

Modèle TyPol

Fiche de présentation

TyPol en quelques mots

TyPol (Typologie des Polluants) est un outil qui permet de classer les contaminants organiques selon des propriétés directement liées aux processus d'intérêt environnementaux, par exemple leur rétention irréversible, leur dégradation biotique ou abiotique, leur transfert vers l'air ou les eaux, leur passage dans les organismes vivants ou encore leurs effets toxicologiques. Cet outil est basé à la fois sur une approche «in silico» calculant des descripteurs moléculaires et sur des méthodes de classification combinant descripteurs moléculaires et paramètres comportementaux.

Mots clés : pesticides, rétention/sorption, (bio)dégradation, volatilisation, transfert, bioconcentration, toxicité, QSAR, classification, régression PLS

Laboratoires de développement :

- * INRA - AgroParisTech UMR 1091 EGC - Environnement et Grandes Cultures - Equipe Sol, Thiverval-Grignon
- * INRA - UR 50 - Laboratoire de Biotechnologie de l'Environnement, Narbonne

Contact : Pierre Benoit (benoit@grignon.inra.fr)

Description détaillée

Pas d'échelle spatiale, ni temporelle.

Dans TyPol, les classes de composés sont construites à partir d'une analyse multivariée basée sur la régression PLS (Partial Least Square) et une classification hiérarchique des propriétés déduites de la structure des molécules considérées et des paramètres comportementaux, accessibles depuis une base de données MySQL. Les interfaces d'interrogation de la base de données et des traitements statistiques sont programmées dans le langage R qui intègre de nombreuses bibliothèques de méthodes de traitements statistiques des données, avec des sorties graphiques aussi sous R.

De par son mode de construction, l'outil est générique, adaptable pour répondre à différentes questions de recherche et concernant l'ensemble des contaminants organiques existants ou potentiels et notamment les dérivés de dégradation

biotiques ou abiotiques. Il vise à extrapoler des connaissances au sein d'une classe de composés à partir des résultats obtenus sur quelques molécules.

Initialisation, paramètres ajustables, variables d'entrée / forçages

Paramètres d'entrée :

- ↳ Caractéristiques moléculaires des composés organiques (nombre d'atomes, surface, moment dipolaire, énergies des orbitales...)
- ↳ Paramètres environnementaux : solubilité dans l'eau (S_w), coefficient de partage octanol/eau (K_{ow}), pression de vapeur (P_{vap}), constante de Henry (K_H), coefficients d'adsorption (K_{oc}), demi-vie de dégradation (DT50), facteur de bioconcentration.

Variables de sortie principales

TyPol permet de classer les contaminants en fonction des propriétés qui sont déterminantes dans les mécanismes responsables de leur comportement dans l'environnement, de leur passage dans les organismes vivants et de leurs effets toxiques.

Il vise à extrapoler des connaissances au sein d'une classe de composés à partir des résultats obtenus sur quelques molécules modèles.

Caractéristiques techniques

- ↳ Logiciel pré-requis : R
- ↳ Langage informatique : R, MySQL
- ↳ Présence d'un guide d'utilisation : Wiki

Utilisateurs

Scientifiques

Publications - Références

Servien R, Mamy L, Li Z, Rossard V, Latrille E, Bessac F, Patureau D, Benoit P. TyPol - a new methodology for organic compounds clustering based on their molecular characteristics and environmental behavior. Chemosphere (Accepté).