

UNIVERSITE KASDI MARBAH OUARGLA

Faculté des Sciences et de la Technologie et Science de la matière

Département de Génie des Procédés



Mémoire

MASTER ACADEMIQUE

Domaine Sciences et Technologie

Filière Génie des Procédés

Spécialité Génie Chimique

**Présenté Par : -BELMESSAOUD Farida
-KHEMIS Mellala**

Thème

**Modélisation de l'OTV (odor threshold value) des
molécules odorante**

Soutenue publiquement le : 15 /06/2013

Devant le jury composé de :

M^{elle}.	MOKHBI Yasmina	MA(B)	Examinatrice	UKM Ouargla
M^{elle}.	MOKADEM khadra	MA(B)	Examinatrice	UKM Ouargla
Mr.	SAIDAT Mustapha	MA (A)	Encadreur	UKM Ouargla

Année Universitaire : 2012 /2013

Remerciements

*M*erci à Dieu pour tous ce qu'il m'a donné.

*J*e tiens à remercier vivement mes familles, pour ses soutiens et ses encouragements
durant toutes mes années d'études.

*E*n présentant ce travail, nous tenons à remercier à notre encadreur **Mr. SIDAT**

Mustapha, pour son aide et ses conseils qui nous ont été très précieux.

*N*ous tenons à remercier profondément tous les enseignants de Département génie des
procédés.

*N*ous remercions également les membres des jurys pour l'effort qu'ils feront dans le but
d'examiner ce modeste travail.

*E*nfin, très grand remerciement pour les étudiants de 2^{ème} année Master génie des procédés
promotion 2013.

Farida



Mellala



Dédicace

Je remercie Dieu jour et nuit parce qu'il vous ma donnée.

Je dédie ce travail à :

En premier lieu, à mes parents

A mon chère marie Ali

Ma chère Farida

*Mes frères, Abdeslam, abdellah, lakhder , belkheir, mabrouk ,
mahdi*

mes sœurs, laaroussia, hayet, zohra,saida et la petite abir

A tous ceux qui me sont chers

Une dédicace très spéciale a mon encadreur Saidat Mustapha.

Enfin à toute ma promotion de deuxième master génie chimique

Mellala

Dédicace

Mes chères parents, sachez que vous êtes les meilleurs parents qu'une personne peut avoir, si j'avais a choisi mes parents je vous aurais choisi. Vous m'avez donné tout votre amour, votre temps.

Je remercie Dieu jour et nuit parce qu'il vous ma donnée.

Je dédie ce travail à :

En premier lieu, à la mémoire de mon père

Ma mère

Ma chère Melalla

Mes frères et surtout Ali , mes sœurs Malika,Zahira et surtout Fatma

A tous ceux qui me sont chers

Une dédicace très spéciale a mon encadreur Saidat Mustapha.

Enfin à toute ma promotion de deuxième master génie chimique

Farida

Liste des tableaux

Tableau		Page
I.1	Principales molécules odorantes.	8
II.1	Exemple d'application par la méthode de Marrero et Pardillo.	16
II.2	Modèles mathématique de la nouvelle méthode.	17
II.3	Coefficients d'ajustement (linéaire).	19
II.4	Analyse de la variance (linéaire).	20
II.5	Coefficients d'ajustement (non linéaire).	22
II.6	Analyse de la variance (non linéaire).	22
III.1	Valeurs de L'ODT et les valeurs des interactions binaires des composés organiques.	30
III.2	Coefficient d'ajustement (corrélation) de la propriété étudiée.	31
III.3	Comparaison selon les valeurs de R^2 , SD et F.	31
III.4	Valeurs des constantes de corrélations de la propriété étudiée par la nouvelle méthode.	32
III.5	Comparaison selon la distinction entre les isomères.	32
III.6	Exemples applications de l'ODT (régression linéaire).	33
III.7	Exemples applications de l'ODT (régression non linéaire).	34

Liste des Figures

Figures		Page
I.1	les phéromones.	9
I.2	Voies olfactives centrales.	10
I.3	les cellules du goût.	10
I.4	les goûts de base.	11
I.5	voies gustatives.	12
I.6	olfaction rétro nasale.	12
I.7	Schéma représente logiciel XLSTAT.	13
II.1	Principe de fragmentation d'interaction de deux groupes.	16
II.2	Schéma représente comment lancer le logiciel XLSTAT.	17
II.3	Schéma représente comment on choisit le type de régression.	18
II.4	Schéma représente comment on sélectionne les variables.	19
II.5	Schéma représente comment on sélectionne les données à modéliser «régression non linéaire».	21
II.6	Schéma représente comment on choisit les modèles mathématiques.	22
III.1	représentation des données expérimentales de l'ODT.	24
III.2	Distance entre les prédictions et les observations de l'ODT.	35
III.3	Résidus normalisés sous la forme d'un diagramme en bâtons de la collection active de l'ODT.	35
III.4	Résidus normalisés sous la forme d'un diagramme en bâtons de la collection de validation de l'ODT.	36

Liste des équations

Equation		Page
II.1	L'équation de modèle 1 de le seuil de l'odeur.	17
II.2	L'équation de modèle 2 de le seuil de l'odeur.	17
II.3	L'équation de modèle 3 de le seuil de l'odeur.	17
II.4	L'équation de modèle 4 de le seuil de l'odeur.	17
II.5	L'équation fonction pour choisir le modèle non linéaire (ODT).	17
II.6	L'équation du modèle déterministe de la régression linéaire.	18
III.1	L'équation fonction pour le modèle linéaire (ODT).	33

Nomenclateurs

- N_i : Le nombre de groupes du type (i).
 Pr_1 : Paramètres correctifs aux équations de (II.1), (II.2), (II.3), (II.4) et (II.6).
 Pr_2 : Paramètre correctif aux équations (II.1), (II.2), (II.3), (II.4) et (II.6).
 Pr_3 : Paramètre correctif aux équations (II.3), (II.4) et (II.6).
 C_i : La valeur de contribution de groupe (i).
 SD : Déviation standard.
 X : variables explicatives quantitatives (XLSTAT).
 Y : variables explicatives quantitatives (XLSTAT).
 a° : valeur constant avec a, b, c.
 a_1 : valeur de constant de régression

Symboles Grecques :

- Σ : Symbole de sommation.

Abréviations :

- SD** : Standard Deviation.

$$SD = \sqrt{\frac{\sum (y_{est} - y_{exp})^2}{N}}$$

- ODT** : odor detection threshold

- F** : F de Fisher

Sommaire

Sommaire

		Page
Introduction		1
Chapitre I	Terminologies et position du problème	3
I.1	Introduction	3
I.2	Terminologies	3
I.2.1	L'odeur	3
I.2 .1.1	Les sources d'odeurs	5
I.2 .1.2	La réglementation	5
I.2 .1.3	Grandeurs olfactométriques	6
I.2 .1.4	Relation entre l'olfaction et la gustation	9
I.2.2	Logiciel XLSTAT	13
I.2.3	Problématique	13
I.2.4	Position de problème	14
I.2 .5	Modèle mathématique	14
I.3	Conclusion	14
Chapitre II	Description de nouvelle méthode	15
II.1	Introduction	15
II.2	Développement de la nouvelle méthode	15
II.2.1	Contribution des interactions des groupes	15
II.2.2	Régression	17
II.3	Conclusion	23
Chapitre III	Résultats et discussion	24
III.1	Introduction	24
III.2	Résultats de régression	24
III.3	Sommaire statistique et teste de modélisation.	30
III.4	Comparaisons avec les méthodes existées	31
III.4.1	Comparaison les valeurs de R^2 , SD et F	31

III.4.2	Comparaison selon la distinction entre les isomères	32
III.5	Exemples applications	33
IV.6	Graphes	34
IV.6.1	Graphes de l'ODT	35
III.7	conclusion	36
Conclusion Générale		38

Introduction Générale

Introduction générale

La technique de Conception des Produits Assistée par Ordinateur (Computer Aided Molecular/Product Design) est définie comme étant le chemin inverse de la prédiction des propriétés par les méthodes de contribution de groupes. Elle consiste à se fixer dès le départ un ensemble de valeurs de propriétés dites cibles, puis de chercher/trouver par une combinaison de groupes moléculaires, des molécules ayant ces propriétés cibles (Constantinou et al., 1996; Harper and Gani, 2000). Cette approche a fait l'objet de tentatives prometteuses dans plusieurs domaines de chimie et de génie des procédés, à savoir la conception des solvants (Gani & Brignole, 1983; Sinha & Achenie, 1998; Cismondi & Brignole, 2004; Chen et al., 2005), remplacements des réfrigérants (Churi & Achenie, 1997; Vaidyaraman & Maranas, 1999; Constantinou et al., 1996), conception des polymères (Maranas, 1996; Maranas, 1997), conception des produits pharmaceutiques (Sachin Siddhaye et al., 2000; Siddhaye et al., 2004).

Récemment, quelques substances odorantes ont été interdites dans le document REACH (régulation, Evaluation et autorisation de la législation chimiques de la Communauté européenne) en terme d'environnement et de toxicité et forçant l'industrie à les remplacer par d'autres moins toxique et en respect de l'environnement. Un tel problème est un champ potentiel pour l'application de la démarche conception des produits et spécialement la technique de conception des produits assistée par ordinateur (CAMD). Ces molécules odorantes sont utilisées dans la majorité des produits de consommation pour inciter les consommateurs à associer des impressions favorables à un produit donné.

La recherche de nouvelles molécules odorantes proches de molécules commerciales existantes, nécessite la connaissance de la relation structure moléculaire – odeur. Cette dernière est difficile à modéliser, en raison de la subjectivisée de l'odeur (Amboni et al., 2000). La recherche scientifique dans ce domaine est orientée vers l'utilisation des paramètres structuraux, topologiques, géométriques, électroniques et physicochimiques pour développer des modèles capable de prédire l'odeur des molécules. Un certain nombre de méthodes et techniques ont été employées avec succès dans ce domaine, à savoir les réseaux de neurones (Chastrette et al. (1995) et Cherqaoui et al. (1998)).

Introduction

L'objectif du présent travail est de modéliser l'OTV (Odor Threshold Value) des molécules odorantes à l'aide de technique de contribution de groupes

On a divisé ce travail en trois chapitres peuvent être résumés comme suit :

Un premier chapitre, intitulé « Terminologies et position de problème ». Dans ce dernier, on a parlé sur les différentes terminologies qui sont utilisées dans ce travail et on a posé aussi le problème et expliquer l'objectif.

Dans le deuxième chapitre, intitulé « Description de la nouvelle méthode » est consacré à la description détaillée au principe de la nouvelle méthode, avec la description des étapes de régression.

Le troisième chapitre, intitulé « Résultats et discussions », on a présenté les résultats obtenus et on fait une analyse de ces résultats avec une comparaison avec d'autres méthodes de contribution.

Enfin, on a terminé par une conclusion générale sur la méthode développée et par quelques recommandations pour les travaux de la future.

Chapitre I

I.1 Introduction :

Il est important, pour la science et l'industrie, de disposer de données fiables sur l'odeur et le calcul du seuil de l'odeur de quelque composés organique. Mais la mesure de cette propriété n'est pas facile, pour cela plusieurs chercheurs ont développé des méthodes d'estimation de cette propriété. Ces méthodes de calcul font appel à des équations analytiques et à des contributions de groupements moléculaires.

Dans ce chapitre on va présenter de définitions générales pour toutes les terminologies que sont utilisés dans les chapitres suivants.

I.2 Terminologie :

Dans cette section nous asseyons de projeter la lumière d'un coté sur l'odeur et le calcul du seuil de l'odeur de quelque composés organiques avec l'utilisation de déférent technique pour estimer ces valeurs principalement la méthode des interactions des groupes et d'autre coté la modélisation des données et la régression par l'utilisation de logiciel XLSTAT [3].

I.2 .1 L'odeur :

L'odeur peut se définit comme la sensation causée par des substances à tension de vapeur appréciable qui stimulent les organes sensoriels du nez et des cavités des sinus. La réponse à ce stimulus est complexe; il peut y avoir confusion entre le goût et l'odorat dans les cas où une faible odeur donne une saveur à une substance. On résoudra habituellement ce genre de problèmes en déterminant à partir de quelle concentration la substance en question produit une sensation, puisque l'odorat réagit généralement à des concentrations (parties par milliard ou moins) beaucoup plus faibles que le goût (parties par million ou plus). Cette grande sensibilité de l'odorat est d'autant plus remarquable que la concentration en volume d'une substance odorante dans l'air qui la véhicule jusqu'au système sensoriel est bien inférieure à sa concentration dans l'eau d'où elle provient [1].

