

# AVIS DE SOUTENANCE DE THÈSE

DOCTORAT (Arrêté du 26 août 2022 modifiant l'arrêté du 25 mai 2016)

## Monsieur Jules LEGUY

candidat au diplôme de Doctorat de l'Université d'Angers, est autorisé à soutenir publiquement sa thèse

**le 09/12/2022 à 14h00**

**Faculté des Sciences**

**AMPHI L001**

**2, boulevard Lavoisier**

**49045 ANGERS Cedex 01**

sur le sujet suivant :

### Recherche combinatoire guidée par apprentissage artificiel en chimie moléculaire

Directeur de thèse : **Madame Béatrice DUVAL**

Composition du jury :

Monsieur Thomas CAUCHY, Maître de Conférences Université d'Angers, Co-encadrant

Monsieur Jean-Claude CRIVELLO, Chargé de recherche HDR Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est, Rapporteur

Monsieur Benoît DA MOTA, Maître de Conférences Université d'Angers, Co-encadrant

Madame Béatrice DUVAL, Professeur des Universités émérite Université d'Angers, Directeur de thèse

Madame Laetitia JOURDAN, Professeur des Universités Université de Lille, Rapporteur

Monsieur Gaël VAROQUAUX, Directeur de Recherche INRIA Palaiseau, Examineur

### Résumé de la thèse

La recherche de molécules satisfaisant des propriétés moléculaires cibles est un enjeu majeur en chimie moléculaire. Dans le cadre de cette thèse, nous cherchons à aborder en particulier des problèmes liés au domaine de la chimie des matériaux moléculaires organiques. Ces problèmes dépendent de fonctions d'évaluation des propriétés cibles dont le calcul est coûteux. Dans nos travaux, nous considérons la recherche de molécules satisfaisant des propriétés cibles comme un problème d'optimisation combinatoire de graphes moléculaires. Nous proposons un algorithme évolutionnaire générique et interprétable pour l'optimisation de propriétés moléculaires, et nous montrons qu'il permet d'optimiser avec succès de nombreuses propriétés. Nous proposons une approche par contrainte pour favoriser le réalisme des solutions générées. Nous définissons une méthode d'optimisation efficace pour la maximisation de la diversité moléculaire, basée sur notre algorithme évolutionnaire. Cela nous permet de générer un jeu de molécules très divers. Nous montrons également que l'objectif de diversité peut apporter un gain d'efficacité pour l'optimisation d'une propriété moléculaire cible. Finalement, nous proposons une approche d'optimisation boîte-noire basée sur un modèle de substitution qui est définie pour l'optimisation de propriétés coûteuses, et nous en menons une étude approfondie. Le modèle de substitution est un modèle d'apprentissage artificiel ayant pour objectif de prédire à faible coût les valeurs des propriétés cibles.