجزئي. أما الثاني (VEA1) يعكس شكله الشامل.

الكلمات المفتاحية: خواص , هيدروكربونات العطرية المتعددة الحلقة , مؤشرات بنيوية معتمدة على القيم الخاصة الهوليسنتكية الموزونة.