



Polytech Nantes

Spécialité : Informatique

Rapport Hebdomadaire: Fouille de données olfactives

Encadrants :

Mr. Fabrice GUILLET

Rédigé par :

Colin TREVE

Marwa TABIB

Date de Remise : 25/10/2024

0.1 Introduction

L'homme perçoit son environnement à travers ses différents sens, qui ont été largement étudiés pour comprendre leur fonctionnement et leur effet sur notre comportement. Les sens sont généralement classés par ordre d'importance, et l'odorat est souvent considéré comme l'un des moins importants. Cependant, ce sens joue un rôle crucial dans notre survie, car il nous permet, par exemple, de détecter une fuite de gaz ou d'apprécier les aliments, stimulant ainsi notre appétit.

Des chercheurs s'intéressent donc à ce sens afin de mieux comprendre comment il fonctionne et comment une odeur est attribuée à une molécule. Pour ce faire, des protocoles spécifiques ont été développés pour identifier le rôle des molécules dans l'odeur perçue. Les êtres humains (*Homo sapiens sapiens*) possèdent des récepteurs olfactifs qui analysent la forme et la structure des molécules odorantes, transmettant ensuite cette information aux neurones par l'intermédiaire de neurotransmetteurs. Ce processus complexe permet à notre cerveau d'interpréter une multitude d'odeurs, influençant ainsi nos émotions, nos souvenirs et même nos comportements.

Ainsi, l'étude des molécules et de leur impact sur l'odorat revêt une importance significative, non seulement pour la science fondamentale, mais aussi pour des applications pratiques dans des domaines tels que la gastronomie, la parfumerie et la sécurité.

0.2 Problématique

Comment peut-on exploiter la structure graphique des molécules pour identifier des motifs récurrents qui correspondent aux caractéristiques olfactives? En d'autres termes, Pourquoi les molécules émettent les odeurs et quelles sont les parties des graphes qui le font?

0.3 Problèmes

La complexité de la relation entre la structure moléculaire et l'odeur constitue un défi majeur dans notre étude. Cette complexité se manifeste à plusieurs niveaux, notamment dans la représentation même des molécules sous forme de graphes. Bien que nous puissions nous inspirer des réseaux de neurones convolutifs (CNN) pour développer notre approche avec les réseaux de neurones sur graphes (GNN), la transposition n'est pas directe et nécessite des adaptations significatives.

Un autre aspect critique réside dans l'identification et l'extraction des sous-graphes significatifs au sein des structures moléculaires. Ces sous-graphes pourraient représenter les motifs structuraux responsables des caractéristiques olfactives, mais leur détection et leur validation restent des tâches complexes. Les modèles GNN doivent être spécifiquement adaptés pour capturer ces caractéristiques olfactives, ce qui requiert une compréhension approfondie tant des aspects chimiques que des mécanismes d'apprentissage automatique.

Un phénomène particulièrement intéressant et complexe survient lors de l'intersection de deux molécules ou plus : l'odeur résultante peut différer significativement du simple mélange des odeurs individuelles. Cette non-linéarité dans la perception olfactive ajoute une couche supplémentaire de complexité à notre analyse et nécessite une approche sophistiquée dans la modélisation de ces interactions.

0.4 Bibliographie

<https://images.cnrs.fr/video/2819>