En générale l'odeur c'est une molécule chimique. Sa perception provient de l'interaction de molécules chimiques, émises ou transformées dans l'air, avec le système olfactif. Les substances appartiennent aux principaux composés suivants :

- Composés azotés (amine, ammoniac ...)
- Acides gras volatils,
- Aldéhydes et cétones,
- Composés soufrés (hydrogène sulfuré, mercaptans, sulfures et disulfures ...)
- Mélange de ces composés.

Elle implique un grand nombre de paramètres (chimie, neurophysiologie, physiologie, sociologie) qui rendent difficile son analyse [1].

A. Chimiquement :

Une odeur peut provenir d'une molécule toxique ou non. En effet, certaines substances inodores ou émettant des odeurs agréables sont plus dangereuses que celles malodorantes (ex : monoxyde de carbone). De plus, la structure et l'orientation de la molécule sont importantes en ce qui concerne les odeurs. Car, deux molécules de même structure mais orientées différemment, peuvent ne pas avoir la même odeur (ex : thiazole) [2].

B. Neuro physiologiquement :

La réaction neurophysiologique varie selon le moment de la perception. Une odeur de cuisine n'est pas perçue à l'identique au réveil ou au moment des repas. Ce type de facteur montre la difficulté de quantifier une gêne olfactive et non plus uniquement une odeur. Caractériser, mesurer et/ou suivre une molécule chimique est relativement simple, prévoir la gêne qu'elle occasionnera est beaucoup plus difficile [2].

C. Physiologiquement :

Le ressenti d'une odeur diffère selon les individus. Certains les perçoivent mieux que d'autres, ce qui demande de déterminer un ressenti moyen avec un écart type pouvant permettre d'apprécier la gêne ressentie par les personnes plus sensibles [2].

D. Sociologiquement :

Les odeurs sont liées à notre culture et aux circonstances de rencontre. Une odeur agréable n'est pas la même pour un européen que pour un asiatique, et un ouvrier sera moins sensible

aux odeurs de son usine que les riverains [2].

I.2 .1.1 Les sources d'odeurs :

Les activités susceptibles de provoquer des problèmes d'odeurs sont relativement nombreuses. On peut citer par exemple :

- Secteur agricole :
 - sources étendues : épandage en surface (lisiers, boues, produits de traitement ...)
 - sources ponctuelles : élevages (porcs, bovins, volailles ...)
- Secteur industriel :
 - Industries agroalimentaires,
 - Raffineries de pétrole (activité non représentée en Picardie),
 - Industries chimiques,
 - Industries des matières plastiques,
 - Métallurgie,
 - Epuration des eaux usées : stations d'épuration
 - Traitement des déchets.

Pour une même unité industrielle, les sources sont diverses :

- Effluents canalisés (cheminée)
- Sources ponctuelles génératrices d'odeurs très intenses à proximité immédiate (évents, puisards ...)
- Sources d'odeurs peu intenses mais qui peuvent représenter des nuisances importantes du fait de la surface d'échange (décanteurs, bassins d'épandage ...) [2].

I.2 .1.2 La réglementation :

Le seuil de perception olfactive peut varier couramment d'un facteur 10 à 100 entre des personnes différentes ou pour une même personne en fonction de nombreux facteurs (humidité relative, température, présence, d'autres composés dans l'air, fatigue). Malgré ce fait, des normes existent pour essayer de limiter cette gêne pour le plus de facteurs possibles. Car les nuisances olfactives représentent le deuxième motif de plainte après le bruit. Un

récapitulatif non exhaustif de la législation et de la réglementation des odeurs est énoncé ci-dessous :

- La norme Afnor X-43-101 définit les bonnes pratiques de la mesure de l'odeur d'un effluent gazeux, la détermination du facteur de dilution.
- La norme Afnor X-43-103 définit les bonnes pratiques de la mesure de l'odeur d'une atmosphère gazeuse.
- La norme Afnor X-43-104 définit les méthodes de prélèvement des odeurs.
- La norme AFNOR 13725
- La première loi sur l'air du 2 août 1961 n° 61-842 régit, de façon générale, les émissions de gaz et d'odeurs.
- La loi sur les installations classées du 19 juillet 1976 impose, par le biais de certaines instructions techniques, des valeurs limites d'émissions d'odeurs.
- L'arrêté ministériel du 12 février 2003 paru au JO du 15 avril 2003 page 6654 et suivantes, texte n° 27 NOR: DEVP0320051A: il s'applique à la transformation des déchets animaux, rubrique 2730. C'est la première fois que les nuisances olfactives sont effectivement prises en compte, limitées en intensité et en durée. Les articles 28 et 49-II sont très importants et applicables dès le 15 avril 2004.
- Enfin, l'article R-232-12 du Code du travail précise, depuis 1913, que " l'air des ateliers doit être renouvelé de façon à rester dans l'état de pureté nécessaire à la santé des travailleurs." [2].

I.2 .1.3 Grandeurs olfactométriques :

➤ Définitions :

1. Seuil olfactif :

Pour chaque corps pur ou mélange odorant, on peut définir une concentration seuil pour laquelle l'effluent est ressenti comme odorant par 50 % des membres d'un jury constituant un échantillon de population. Dans le cas d'un corps pur, cette concentration est appelée par convention "seuil olfactif".

2. Niveau d'odeur:

Ce niveau est défini conventionnellement comme étant le facteur de dilution qu'il faut appliqué à un effluent pour qu'il ne soit pas ressenti comme odorant par 50 % des personnes d'un jury constituant un échantillon de population. On parle aussi de "Facteur de dilution au seuil de perception". (Art. 29 de l'AM du 02/02/98)

En d'autres termes, si un effluent doit être dilué 100 fois pour ne plus être ressenti comme odorant, on lui attribuera, par convention, un niveau d'odeur de 100.

Attention : En raison des phénomènes de synergie et d'inhibition qui peuvent exister entre différents composés, on ne peut assimiler le niveau d'odeur d'un mélange à la somme pondérée des niveaux d'odeur des molécules qui le composent.

3. Débit d'odeur :

Le débit d'odeur est défini conventionnellement comme étant le produit du débit d'air rejeté, exprimé en Nm^3/h , par le facteur de dilution au seuil de perception (Art. 29 de l'AM du 02/02/98). Combiné à un modèle de dispersion atmosphérique, cet indicateur permet de déterminer une aire de persistance de la nuisance en fonction des conditions météorologiques.

Attention : ne pas confondre le débit d'odeur avec le débit d'effluent odorant.

4. Intensité d'odeur :

L'intensité d'odeur ou intensité odorante caractérise la grandeur de la sensation olfactive. Sa mesure, réalisée par un jury entraîné, consiste à comparer l'intensité du mélange gazeux à l'intensité d'échantillons de référence [2].

➤ Les ordres de grandeur :

Dans l'eau : mg/litre

Dans l'air ambiant : $\mu\text{g}/\text{m}^3$ voir ng/m^3 ou pg/m^3

VL à la cheminée : mg/m^3

1 m^3 d'air = 1,3 kg

➤ Principales molécules odorantes :

	Composés	Caractéristique de l'odeur	Seuil olfactif $\mu\text{g}/\text{m}^3$	VME* $\mu\text{g}/\text{m}^3$	Industries concernées (exemples)
Soufrés	Hydrogène sulfuré	Oeuf pourri	1 à 5	14 000	Papeterie, chimie, sidérurgie, station d'épuration, abattoir, traitement des lisiers, raffinerie ...
	Méthylmercaptan	Choux, ail	4 à 50	1 000	
	Ethylmercaptan	Choux	0,3 à 3	1 000	
	Diméthylsulfure	Légumes en décomposition	3 à 30		
	Diméthylsulfure	putride	# 50		
Azotés	Ammoniac	Piquant, irritant	20 000	> 18000	Chimie, pétrochimie, épuration, textile, poisson, décharge, pharmacie ...
	Méthylamine	Poisson en décomposition	30 à 300	12 000	
	Diméthylamine	Poisson avarié	40 à 100	18 000	
	Triméthylamine	Poisson avarié	# 0,5	25 000	
	Propylamine		# 20		
	Butylamine		# 500	15 000	
	Aniline		1 000	10 000	
Aldéhydes	Formaldéhyde	Âcre	65 à 1 200	3 000	Sucrierie, chocolaterie, peinture vernis, plastique, bois, parfumerie ...
	Acétaldéhyde	Fruit, pomme	50 à 300	180 000	
	Propionaldéhyde	Rance	# 20		
	Butyraldéhyde	pomme	20 à 50		
	Valéraldéhyde		20 à 70		
Acides gras volatils	Acétique	Vinaigre	# 900	25 000	Imprimerie, textile, sucrierie, poisson, abattoir ...
	Propionique		# 80	30 000	
	Butyrique	Beurre rance	4 à 50		
	Valérique	transpiration	# 5		

Tableau(I.1) : Principales molécules odorantes [2].

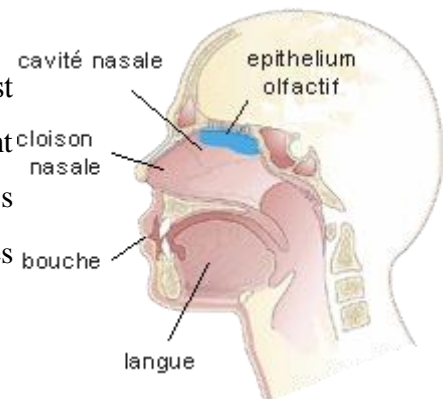
I.2 .1.4 Relation entre l'olfaction et la gustation :

L'odorat et le goût sont deux sens possédant des récepteurs qui réagissent à des substances chimiques contenues dans l'air et dans les aliments. Ces substances doivent se dissoudre dans la salive et dans le mucus avant d'être goûtées ou senties. Il faut comprendre que « les différents goûts perçus sont en réalité des saveurs unies à des odeurs. » L'odorat et le goût sont si liés que lorsque l'on a le nez bouché, on goûte définitivement moins les aliments. Aussi, lorsqu'on mâche des aliments dans la cavité buccale, des molécules odorantes se libèrent et circulent dans l'arrière-gorge. « Cette voie rétro-nasale permet la perception de l'arôme de l'aliment qui est responsable de 90% de la sensation du goût ! »

De plus, « ces deux sens montrent une certaine susceptibilité à la fatigue ». En effet, lorsqu'une excitation gustative ou olfactive persiste, la sensation s'altère à cause de la fatigue. Aussi, ces deux sens protègent l'organisme des dangers que certains aliments ou certaines odeurs peuvent engendrer. À titre d'exemple, si l'on sent une odeur de produit ménager sur un aliment, on ne le mangera pas [4].

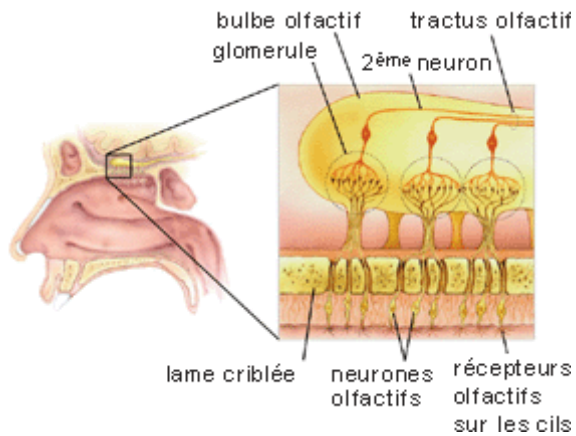
Comment fonctionnent l'odorat et le goût ?

L'olfaction et la gustation sont des sens chimiques. C'est à dire que les sensations olfactives et gustatives sont provoquées par la stimulation de certaines cellules nerveuses sensibles du nez ou de la bouche par des molécules spécifiques [4].



Figure(L.1) : les phéromones.

Les récepteurs aux odeurs (les neurones olfactifs) sont stimulés par des particules chimiques en suspension dans l'air qui nous entoure (l'odeur du pain frais, du café fraîchement torréfié ou d'un bouquet de fleurs, etc.). Toutes les cellules réceptrices aux différentes odeurs sont localisées en haut des fosses nasales.

