

# DSEST *RENCONTRES SCIENTIFIQUES*

Département de santé environnementale et santé au travail  
École de santé publique

**Le jeudi 8 avril 2021**  
**De 12h30 à 13h00**  
**Via ZOOM**

## **Modélisation de la relation quantitative structure activité (QSAR) du passage placentaire des contaminants environnementaux**

**Conférencière : Laura Lévêque, étudiant(e) à la maîtrise avec mémoire**  
**Directeur académique : Marc-André Verner, professeur agrégé**  
**Pavillon Marguerite D'Youville, bureau 4105**

La diversité croissante dans l'environnement de composés potentiellement fœtotoxiques est une préoccupation de santé publique. L'objectif de ce travail était de contribuer à l'élaboration de méthodes rapides et efficaces pour en évaluer l'exposition prénatale. La modélisation de la relation quantitative structure à activité (QSAR) est apparue comme une méthode de choix dans l'élaboration d'un modèle prédictif pour le passage placentaire des contaminants. Les ratios fœto-maternels de concentrations sanguines pour 105 contaminants ont été compilés à partir de la littérature, et 214 descripteurs moléculaires ont été générés. Dix modèles prédictifs ont été élaborés à l'aide du logiciel Molecular Operating Environment (MOE) et des langages de programmation Python et R. Les jeux de données d'entraînement et de test ont été utilisés, respectivement, pour élaborer et valider les modèles. L'outil Applicability Domain v1.0 a été utilisé pour déterminer le domaine d'applicabilité (DA). Les modèles élaborés avec les méthodes de régression des moindres carrés partiels dans MOE et SuperLearner dans R, ont montré les meilleures valeurs de précision et de prédictivité avec des coefficients de détermination internes ( $R^2$ ) de 0,88 et 0,82, des  $R^2$  de validation croisée de 0,72 et 0,57, et des  $R^2$  externes de 0,73 et 0,74, respectivement. Le recouvrement de toutes les molécules du jeu de test par le domaine d'applicabilité a permis de démontrer la fiabilité et la pertinence des prédictions des modèles. Les résultats obtenus démontrent que les modèles élaborés peuvent aider à quantifier l'exposition fœtale aux composés toxiques de l'environnement à partir des concentrations sanguines de la mère.