

Avis de soutenance de thèse

Vendredi 24 juin 2016 à 11 heures

À l'université Bretagne Sud – Faculté des sciences et sciences de l'ingénieur

Amphithéâtre Yves Coppens à Vannes

Monsieur Jonathan VILLAIN

En vue de l'obtention du grade de doctorat en « Mathématiques »

présentera ses travaux intitulés :

« Estimation de l'écotoxicité de substances chimiques par des méthodes à noyaux »

Dont voici le résumé :

Dans le domaine de la chimie et plus particulièrement en chimio-informatique, les modèles QSAR (pour Quantitative Structure Activity Relationship) sont de plus en plus étudiés. Ils permettent d'avoir une estimation *in silico* des propriétés des composés chimiques notamment des propriétés éco toxicologiques.

Ces modèles ne sont théoriquement valables que pour une classe de composés (domaine de validité) et sont sensibles à la présence de valeurs atypiques.

La thèse s'est focalisée sur la construction de modèles globaux robustes (intégrant un maximum de composés) permettant de prédire l'écotoxicité des composés chimiques sur une algue *P. Subcapitata* et de déterminer un domaine de validité dans le but de déduire la capacité de prédiction d'un modèle pour une molécule. Ces modèles statistiques robustes sont basés sur une approche quantile en régression linéaire et en régression Support Vector Machine.

Abstract:

In chemistry and more particularly in chemoinformatics, QSAR models (Quantitative Structure Activity Relationship) are increasingly studied. They provide an *in silico* estimation of the properties of chemical compounds including ecotoxicological properties.

These models are theoretically valid only for a class of compounds (validity domain) and are sensitive to the presence of outliers.

This PhD thesis is focused on the construction of robust global models (including a maximum of compounds) to predict ecotoxicity of chemical compounds on algae *P. subcapitata* and to determine a validity domain in order to deduce the capacity of a model to predict the toxicity of a compound. These robust statistical models are based on quantile approach in linear regression and regression Support Vector Machine.

Membres du jury :

Pr Avner BAR HEN	Université Paris Descartes
Pr Anne-Claude CAMPROUX	Université Paris-Diderot
Dr Jean-François PETIOT, Maître de Conférences	Université de Bretagne-Sud
Pr Ernest FOKOUÉ	Rochester Institute of Technology - USA
Dr Bertrand CUISSART, Maître de Conférences	Université Caen Basse-Normandie
Pr Ronan BUREAU	Centre d'Étude et de Recherche sur le Médicament de Normandie (CERMN) – Caen
Pr Gilles DURRIEU	Université de Bretagne-Sud

Les travaux ont été encadrés par messieurs Gilles DURRIEU et Ronan BUREAU