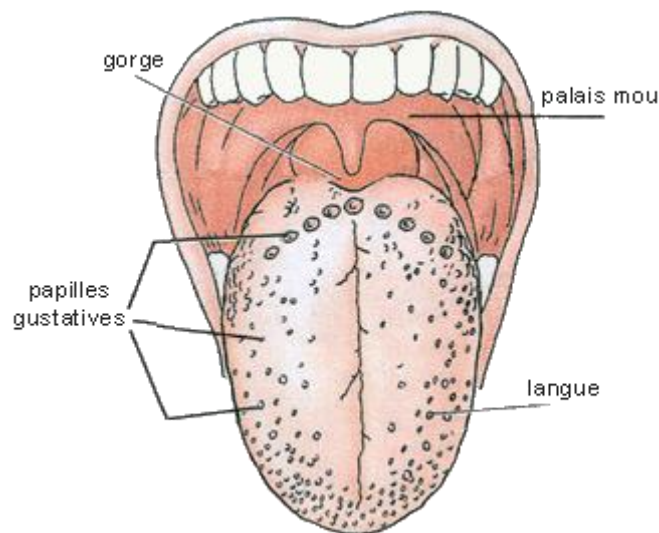


Figure(I.2) : Voies olfactives centrales.

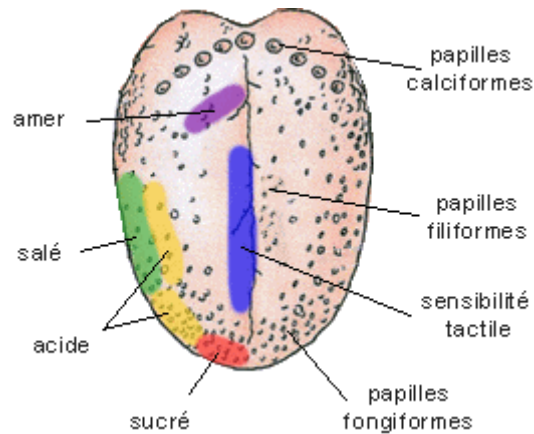
Lorsqu'un neurone olfactif est stimulé, il produit un courant électrique qui est transmis au cerveau par les fibres du nerf olfactif. Dans le cerveau, ces perceptions olfactives sont analysées, reconnues et mémorisées. L'homme peut reconnaître plus de 10000 odeurs différentes [4].

Les récepteurs aux goûts (les neurones gustatifs) sont activés par certaines molécules présentes dans notre alimentation ou nos boissons. Ces stimulations gustatives sont transmises au cerveau par le nerf lingual, le nerf glosso-pharyngien et le nerf vague.

Les cellules nerveuses gustatives sont localisées sur le palais, la langue et la gorge [4].



Figure(I.3) : Cellules du goût.



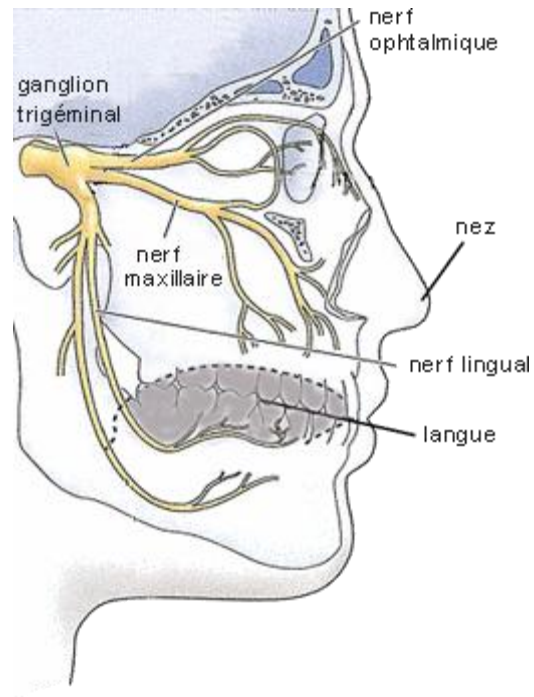
Figure(I.4) : Les goûts de base.

Les personnes en bonne santé sont capables de reconnaître cinq stimulations gustatives différentes :

- Sucré
- Salé
- Amer
- Acide
- Glutamate.

Les autres nerfs sensitifs

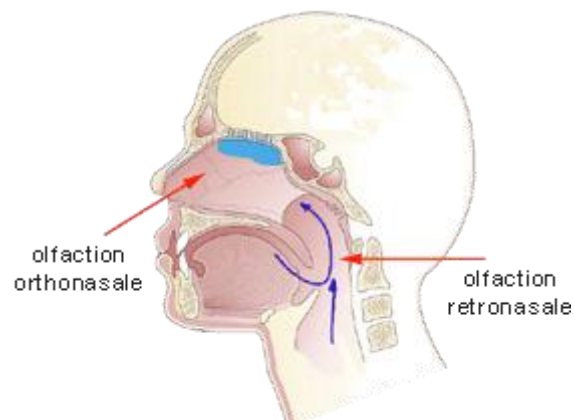
Au voisinage des nerfs olfactifs et gustatifs, il existe un 3ème nerf: le nerf trijumeau qui est sensible à la chaleur, au froid, aux irritants comme le poivre et à la consistance (liquide, solide ou gazeux). Le nerf trijumeau se divise en trois branches: le nerf ophtalmique, le nerf maxillaire et le nerf lingual [4].



Figure(I.5) : voies gustatives.

La FLAVEUR d'un aliment est composée de la somme des cinq stimulations gustatives différentes, de sa température, de ses propriétés irritantes, de son odeur et de sa consistance. C'est l'odeur d'un aliment qui contribue vraisemblablement le plus à sa flaveur caractéristique [4]. Pourquoi, lorsqu'on a le nez bouché lors d'une grippe ou d'un rhume, les aliments n'ont-ils plus de flaveur ?

Lors de l'alimentation, les odeurs passent dans le nez par sa partie postérieure (olfaction rétro nasale) [4].



Figure(I.6) : Olfaction rétro nasale.

I.2 .2 Logiciel XLSTAT :

C'est un outil d'analyse de données et statistique pour Microsoft Excel il offre de très nombreuses fonctionnalités qui font d'Excel un outil performant et facile d'accès pour répondre à la majorité des besoins en analyse de données et modélisation.

Toutes les fonctions XLSTAT sont accessible à partir d'une icône qui est ajouté à la barre de menus de l'Excel comme interface rend ce logiciel simple à utiliser et efficace. La qualité des calcule est quant à elle identique à celle des logiciels scientifiques les plus renommés, et XLSTAT couvre l'essentiel des besoins du statisticien qu'il soit expert ou débutant.

Des modules optionnels répondre à des besoins plus scientifique (control statistique des procédés, analyses des effets de en chimie et pharmacologie). XLSTAT offre de très nombreuses fonctionnalités qui font d'Excel un outil performant et facile d'accès pour répondre à la majorité de vos besoins en analyse de données et modélisation.

XLSTAT fonctionne avec toutes les versions d'Excel, depuis la version 97 jusqu'à la version 2010 sous l'environnement Windows avec les versions X, 2004 et 2011 sous Mac OS.

Parce que c'est un logiciel sûr, rapide, facile à installer et à utiliser et disponible à un prix défiant toute concurrence, plus de 30000 ingénieurs, statisticiens, professeurs, étudiants, chercheurs ou consultants utilisent XLSTAT dans plus de 100 pays [7].

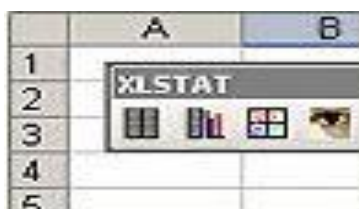


Figure (I.7) : Schéma représente logiciel XLSTAT

I.2 .3 Problématique :

En industries chimiques et pétrochimiques, la connaissance de propriétés physiques et thermodynamiques des composés organique, est considéré comme étant la basse de conception et de simulation. Pour cela plusieurs méthodes ont été proposées. Parmi elles on cite celles basant sur le principe des interactions des groupes simples constituant la molécule. Comme exemple, la méthode de (Nagata 2003),Cometto-Muñiz and Cain,Cometto-Muñiz and Abraham,Hellman and Small[5], la méthode de Marriro et Pardillo [6]. Dans la dernière méthode, le principe de base est l'interaction binaire entre les groupes simples, mais elle ne peut pas quelque fois distinguer entre les différents isomères des composés qui ont la même structure globale.

I.2 .4 Position de problème :

L'intérêt de développer une méthode d'estimation est l'obtenir des valeurs calculées du seuil de l'odeur des composés organiques, ce dernier est utilisé comme variable pour résoudre les modèles mathématiques qui représente les procédés chimiques, pour cela on nécessite la définition de la modèle mathématiques.

I.2 .5 Modèle mathématique :

Un modèle qui représente un produit ou un procédé est définit comme étant un point de départ logique pour la conception et la simulation. Ce modèle est constitué typiquement de trois types d'équations.

- Les équations de bilan.
- Les équations constitutives.
- Les équations de contraintes

Il est à noter ici que la collection des modèles de la propriété sélectionnée représente la collection des équations constitutives. Alors que les conditions d'équilibres sont imposées par les équations des contraintes. Donc la sélection d'un modèle de propriété appropriée affecte les résultats de conception et de simulation.

D'un point de vue d'utilisateur de simulation, un modèle de propriété est dit satisfaisant s'il couvre les besoins particuliers des produits et des procédés en cas de nécessité. Donc théoriquement le développeur d'une simulation devra avoir un nombre infini des modèles et n'est pas de fournir par une collection des modèles de propriété qui ont un comportement générale avec un domaine d'application assez large.

Il est à noter que l'utilisation d'un modèle sélectionné de la propriété demande la disponibilité des paramètres de modèle convenable.

I.3 Conclusion :

Dans ce chapitre on a essayé de projeter la lumière d'un côté sur du seuil de l'odeur de point de vue leur classification et la présentation du concept des méthodes d'estimation utilisées pour estimer cette propriété principalement celles basées sur le concept de contribution de groupes ainsi que la définition et la description du logiciel XLSTAT. D'autre côté, on a essayé de poser le problématique et d'illustrer l'objectif de ce travail.

Chapitre II

II.1 Introduction :

Dans ce chapitre on va discuter le développement de la nouvelle méthode proposé, et on va parler aussi de la base des données, les groupes des interactions utilisées et l'explication des étapes des régressions.

II.2 Développement de la nouvelle méthode :

Dans ce travail, la propriété des composés sont considérées pour être des modèles mathématiques en fonction des paramètres dépendant de la structure moléculaire. Cette propriété peut être calculée par la sommation du nombre de fois de chaque interaction de groupe, présents dans la molécule.

➤ Principe de la méthode :

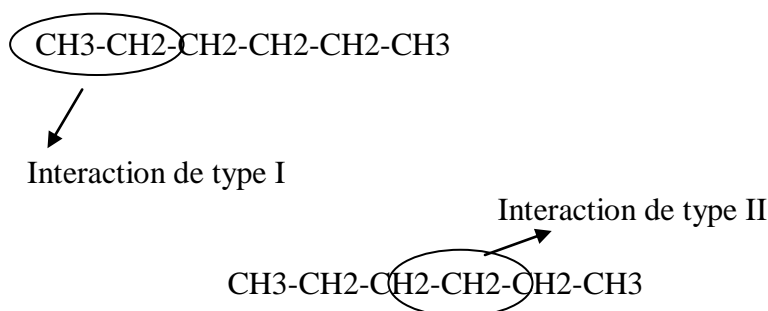
Le principe de base utilisé pour fragmenter la structure moléculaire des composés organiques, prend en considération les interactions entre deux groupes simples et voisins de la structure moléculaire, c'est-à-dire toutes les interactions binaires possibles entre les groupes simples constituant la molécule. De plus, et afin de distinguer cette méthode de la méthode proposée par Marrero et Pardillo [6], on a ajouté un terme ou bien un coefficient similaire au coefficient calculé par la technique « Adjancy matrix » mais avec une modification qu'on va l'expliquer ultérieurement. Ce coefficient joue le rôle d'un emprunt digital pour chaque constituant. La collection étudié dans ce travail contient 267 composés, le nombre d'interactions utilisés est égale à 264 interactions, ce nombre ne représente pas toutes les possibilités des interactions binaires, mais il couvre seulement la collection des composés choisis pour former la base de données. Il est à noter aussi qu'on a basé sur des interactions de deux dimensions, c -à -d, cette collection peut distinguer entre les différentes isomères sur le plan et pas pour les isomères trois dimensions ou spatiales comme les isomères R et S.

II.2.1 Contribution des interactions des groupes :

Le principe de base utilisé pour fragmenter la structure moléculaire des composés organiques prend en considération les interactions entre deux groupes simples et voisins de la structure moléculaire, c'est as dire toutes les interactions binaires possibles entre les groupes simples constituants la molécule.

