



UNIVERSITÉ D'ARTOIS

Avis de Soutenance

Monsieur Gökhan TAHIL

Informatique et applications

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

Contributions à la Chémoinformatique : Plongements de Molécules Stereo2vec et Base de Données Ouverte sur les Cyclodextrines

dirigés par Monsieur Daniel LE BERRE et Monsieur Sébastien TILLOY

Soutenance prévue le **mardi 17 décembre 2024** à 10h00

Lieu : Faculté des sciences Jean Perrin Rue Jean Souvraz

Salle : des Thèses

Composition du jury proposé

M. Daniel LE BERRE	Université d'Artois	Directeur de thèse
M. Sébastien TILLOY	Université d'Artois	Co-directeur de thèse
Mme Florence DJÉDAÏNI-PILARD	Université Picardie-Jules Verne	Examinatrice
M. Philippe VISMARA	Montpellier SupAgro	Examineur
M. Driss CHERQAOUÏ	Cadi Ayyad University	Rapporteur
Mme Violaine ANTOINE	Université Clermont Auvergne	Rapporteure
M. Fabien DELORME	CNRS	Invité
M. Adlane SAYEDE	Université d'Artois	Invité

Résumé :

L'apprentissage automatique est utilisé dans un nombre croissant de domaines. Dans cette thèse, nous nous intéressons à une tâche particulière en chimie, à savoir prédire la constante d'association entre une cyclodextrine et un invité. Pour ce faire, nous avons d'abord collecté les données disponibles dans la littérature et les avons traitées. L'un des défis consistait à représenter les molécules d'une manière unique et non ambiguë : nous avons utilisé des SMILES isomériques kekulisés à cette fin. Le jeu de données résultant, OpenCycloDB, a été mis à la disposition de la communauté scientifique. Nous avons remarqué que certains stéréoisomères pouvaient partager les mêmes plongements de molécules en utilisant les approches habituelles. C'est pourquoi nous avons proposé une famille de plongements de molécules appelée Stereo2vec pour garantir que des molécules différentes sont associées à des plongements de molécules différents. Les approches proposées ont été évaluées sur notre tâche de prédiction cible.