**Rapport Deep Learning**

Julie GORSE BOGOIN

M2 BIB 2019-2020

INTRODUCTION

1. **Le Deep learning (apprentissage automatisé)**

Le deep learning une classe d’algorithmes d’apprentissage automatique. Dans le cadre d’un apprentissage supervisé, l’objectif est de classer des données en fonction de caractéristiques choisies et communes. Les réseaux de neurones permettent à l’information de traverser plusieurs couches afin que la prédiction soit la plus juste possible. Pour cela le réseau doit s’entrainer sur un jeu dit d’apprentissage composé d’un échantillon de données dont on connait la classe. Si le modèle est correctement paramétré, il présentera des capacités de généralisation sur des données qu’il n’a jamais rencontrées. Décrire réseau de neurones convolutionnel.

1. **L’outils DeepDrug3D**

Dans leur papier publié en février 2019 dans Computational Biology, *Brylinski et al.* décrivent un outils de détection et de classification de sites de fixation de poches protéiques utilisant un réseau de neurones convolutionel. Le challenge dans cette problématique est de développer un modèle qui permettra une détection fine de molécules ayant des structures biochimiques proches. Les organisations structurales des différentes poches testées ont été représentés par les auteurs dans des voxels (pixels 3D en forme de cube donc). Ces voxels sont les données d’entrée du réseau de neurones et ont été fourni pour ce projet. L’implémentation actuelle de DeepDrung3D est entrainée pour détecter et classifier des sites de fixation de nucléotides et d’hemes mais il a aussi la capacité de généraliser sur des sites de fixation de stéroïdes et de peptidases.

METHODES

RESULTATS