❖ Exemple de la fragmentation :

n-hexane :

**Figure (II.1):** Principe de fragmentation d'interaction de deux groupes.

Donc le n-hexane contient deux interactions de type I (C₁) et trois interactions de type II (C₂₀).

L'idée globale utilisée pour choisir cette technique est la même que celle utilisée pour développer la méthode proposée par Marrero et Pardillo [6] mais l'inconvénient de cette méthode est qu'elle n'est pas valable pour les isomères de quelque composées organiques.

Exemple :

Composés	Interaction binaire	C _i	Fréquence
n-pentane	CH ₃ -CH ₂ -	C ₁	2
CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₃	-CH ₂ -CH ₂ -	C ₂₀	2
n-butylaldehyde	CH ₃ -CH ₂ -	C ₁	1
CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -COH	-CH ₂ -CH ₂ -	C ₂₀	1
	-CH ₂ -COH	C ₃₃	1

Tableau (II.1): Exemple d'application par la méthode de Marrero et Pardillo [6]➤ **Base de données :**

La base de données utilisée pour réaliser ce travail, contient plus de 267 composés. La propriété traitée dans ce travail est le seuil de l'odeur des composées organiques. Cette collection rassemble les familles chimiques suivantes (alcane, alcène, alcynes, alcools, halogènes, acides carboxyliques, aldéhydes, cétones, éthers, acétones, amines et les sulfides).

➤ **Modèles proposés :**

Les modèles utilisés pour développer ce travail sont listés au tableau ci-dessous :

	R ² (%)		
Modèle 1	50	$ODT = pr_1 * EXP (pr_2 * \sum N_i c_i)$	(II .1)
Modèle 2	57.9	$ODT = 10^{(\sum N_i c_i - pr_1)} / (1 + 10^{(\sum N_i c_i - pr_1)} * pr_2)$	(II .2)
Modèle 3	55	$ODT = pr_1 / 1 + EXP (pr_2 - pr_3 * \sum N_i c_i)$	(II .3)
Modèle 4	64.4	$ODT = pr_1 * 10^{(-2)} + pr_2 * Sin (2 * Pi() * pr_3 * 10^{(-3)} * \sum N_i c_i)$	(II .4)
Modèle 5	71.1	$ODT = pr_1 + pr_2 * \sum N_i c_i + pr_3 * (\sum N_i c_i)^2$	(II .5)

Tableau (II.2) : Modèles mathématique de la nouvelle méthode.

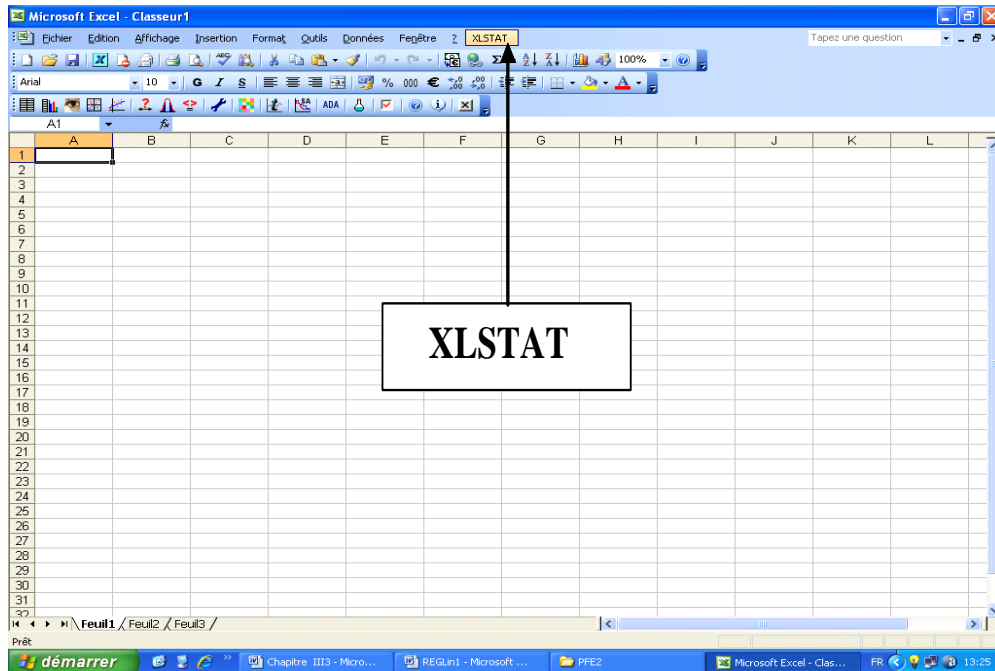
N_i : nombre total des interactions (i)

C_i : la valeur de contribution de groupe (i)

II.2.2 Régression : [8]

La régression est effectuée pour la détermination des interactions des groupes, avec le calcul des pourcentages moyens des erreurs, pour appliquer cette régression on a utilisé le logiciel XLSTAT. L’utilisation de ce logiciel n’est pas compliqué, simple et rapide.

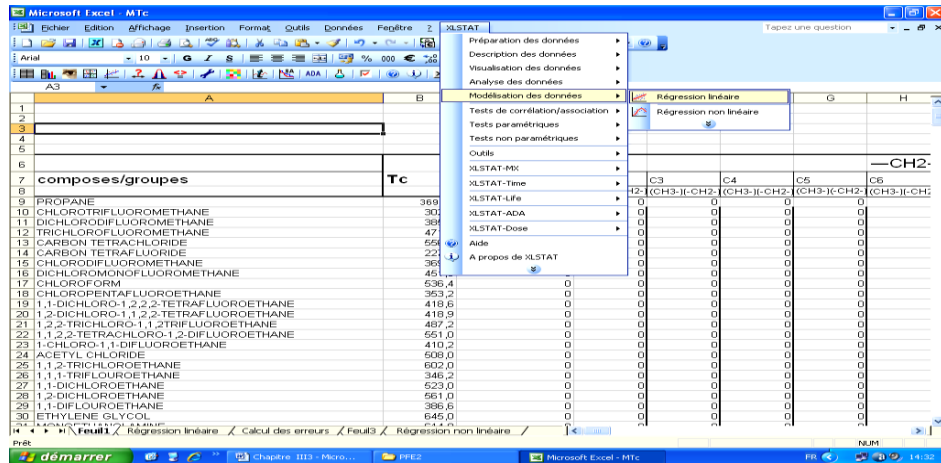
➤ **Les étapes de régression :**



Figure(II.2) : Schéma représente comment lancer le logiciel XLSTAT.

Ouvrir une feuille d’Excel et lancer le logiciel XLSTAT par le click sur l’icône de ce dernier.

De la barre menu, choisir XLSTAT. Une liste va apparaître, cette dernière contient les différentes tâches du logiciel XLSTAT.



Figure(II.3) : Schéma représente comment on choisit le type de régression.

De la liste précédente, on choisit « Modélisation des Données », puis « Régression Linéaire » si on veut faire une régression linéaire, ou « Régression Non Linéaire » si on veut faire une régression non linéaire.

A. Dans le modèle linéaire :

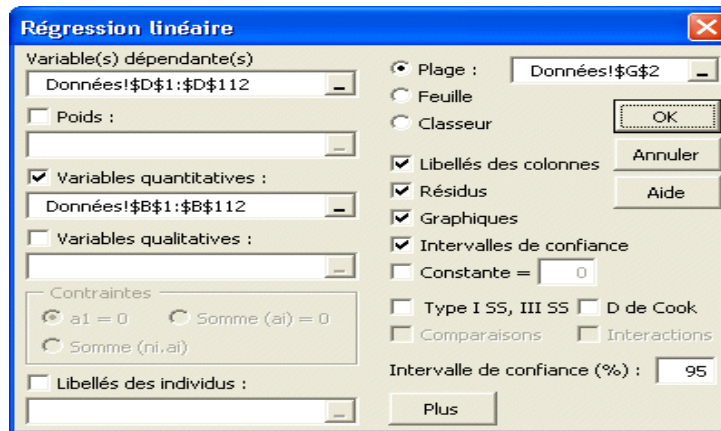
La régression linéaire est la méthode statistique la plus utilisée. On distingue habituellement la régression simple (une seule variable explicative) de la régression multiple (plusieurs variables explicatives) bien que le cadre conceptuel et les méthodes de calculs soient identiques.

Le principe de la régression linéaire est de modéliser une variable dépendante quantitative Y_i , à travers d'une combinaison linéaire de (p) variables explicatives quantitatives, X_1, X_2, \dots, X_p . Le modèle déterministe (ne prenant pas en compte d'Aléatoire) s'écrit pour une observation i .

$$Y_i = A_0 + \sum_{j=1}^N N_j X_{ij} + \varepsilon_i \quad (II.6)$$

Où Y_i est la valeur observée pour la variable dépendante pour l'observation i , X_{ij} est la valeur prise par la variable j pour l'observation i , et ε_i est l'erreur du modèle.

Dans ce travail, on a utilisé la régression linéaire pour estimer le seuil de l'odeur. Cette régression peut être fait sur le logiciel par le choix de l'onglet « Régression Linéaires ». Une fois cette dernière est sélectionnée, une boîte de dialogue va apparaître.



Figure(II.4) : Schéma représente comment on sélectionne les variables.

De la boîte précédente, on sélectionne «Variable(s) dépendante(s)» pour sélectionner les valeurs expérimentales de la propriétés à modéliser (les Y_i), puis on choisit «Variable(s) quantitative(s)» pour sélectionner les variables indépendantes (les X_{ij}). Après cette étape, on passe aux autres onglets de cette boîte pour sélectionner les autres paramètres, puis on click sur le bouton OK.

Une fois que vous avez cliqué sur le bouton "OK", les calculs commencent puis les résultats sont affichés.

➤ **Tableaux résultants :**

Le premier tableau de résultats fournit les coefficients d'ajustement du modèle. Le R^2 (coefficient de détermination) donne une idée du % de variabilité de la variable à modéliser, expliqué par les variables explicatives. Plus ce coefficient est proche de 1, plus la régression au modèle linéaire est meilleure.

Observations	267.000
Somme des poids	267.000
DDL	162.000
R ²	0.616
R ² ajusté	0.370
MCE	0.255
RMCE	0.505
MAPE	178.745
DW	1.756
Cp	105.000
AIC	-288.698
SBC	87.963
PC	0.882

Tableau (II.3) : Coefficients d'ajustement (linéaire)

Le deuxième tableau fournit les détails sur le modèle et est essentiel dès lors que le modèle doit être utilisé pour faire des prévisions, des simulations ou s'il doit être comparé à d'autres résultats.

Source	DDL	Somme des carrés	Moyenne des carrés	F de Fisher	Pr > F
Modèle	104	66.185	0.636	2.500	< 0,0001
Erreur	162	41.242	0.255	/	/
Total corrigé	266	107.428	/	/	/

Tableau (II.4) : Analyse de la variance (linéaire)

Le tableau qui est suivant, présente l'analyse des résidus. Une attention particulière doit être portée aux résidus centrés réduits, qui, étant données les hypothèses liées à la régression linéaire

➤ **Graphes résultants :**

Le premier graphique permet de visualiser les données, la droite de régression, et les deux intervalles de confiance (le plus proche de la courbe est l'intervalle autour de la moyenne de l'estimateur, le deuxième est l'intervalle autour de l'estimation ponctuelle aussi appelé intervalle de prédiction). On voit ainsi clairement une tendance linéaire, mais avec une forte variabilité autour de la droite. Les valeurs suspectes sont en dehors du second intervalle de confiance.

Le troisième graphique semble indiquer que les résidus croissent.

B. Dans le modèle non linéaire :

La régression non linéaire permet de modéliser des phénomènes complexes n'entrant pas dans le cadre du modèle linéaire. XLSTAT propose des fonctions préprogrammées parmi

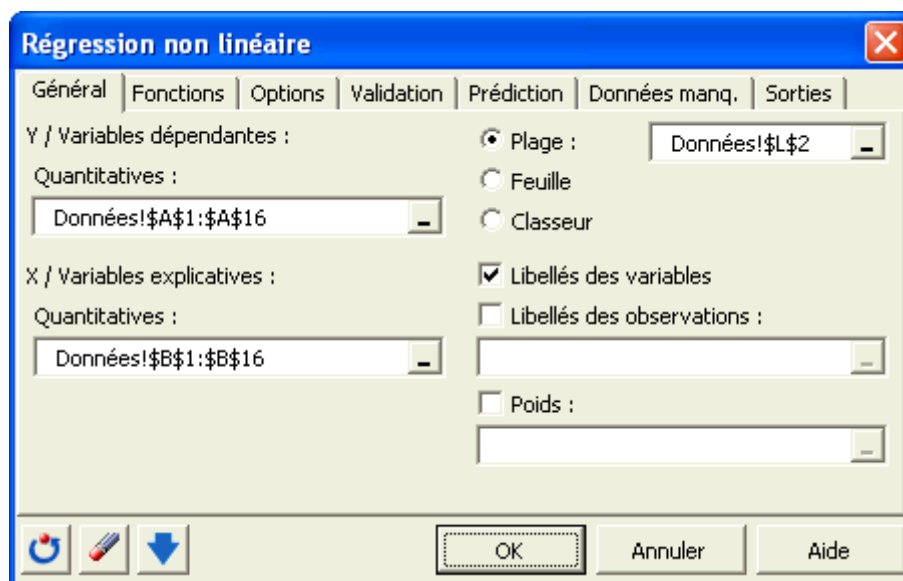
lesquelles l'utilisateur pourra éventuellement trouver le modèle décrivant le phénomène à modéliser.

Lorsque le modèle recherché n'est pas disponible, l'utilisateur a la possibilité de définir un nouveau modèle et de l'ajouter à sa librairie personnelle. Pour améliorer la vitesse et la fiabilité des calculs, il est recommandé d'ajouter les dérivées de la fonction par rapport à chacun des paramètres du modèle.

Dans ce travail, on a fait la régression non linéaire pour une propriété qui est le seuil de l'odeur. Les étapes de régression étant comme suit :

- Une régression linéaire pour cette propriété comme l'on a vue dans les étapes précédentes.
- Une régression non linéaire liant les valeurs expérimentales de la propriété en fonction de valeurs prédites de même propriété, résultante de la régression linéaire. Les étapes de la régression non linéaires sont les suivantes :

De la barre de menu, choisir XLSTAT puis choisir « Modélisation des Données ». De la liste de cette dernière choisir « Régression Non Linéaire », une boîte de dialogue va apparaître.

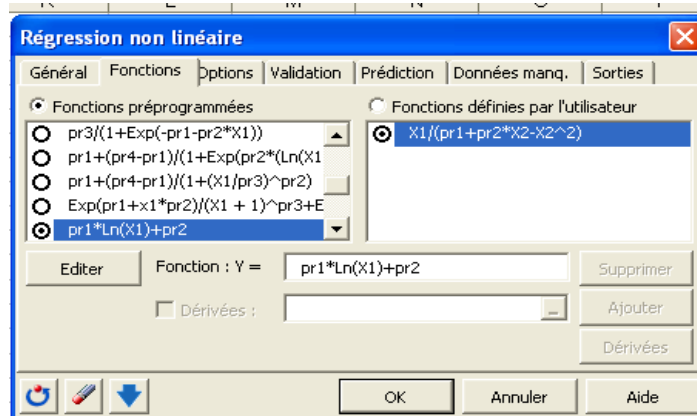


Figure(II.5) : Schéma représente comment on sélectionner les données à modéliser «régression non linéaire».

Dans cette boîte suivez les mêmes étapes que celle de la régression linéaire pour sélectionner les données à modéliser. Une fois cette étape effectuée, passez à l'onglet « Fonctions » pour sélectionner le modèle mathématique à utiliser. Par exemple, pour le seuil de l'odeur, on a choisir le modèle suivant:

$$ODT = pr_1 + pr_2 * \sum N_i c_i + pr_3 * (\sum N_i c_i)^2$$

Puis continuer avec les autres onglets pour définir les autres paramètres. Ensuite cliquer sur le bouton OK.



Figure(II.6) : Schéma représente comment on choisit les modèles mathématiques.

Une fois que vous avez cliqué sur le bouton "OK", les calculs commencent puis les résultats sont affichés. Le premier tableau de résultats fournit des statistiques simples sur les données sélectionnées. Le second tableau (ci-dessous) donne les coefficients d'ajustement du modèle parmi lesquels le R² (coefficient de détermination) qui donne une idée du % de variabilité de la variable dépendante, expliqué par la variable explicative. Plus ce coefficient est proche de 1, meilleur est le modèle. La somme des carrés des résidus (SSE) est le critère utilisé par XLSTAT pour ajuster le modèle.

Observations	167.000
DF	164.000
R ²	0.711
SSE	14.835
MSE	0.090
RMSE	0.301

Tableau (II.5) : Coefficients d'ajustement (non linéaire)

L'équation du modèle ajustée est fournie. La syntaxe est compatible avec Excel afin de rendre sa réutilisation aisée.

Equation du modèle	$\text{ODT(ppm)}=0,068554267536851+0,605973068241607*\sum N_{i;c_i}+$ $0,232936461706881*(\sum N_{i;c_i})^2$
--------------------	--

Tableau (II.6) : Analyse de la variance (non linéaire)

Le tableau suivant ce tableau présente l'analyse des résidus. On remarque que les observations pour lesquelles de modèle est le moins bien ajusté sont les observations.

A la fin les graphes :

Le premier graphique permet de visualiser les données et la courbe du module ajusté.

Les autres graphiques permettent d'analyser les résidus, et sont particulièrement utiles lorsque le nombre de données est important.

II.3-Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons expliqué le principe de la nouvelle méthode, définit la base de données utilisée, ainsi que la modèle proposé, et on a expliqué les étapes de régression, à savoir régression linéaire ou non linéaire.

Chapitre III

III.1-Introduction :

Dans les chapitres précédents, on a parlé des méthodes prédictives et leur importance dans le calcul du seuil de l'odeur, on a détaillé la méthodologie de développement de la nouvelle méthode, et on a expliqué les étapes de régression.

Dans ce chapitre on va présenter quelques résultats de régression des données expérimentales aux modèles proposés, obtenus par le logiciel XLSTAT, ainsi que la comparaison entre les qualités de prédiction des modèles de propriété entre eux, et la qualité de prédiction entre les modèles de propriété de la récente méthode et les modèles des autres méthodes. Pour cela, on a utilisé deux formes de présentation des résultats, sont les résultats se forme des tableaux et se forme des graphes.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P
					NON RING											
					CH3-CH2	CH3-CH<	CH3-C<	CH3-CH=	CH3-C=	CH2-COO	CH3-OH	CH3-O-	CH3-CO	CH3-CHO	CH3-COOH	CH3-COO
3	Les composés	LOG(1/ODT)	ODT(ppm)	C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7	C8	C9	C10	C11	C12	
4	n-Pentane	-0.146	1.157	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5	Isopentane	-0.114	1.121	1	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6	n-Hexane	-0.176	1.192	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7	2-Methylpentane	-0.845	2.328	1	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8	3-Methylpentane	-0.949	2.583	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9	2,2-Dimethylbutane	-1.301	3.673	1	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	2,3-Dimethylbutane	0.377	0.686	0	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11	n-Heptane	0.174	0.840	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
12	2-Methylhexane	0.377	0.686	1	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
13	3-Methylhexane	0.076	0.927	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
14	3-Ethylpentane	0.432	0.649	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15	2,2-Dimethylpentane	-1.580	4.855	1	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16	2,3-Dimethylpentane	-0.653	1.921	1	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17	2,4-Dimethylpentane	0.027	0.973	0	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18	n-Octane	-0.230	1.259	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
19	2-Methylheptane	0.959	0.383	1	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
20	3-Methylheptane	-0.176	1.192	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
21	4-Methylheptane	-0.230	1.259	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
22	2,2,4-Trimethylpentane	0.174	0.840	0	2	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
23	n-Nonane	-0.342	1.408	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24	2,2,5-Trimethylhexane	0.046	0.955	0	2	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
25	n-Decane	0.208	0.812	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Figure(III.1) : représentation des données expérimentales de l'ODT.

III.2-Résultats de régression :

Le résultat du travail qu'on a fait, est une collection des modèles mathématiques représentant la propriété étudiée. Ces modèles mathématiques sont basant sur les valeurs d'une collection, des interactions, constituées de 264 contributions pour cette

propriété. Les distributions des valeurs de ces paramètres sont listées au tableau ci-dessous.

Les composés	ODT (ppm)		Les interactions	ODT(ppm) calculé
n-Pentane	1.157		CH3-CH2-	0.248
Isopentane	1.121		CH3-CH<	0.058
n-Hexane	1.192		CH3-C<	0.496
2-Methylpentane	2.328		CH3-CH=	0.348
3-Methylpentane	2.583		CH3-C=	1.414
2,2-Dimethylbutane	3.673		CH2-COO ⁻	-0.244
2,3-Dimethylbutane	0.686		CH3-OH	-0.362
n-Heptane	0.840		CH3-O-	0.050
2-Methylhexane	0.686		CH3-CO	0.067
3-Methylhexane	0.927		CH3-CHO	-0.156
3-Ethylpentane	0.649		CH3-COOH	-0.094
2,2-Dimethylpentane	4.855		CH3-COO	-0.032
2,3-Dimethylpentane	1.921		CH3-NH ₂	-0.170
2,4-Dimethylpentane	0.973		CH3-NH-	0.104
n-Octane	1.259		CH3-N<	-0.055
2-Methylheptane	0.383		CH3-CN	0.000
3-Methylheptane	1.192		CH3-NO ₂	0.000
4-Methylheptane	1.259		CH3-SH	-0.388
2,2,4-Trimethylpentane	0.840		CH3-S-	-0.193
n-Nonane	1.408		CH2-CH2-	-0.020
2,2,5-Trimethylhexane	0.955		CH2-CH<	0.028
n-Decane	0.812		CH2-C<	0.013
n-Undecane	0.942		CH2-CH=	-0.825
n-Dodecane	0.383		CH2-C=	-1.172
Methylcyclopentane	1.259		CH2-C≡	-0.453
Cyclohexane	1.489		CH2-Cl	-0.043
Methylcyclohexane	0.439		CH2-OH	-0.205
Propylene	3.047		CH2-O-	-0.005
1-Butene	0.641		CH2-CO-	-0.220
Isobutene	2.718		CH2-CHO	-0.386
1-Pentene	0.368		CH2-COOH	-0.095
1-Hexene	0.426		CH2-COO	-0.296
1-Heptene	0.649		CH2-NH ₂	-0.043
1,3-Butadiene	0.528		CH2-NH	-0.051
Isoprene	0.267		CH2-N<	-0.244
Chloroform	1.786		CH2-CN	0.000
Acetaldehyde	0.059		CH2-NO ₂	0.000
Propionaldehyde	0.050		CH2-SH	-0.596
n-Butylaldehyde	0.042		CH2-S-	-0.414
Isobutylaldehyde	0.032		>CH-CH<	0.560
n-Valeraldehyde	0.034		>CH-C<	0.000

Isovaleraldehyde	0.018	>CH-CH=	0.000
n-Hexylaldehyde	0.029	>CH-C=	0.000
n-Heptylaldehyde	0.024	>CH-C≡	0.000
n-Octylaldehyde	0.007	>CH-Cl	0.425
n-Nonylaldehyde	0.031	>CH-OH	-0.302
n-Decylaldehyde	0.033	>CH-O-	-0.645
Acrolein	0.087	>CH-CO	-0.679
Crotonaldehyde	0.194	>CH-CHO	-0.487
Methacrolein	0.126	>CH-COOH	0.314
Methyl ethyl ketone	0.700	>CH-COO	0.278
Methyl n-propyl ketone	0.212	>CH-NH ₂	-0.303
Methyl isopropyl ketone	0.740	>CH-NH-	-0.112
Methyl n-butyl ketone	0.198	>CH-N<	0.000
Methyl sec-butyl ketone	0.198	>CH-CN	0.000
Methyl isobutyl ketone	0.463	>CH-NO ₂	0.000
Methyl tert-butyl ketone	0.255	>CH-SH	-0.620
Methyl n-amyl ketone	0.115	>CH-S	0.000
Methyl isoamyl ketone	0.069	>C-C<	0.000
Ethyl formate	1.539	>C-CH=	0.000
n-Propyl formate	0.982	>C-C=	0.000
Isopropyl formate	0.584	>C-C≡	0.000
n-Butyl formate	0.346	>C-F	0.000
Isobutyl formate	0.733	>C-Cl	0.384
Methyl acetate	1.259	>C-Cl	-1.404
Ethyl acetate	0.942	>C-O-	0.000
n-Propyl acetate	0.538	>C-CO	-0.807
Isopropyl acetate	0.451	>C-CHO	0.000
n-Butyl acetate	0.166	>C-COOH	0.000
Isobutyl acetate	0.123	>C-COO-	0.000
sec-Butyl acetate	0.073	>C-NH ₂	-1.429
tert-Butyl acetate	0.317	>C-NH	0.000
n-Hexyl acetate	0.064	>C-N<	0.000
Methyl propionate	0.365	>C-SH	-2.055
Carbon tetrachloride	1.941	>C-S-	0.000
Trichloroethylene	1.806	CH ₂ =CH-	0.902
Tetrachloroethylene	0.892	=CH ₂ -CH=	0.000
Formaldehyde	0.740	=CH ₂ -C=	0.000
n-Butyl propionate	0.236	CH ₂ =C	-0.845
Isobutyl propionate	0.183	CH ₂ =C=	0.000
Methyl n-butyrate	0.117	CH ₂ =O	0.337
n-Propyl n-butyrate	0.141	CH=CH-	0.662
Isopropyl n-butyrate	0.110	=CH-CH=	-1.398
n-Butyl n-butyrate	0.098	=CH-C=	-2.103
Isobutyl n-butyrate	0.061	CH=C	-0.874
Methyl n-valerate	0.070	CH=C=	0.000
n-Propyl n-valerate	0.084	≡C-CH=	1.265

Methyl Isobutyrate	0.066		F-CH=	0.000
n-Propyl isobutyrate	0.067		Cl-CH=	2.276
Isopropyl isobutyrate	0.213		Br-CH=	0.000
n-Butyl isobutyrate	0.191		I-CH=	0.000
Isobutyl isobutyrate	0.325		OH-CH=	-0.231
2-Ethoxyethyl acetate	0.270		O-CH=	-1.089
Acetonitrile	3.047		CO-CH=	-2.254
Acrylonitrile	2.570		CHO-CH=	-1.219
Ammonia	1.192		COO-CH=	0.848
Methylamine	0.233		COOH-CH=	0.000
Ethylamine	0.263		CH=O	0.240
n-Propylamine	0.297		NH ₂ -CH=	0.000
Isopropylamine	0.201		NH-CH=	0.000
n-Butylamine	0.463		>N-CH=	0.000
Isobutylamine	0.059		CN-CH=	0.000
sec-Butylamine	0.463		NO ₂ -CH=	0.000
tert-Butylamine	0.463		SH-CH=	0.000
Dimethylamine	0.227		S-CH=	0.000
Trimethylamine	0.011		>C=C<	0.489
Diethylamine	0.267		=C=C=	0.000
Triethylamine	0.104		>C=C=	0.000
Acetic acid	0.108		≡C-C=	0.000
Ethyl propionate	0.116		F-C=	0.000
n-Propyl propionate	0.290		Cl-C=	0.000
Isopropyl propionate	0.092		Br-C=	0.000
Isobutanol	0.141		I-C=	0.000
sec-Butanol	0.518		OH-C=	0.000
n-Pentanol	0.368		O-C=	0.000
sec-Pentanol	0.584		O-CO	0.147
Isopentanol	0.063		O-CHO	0.391
tert-Pentanol	0.348		CO-C=	-0.630
n-Hexanol	0.108		COH-C=	-0.846
n-Heptanol	0.098		COOH-C=	0.000
n-Octanol	0.077		COO-C=	0.000
n-Nonanol	0.048		O=C-	0.000
n-Decanol	0.044		NH ₂ -C=	0.000
2-Ethoxyethanol	0.789		NH-C=	0.000
2-n-Butoxyethanol	0.255		>N-C=	0.000
Diallyl disulfide	0.026		CN-C=	0.000
Tetrahydrothiophene	0.040		NO ₂ -C=	0.000
Carbon disulfide	0.508		SH-C=	0.000
Benzene	1.539		S-C=	0.000
Toluene	0.618		=C=C=	0.000
Ethylbenzene	0.463		=C=O	0.000
o-Xylene	0.657		S=C=	0.052
m-Xylene	0.250		≡C-C≡	0.000

p-Xylene	0.290		≡c-F	0.000
n-Propylbenzene	0.089		≡c-Cl	0.000
Isopropylbenzene	0.125		≡c-Br	0.000
1,2,4-Trimethylbenzene	0.398		≡c-I	0.000
1,3,5-Trimethylbenzene	0.463		≡c-OH	0.000
o-Ethyltoluene	0.323		≡c-O-	0.000
m-Ethyltoluene	0.175		≡c-CO	0.000
p-Ethyltoluene	0.125		≡c-CHO	0.000
n-Butylbenzene	0.126		≡c-COOH	0.000
o-Diethylbenzene	0.132		≡c-COOH	0.000
m-Diethylbenzene	0.315		≡c-COO	0.000
p-Diethylbenzene	0.033		≡c-NH ₂	0.000
Isobutyric acid	0.059		≡c-NH-	0.000
n-Valeric acid	0.012		≡c-N<	0.000
Isovaleric acid	0.016		≡c-CN	0.000
n-Hexanoic acid	0.040		≡c-NO ₂	0.000
Ethanol	0.753		≡c-SH	0.000
n-Propanol	0.358		≡c-S-	-0.236
n-Butanol	0.242		OH-O-	0.000
Methyl mercaptan	0.016		OH-CO	0.000
Ethyl mercaptan	0.006		OH-COO	0.000
n-Propyl mercaptan	0.008		CO-O ⁻	0.000
Isopropyl mercaptan	0.005		O-CHO	0.000
n-Butyl mercaptan	0.004		CO-F	0.000
Isobutyl mercaptan	0.006		CO-Cl	0.000
sec-Butyl mercaptan	0.011		CO-Br	0.000
Methyl acrylate	0.086		CO-I	0.000
Ethyl acrylate	0.028		CO-CHO	0.000
Indole	0.030		CO-COOH	0.000
Skatole	0.005		CO-COO	0.000
Thiophene	0.039		CO-NH ₂	0.000
Styrene	0.233		CO-NH-	0.000
Phenol	0.105		CO-N<	0.000
o-Cresol	0.029		CO-CN	0.000
m-Cresol	0.018		CO-NO ₂	0.000
p-Cresol	0.014		CO-SH	0.000
Furan	2.707		CO-S-	0.000
Pyridine	0.301		CO-CO	0.000
Limonene	0.242		CHO-CHO	0.000
n-Butyl acrylate	0.038		CHO-COOH	0.000
Isobutyl acrylate	0.048		CHO-COO-	0.000
Methyl methacrylate	0.508		CHO-NH ₂	0.000
tert-Butyl mercaptan	0.011		CHO-NH-	0.000
n-Amyl mercaptan	0.002		CHO-N<	0.000
Isoamyl mercaptan	0.002		CHO-CN	0.000
n-Hexyl mercaptan	0.008		CHO-NO ₂	0.000

Dimethyl sulfide	0.080		CHO-SH	0.000
Diethyl sulfide	0.011		CHO-S-	0.000
Dimethyl disulfide	0.070		COOH-COOH	0.000
Diethyl disulfide	0.067		COOH-COO-	0.000
1-Octene	0.099		COOH-NH ₂	0.000
1-Octyne	0.119		COOH-NH-	0.000
Pentanal	0.497		COOH-N<	0.000
2-Pentanone	0.395		COOH-CN	0.000
2-Heptanone	0.763		COOH-NO ₂	0.000
2-Nonanone	0.970		COOH-SH	0.000
Pentyl acetate	0.932		COOH-S-	0.000
Heptyl acetate	0.990		COO-COO	0.000
Octyl acetate	0.664		COO-NH ₂	0.000
Decyl acetate	0.607		COO-NH-	0.000
Dodecyl acetate	0.257		COO-N<	0.000
Formic acid	0.412		COO-CN	0.000
Butanoic acid	0.087		COO-NO ₂	0.000
Hexanoic acid	0.075		COO-SH	0.000
Octanoic acid	0.007		COO-S-	0.000
Methanol	0.042		CN-NH ₂	0.000
2-Propanol	0.067		CN-NH-	0.000
2-Butanol	0.138		CN-N<	0.000
2-Methyl-2-propanol	0.062		CN-NO ₂	0.000
4-Heptanol	0.403		CN-SH	0.000
Ethyl benzene	0.284		CN-S-	0.114
p-Cymene	0.886		S-S	-0.581
Pentyl benzene	0.996		S-CH=	2.643
Heptyl benzene	0.779		CH≡N	0.000
Chlorobenzene	0.330		C≡N	0.789
Linalool	0.978		NH ₃	0.000
Geraniol	0.343		-C≡CH	0.068
b-Phenylethyl alcohol	0.112		CH ₃ -CH<	3.255
Hexylbenzene	0.094		CH ₃ -C<	0.199
Octylbenzene	0.350		CH ₃ -C=	0.176
Propanal	0.067		CH ₂ -CH ₂	-0.143
Propanone	0.923		CH ₂ -CH<	0.000
Propene	0.259		CH ₂ -C<	3.317
Buta-1,3-diene	0.705		CH ₂ -CH=	-0.364
Dicyclopentadiene	0.141		CH ₂ -C=	-0.019
5-Ethylidene-2-norbornene	0.183		CH ₂ -O-	-6.637
1,2-Dichloroethane	0.458		CH ₂ -CO	-0.291
Propylene dichloride	0.549		CH ₂ -NH-	-0.445
Fluorotrichloromethane	0.497		CH ₂ -S-	0.000
Diisopropylether	0.170		>CH-CH<	0.000
Dibutylether	0.313		>CH-C<	0.000
			>CH-C=	0.150

Ethylene oxide	0.089		>CH-O-	0.000
1,2-Propylene oxide	0.368		>CH-NH-	0.000
1,2-Butylene oxide	0.313		>C-CH<	0.000
1,4-Dioxane	0.905		>C-C<	0.000
Butanone	0.741		>C-C=	0.000
4-Methylpentan-2-one	0.368		=CH ₂ -CH<	0.000
5-Methylhexan-2-one	0.147		=CH ₂ -C<	0.000
Cyclohexanone	0.399		=CH ₂ -C=	-1.479
2-Methylpent-2-ene-4-one	0.170		=CH-CH<	-0.485
Isophorone	0.497		=CH-CH=	-0.085
2,4-Pentanedione	0.135		=CH-C-	0.642
2-Ethylhexyl acetate	0.368		CH=CH-	-0.007
Vinyl acetate	0.399		NH-CH=	-0.690
2-Methoxyethyl acetate	0.625		=CH-N=	-0.511
2-Ethoxyethylacetate	0.287		=C-CH<	0.000
Butyl cellosolve acetate	0.383		=C-C-	-0.553
Ethylene diacetate	0.357		=C-CH=	0.385
Diisopropylamine	0.411		>C=CH-	-0.507
Dibutylamine	0.333		=C-C=	-0.154
Propylenediamine	0.157		>C=C<	0.000
Ethylene diamine	1.000		=C-NH	-0.480
2-Methylpropan-1-ol	0.844		OH-C=	0.753
3-Methylbutan-1-ol	0.399		-O-CH=	0.000
2-Methylbutan-1-ol	0.247		=CH-CO	-0.316
2-Methylpentan-1-ol	0.198		-N-CH ₂	0.275
2-Ethylbutan-1-ol	0.313		-N=CH-	0.000
2-Ethylhexan-1-ol	0.323		-N=C<	0.000
Diisobutyl carbinol	0.852			
Isodecanol	0.183			
Isobutyl cellosolve	0.970			
Methyl ethanolamine	1.000			
Dimethylethanolamine	0.162			
Diethylethanolamine	0.141			
α -Methylstyrene	0.278			
Styrene oxide	0.301			
Acetophenone	0.595			
2-Methylpyridine	0.157			
2-Methyl-5-ethylpyridine	0.109			
Morpholine	0.135			
N-Ethylmorpholine	0.333			

Tableau (III.1) : Valeurs de L'ODT et les valeurs des interactions binaires des composés organiques.

III.3-Sommaire statistique et teste de modélisation :

Dans cette partie, et afin d'illustrer la fiabilité de la méthode développée, nous allons représenter quelques sommaires statistiques des résultats obtenues à partir la régression pour la propriété étudiée, ainsi que des comparaisons entre la récente méthode et quelques méthodes de contributions ou d'interactions des groupes.

❖ Constantes de corrélations :

Coefficient d'ajustement	
R^2	71.1

Tableaux (III.2) : Coefficient d'ajustement (corrélation) de la propriété étudiée.

III.4 Comparaison avec les autres méthodes :

Afin d'illustrer la fiabilité de la méthode développée par rapport les autres méthodes, on a fait une comparaison entre cette dernière et la méthode de Cometto-Muniz et Cain, de Hellman and Small, Abraham 1993, Alarie, Nielsen, et al et Abraham et al .2004 [5]. Cette comparaison a été effectuée sur des facteurs sont les valeurs de l'erreur, et la distinction entre les isomères.

III .4.1 Comparaison les valeurs de R^2 , SD, et F :

Méthodes	Nombre de composés N	R^2	SD	F
Cometto-Muniz et Cain.2002	50	0.773	0.579	28.7
Abraham et al. 2004	60	0.85	0.598	44.0
Alarie, Nielsen, et al 1998	193	0.748	0.830	59.8
Hellman and Small 1974	353	0.759	0.818	70.7
Abraham 1993	353	0.701	0.912	52.6
La méthode proposée	267	0.711	0.158	2.500

Tableau (III. 3) : Comparaison selon les valeurs de R^2 , SD et F

En plus, s'ajoutent aux contributions d'interactions les constantes de corrélations. Les valeurs de ces dernières pour la propriété, est listée au tableau ci-dessous.

Propriété / constantes	ODT (ppm)
Pr ₁	0.069
Pr ₂	0.606
Pr ₃	0.233

Tableau (III.4) : Valeurs des constantes de corrélations de la propriété étudiée par la nouvelle méthode.

L'analyse des tableaux des constantes de corrélations et de la comparaison selon les valeurs de R², SD et F, nous permet de tirer les points suivants :

- Les coefficients d'ajustement de la prédiction pour la propriété, est en approche de 1. Le R² (coefficient de détermination) donne des pourcentages s'étendant de 70% (Abraham 1993) obtenue par la régression des valeurs de 353 composés jusqu'à 85% (Abraham et al.2004) par 60 composés, la chose qui montre que les modèles de la méthode proposée présente une précision élevée.
- Le modèle de la méthode (Abraham et al.2004) le plus précise, alors que le modèle de la méthode (Abraham 1993) est le moins précise.

Enfin, la précision du modèle de prédiction de la méthode proposé, obtenu par la régression des données des valeurs de 267 composés est égale à 71,1%, Cette valeur est généralement bien.

III.4.2 Comparaison selon la distinction entre les isomères :

Propriété	Composé	Valeur Expérimentale	Nouvelle méthode
ODT (ppm)	3-methyl heptane	1.192	0.937
	4-methyl heptane	1.259	0.973

Tableau (III.5) : Comparaison selon la distinction entre les isomères.

Le tableau (III.5), montre que :

- La méthode proposée peut distinguer entre les isomères. Depuis qu'on observe que les exemples de 3-méthylheptane et 4-méthylheptane sont des isomères. (Une méthode des interactions binaires), on trouve aussi les mêmes interactions dans les deux composés, on obtient donc les mêmes valeurs estimées de la propriété.

III.5 Exemples applications :

Voici des exemples d'application de calcul pour la méthode proposée, concernant deux composés de deux familles chimiques :

- Ethanol (alcohols)
- Hexanal (aldehyde)

On prendre comme propriété :

☞ Le seuil de l'odeur (régression linéaire et régression non linéaire)

Composé	Valeurs Exp.	Interactions	Fréquence	Contribution
Ethanol	0.447	CH3-CH2 CH2- OH	1 1	0.248 -0.205 $\sum N_i c_i =$ 0.043
Hexanal	0.206	CH2-CH3 CH2-CH2 CH2-COH	1 3 1	0.248 -0,02 -0.386 $\sum N_i c_i =$ -0.198

Tableau (III.6) : Exemples applications de l'ODT (régression linéaire)

$$\text{ODT} = a + \sum N_i c_i \quad (\text{III.1})$$

$$\begin{aligned} \text{ODT}_1 &= 0.403 + 0.043 \\ &= \mathbf{0.446} \text{ ppm} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{ODT}_2 &= 0.403 - 0.198 \\ &= \mathbf{0.205} \text{ ppm} \end{aligned}$$

Composé	Valeurs Exp.	Interactions	Fréquence	Contribution
Ethanol	0.386	CH3-CH2 CH2- OH	1 1	0.248 -0.205 $\sum N_i c_i =$ 0.043
Hexanal	0.203	CH2-CH3 CH2-CH2 CH2-COH	1 3 1	0.248 -0,02 -0.386 $\sum N_i c_i =$ -0.198

Tableau (III.7) : Exemples applications de l'ODT (régression non linéaire)

$$\text{ODT} = pr_1 + pr_2 * (a + \sum N_i c_i) + pr_3 * (a + \sum N_i c_i)^2$$

$$\text{ODT}_1 = 0.069 + 0.606 * 0,446 + 0.233 * (0,446)^2$$

$$= \mathbf{0.385 \text{ ppm}}$$

$$\text{ODT}_2 = 0.069 + 0.606 * 0,205 + 0.233 * (0,205)^2$$

$$= \mathbf{0.203 \text{ ppm}}$$

III.6 Graphes :

Une autre manière de représentation des données, est la représentation graphique. Dans cette partie nous avons basés sur trois types des graphes. Ces trois graphiques permettent de visualiser respectivement la distance entre les prédictions et les observations (valeurs expérimentales; pour un modèle idéal, les points seraient tous sur la bissectrice), les résidus normalisés sous la forme d'un diagramme en bâtons de la collection active, et les résidus normalisés sous la forme d'un diagramme en bâtons de la collection de validation (une partie des données sélectionnées aléatoirement ou non pour valider le modèle). Ces deux derniers graphiques permet de rapidement voir si un nombre anormal de données sort de l'intervalle $[-2, 2]$ sachant que ce dernier, sous hypothèse de normalité, doit contenir environ 95% des données. Il est à noter que la collection des données de validation est choisie aléatoirement.

III.6.1 Graphes de l'ODT :

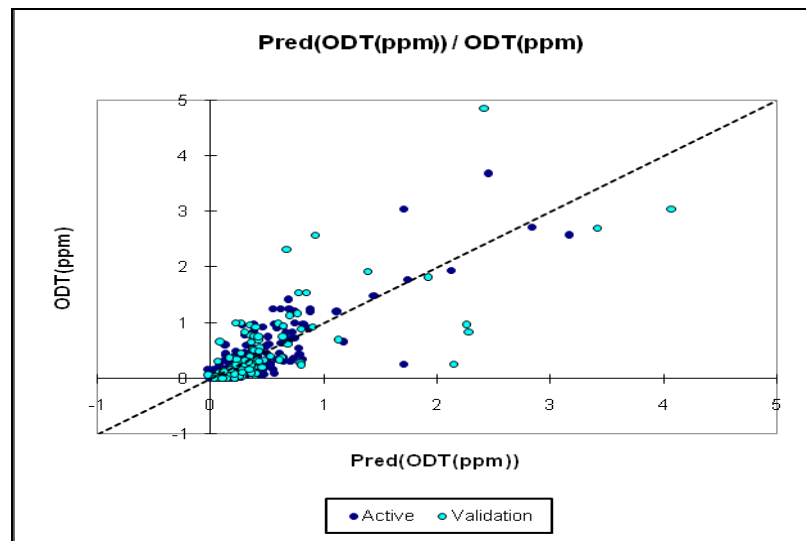


Figure (III.2) : Distance entre les prédictions et les observations de l'ODT.

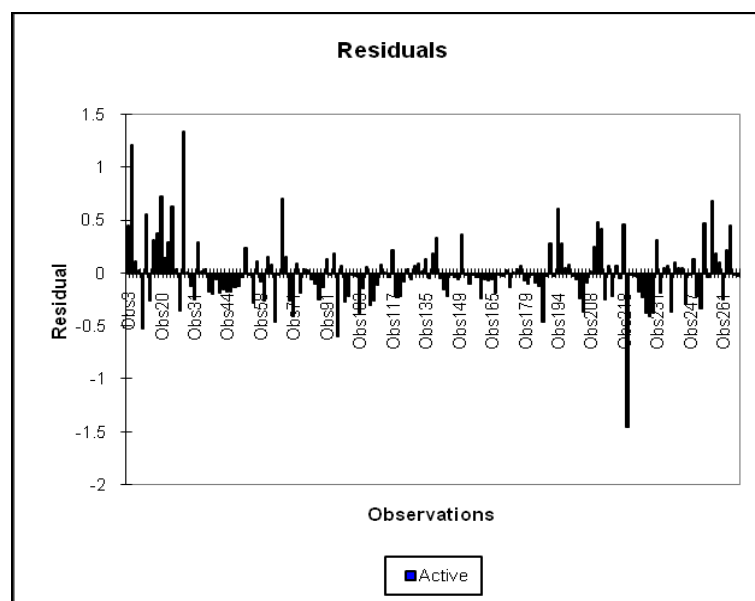


Figure (III.3) : Résidus normalisés sous la forme d'un diagramme en bâtons de la collection active de l'ODT

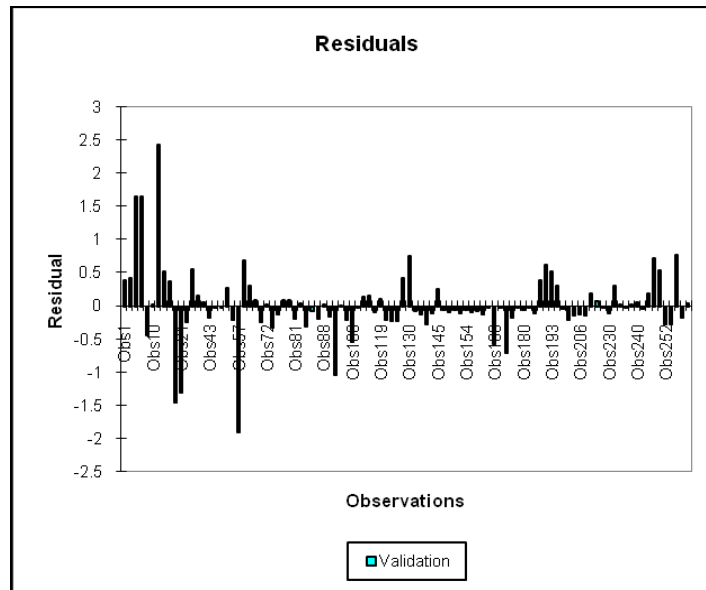


Figure (III.4) : Résidus normalisés sous la forme d'un diagramme en bâtons de la collection de validation de l'ODT

L'analyse des résultats graphiques montre que :

1. La différence entre les prédictions et les valeurs expérimentales comme le représentent les graphes de distance et les graphes des diagrammes en bâtons (soit pour les points actifs ou pour les points de validation), n'est pas grande pour la propriété, à l'exception de quelques points qui représentent une divergence de la bissectrice. On peut dire en générale, que la plupart des points prédits s'approchent de l'idéalité, c'est-à-dire s'approchent de confondre avec les valeurs expérimentales sur la bissectrice.
2. D'autre côté, la comparaison entre les graphes de distance (de point de vue bande qui comprise les points d'intersections et de point de vue nombre des valeurs divergent) de la propriété de l'ODT.

III.7-Conclusion :

Dans ce chapitre on a essayé de présenter les résultats des régressions des valeurs expérimentales de propriété étudiées aux modèles proposés; obtenus par la nouvelle méthode sous deux formes, sont les sommaires statistiques et les graphiques, et de comparer ces résultats avec d'autre méthodes. Après l'analyse de ces résultats on peut tire les conclusions suivantes :

- ❖ La méthode proposée a donné des résultats généralement bien pour la propriété de l'ODT.
- ❖ Elle a aussi réalisé le but demandé, qui est la distinction entre les isomères de quelques composés organiques.

Conclusion Générale

Conclusion

Dans ce travail de fin d'étude, on a proposé une nouvelle technique d'estimation de la propriété (le seuil de l'odeur) basée sur les interactions binaires (interactions entre deux groupes simples et voisins). Ce principe des interactions est similaire à celui de Marerro et Pardillo [6], à l'exception que ce dernier basé sur des interactions binaires seulement. Le nombre d'interactions binaires utilisé est égal à 264, ce nombre ne représente pas toutes les possibilités des interactions binaires, mais il couvre seulement la collection des 267 composés choisis pour former la base de données.

Pour avoir les résultats de cette estimation on a utilisé le logiciel XLSTAT, l'utilisation de ce logiciel est simple, facile ainsi les étapes de régression ne prend pas beaucoup de temps.

D'autre côté, et afin d'illustrer la fiabilité des modèles utilisés, en comparaison avec les autres méthodes de prédiction, on a utilisé deux types des résultats, sont les sommaires statistiques et les graphiques. Donc d'après ce travail, on peut tire les conclusions suivantes :

- ☞ La fragmentation des molécules des composés organiques selon le principe des interactions binaires, rend le nombre de ces interactions plus grande si on utilise en plus des composés organiques, donc complique les fragmentations et rend le temps de réalisation grande.
- ☞ La base de données utilisée ne couvre pas toutes les familles chimiques.
- ☞ La technique utilisée pour développer cette méthode, a l'avantage de distinguer entre les différents isomères des composés organiques, au contraire des autres méthodes comme la méthode de Marerro et Pardillo [6].
- ☞ La régression a donné des valeurs des erreurs généralement bien, avec un pourcentage de déviation moyennement acceptable.

☞ Quand le nombre de composés qui constitue la base de donnée est grand par rapport au nombre des interactions, la régression sera plus précise.

Recommandations :

A la fin, et pour les travaux du futur, on propose les recommandations suivantes :

- ✓ Elargir la base de données pour couvrir toutes les familles chimiques, et la plupart des composés organiques.

- ✓ Chercher une méthode pour réduire le nombre des interactions binaires, si on décide d'élargir, en plus, la base des données.

- ✓ Chercher une méthode fiable et en même temps ne consomme pas beaucoup de temps.

A pink rectangular frame with rounded corners and a black outline, centered on the page. The word "Bibliographies" is written in a bold, black, serif font inside the frame.

Bibliographies



Bibliographies

- [1]] [http //www. Sc-hc-gc.ca.pdf](http://www.Sc-hc-gc.ca.pdf) (2009).
- [2] [http :// membres.lycos.fr/carue/nuisances.htm](http://membres.lycos.fr/carue/nuisances.htm). (2005).
- [3] XLSTAT <http://WWW.XLSTAT.com/Fr/hone> (1995-2013).
- [4] [http :// www.er.uqam.ca/nobel/k15360/sens chimiques.pdf](http://www.er.uqam.ca/nobel/k15360/sens_chimiques.pdf) (2004).
- [5] Michael H. Abraham, Ricardo Sànchez-Moreno, J. Enrique Cometto-Mun~ iz and William S. Cain" An Algorithm for 353 Odor Detection Thresholds in Humans " (2012). *Chem. Senses* 37: 207–218.
- [6] Marrero, M. J. and Pardillo, F. E. "Estimation of Pure Compounds Properties Using Group-Interaction Contribution". (1999). *AIChEJ.* , 45, 615-621.
- [7] Model mathématique [http //WWW.answers.com/ economic.order.quantity](http://WWW.answers.com/economic.order.quantity)
- [8] «Soud Thoraia et Soulaeh ^{Med} Meriem» Mémoire de fin d'étude en vue l'obtention du diplôme d'ingénieur d'état (CH.I.) (Une nouvelle méthode de contribution de groupes pour la prédiction de quelques propriétés physiques des composés organiques) Université d'Ouargla 2006-2007

Annexes

Annexe A : Des graphes standards des coefficients de l'ODT [8].

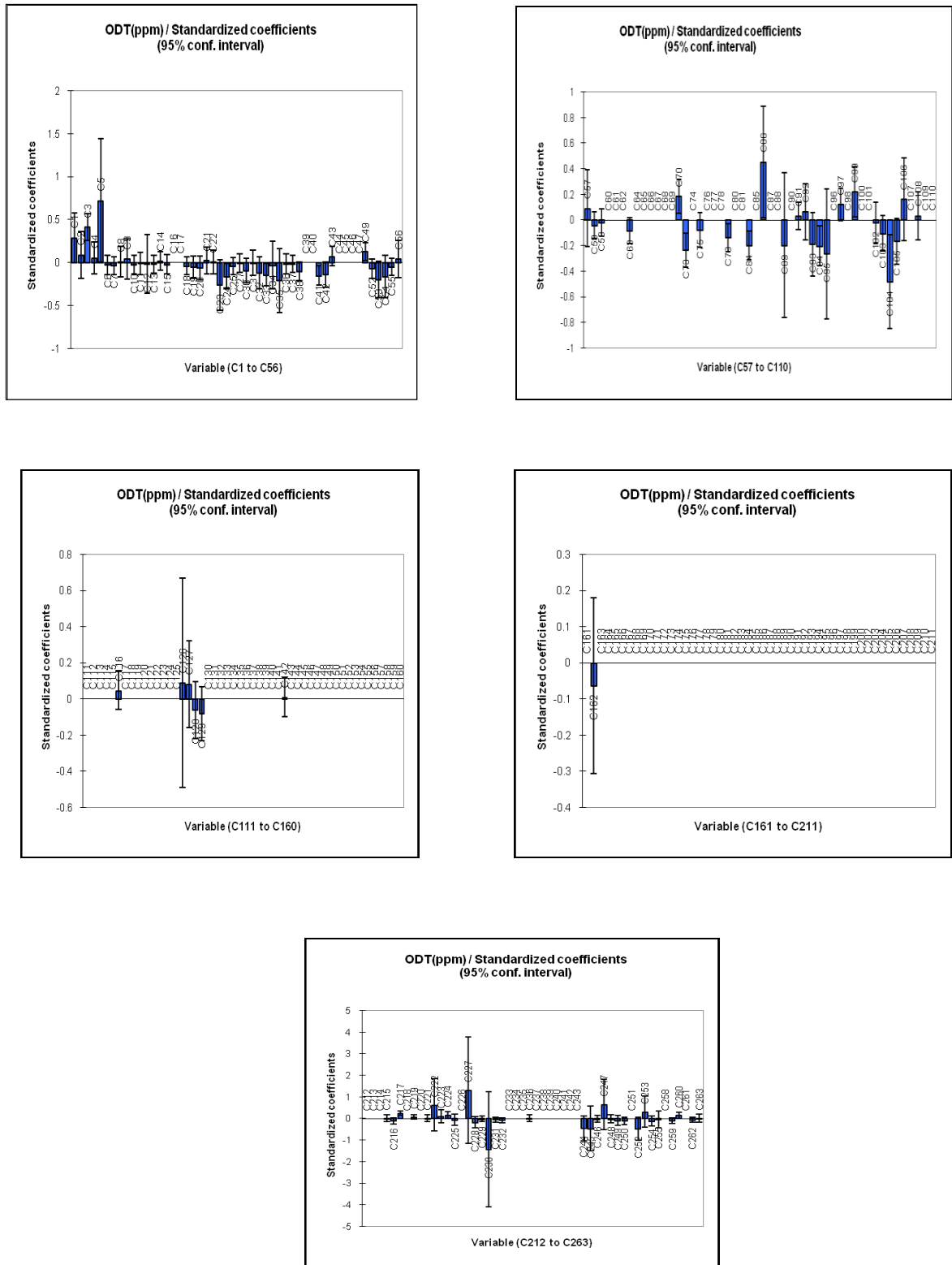


Figure 1 : Schémas représente les coefficients normalisés

Annexe B : Graphes de la propriété estimée l'ODT.

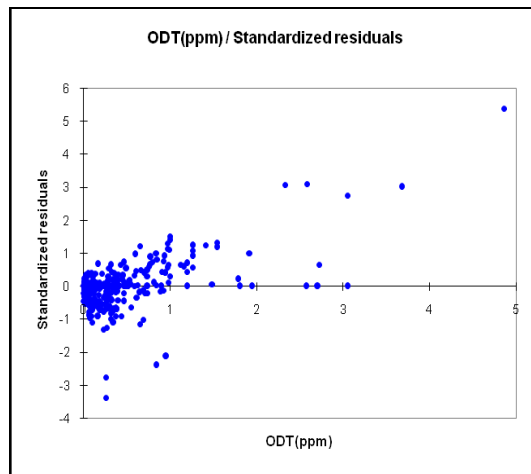


Figure 2 : Schémas représente les résidus normalisés de l'ODT

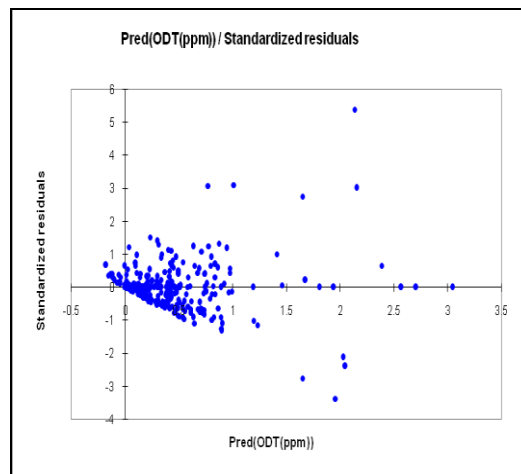


Figure 3 : Schémas représente les résidus normalisés de Pred (l'ODT)

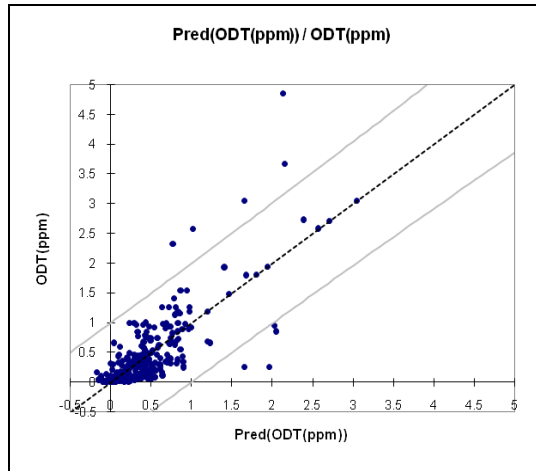


Figure 4 : Schémas représente la distance entre les prédictions et observations de l'ODT

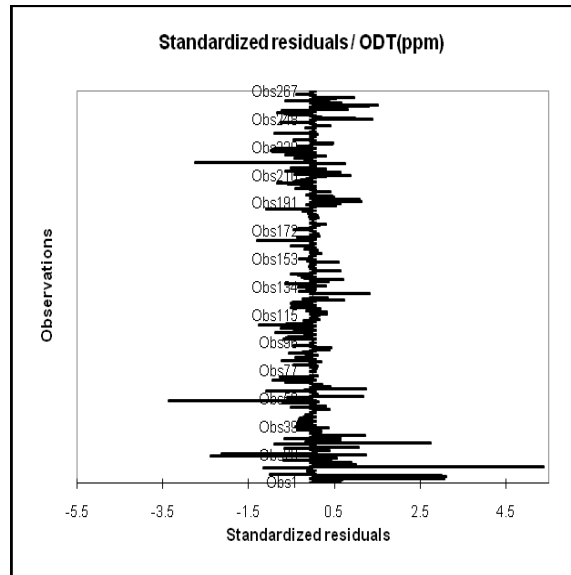


Figure 5 : Schémas représente les résidus normalisés

الملخص :

إن حساب قيمة عتبة الرائحة للمركبات العضوية يلعب دورا كبيرا في مجال دراسة الأنظمة الكيميائية، البيوكيميائية و البيئية. هذا الدور المهم جعلنا نبحث في هذا المجال حيث قمنا بإيجاد طريقة جديدة لحساب بعض عتبات الرائحة المتعلقة بالمركبات العضوية الخامة عن طريق إسهام المجموعات الكيميائية باستعمال طريقة تداخل بين المجموعات المساهمة، حيث اقترحنا التداخل بين مجموعتين بسيطتين لتمكيننا من التفريق بين المتماكبات. و للوصول إلى غايتنا استخدمنا برمجية لحساب قيمة عتبة الرائحة.

كلمات مفتاحية: قيمة عتبة الرائحة، انحدار، تداخلات ثنائية، جزيئات ذات رائحة.

Résumé :

Le calcul des valeurs de seuil de l'odeur des composés organiques, joue un grand rôle dans le domaine de conception et de simulation des systèmes chimique, biochimiques et d'environnementaux. Cet important rôle, nous font recherchant dans ce domaine, nous trouvons une nouvelle technique pour calculer l'odeur de seuil des substances pures de quelques produits organiques. C'est la méthode des contributions des groupes. Il a basé sur les interactions entre deux groupes simples; l'objectif de cette fragmentation est de distinguer entre les isomères. Pour obtenir les résultats, on a utilisé le logiciel de régression XLSTAT de pour modéliser les valeurs de seuil de l'odeur étudié.

Mots clés : valeurs de seuil de l'odeur, régression, interactions binaires, molécules odorantes.

Abstract:

Calculate of threshold odor value of the organic compounds, play a big role in the field of design and simulation of chemical, biochemical and environment systems. This importing role, make us researching in this domain, we finds a new technique to calculate threshold odor of some organics pure substances. It is a group's contributions method. It based on the interactions between two simple groups; the objective of this fragmentation is to distinguish between the isomers. For gotten the results, we use the XLSTAT software of regression to modulate studied threshold odor value.

Key words: odor threshold value, régression, second interactions, molecules odorants.