

Conception de Molécules

Ines Alaya et Tristan Cazenave

Avril à Septembre 2025

Stage au LAMSADE

L'objectif de ce stage est d'utiliser l'algorithme d'optimisation par colonies d'abeilles pour la conception de molécules.

Titre du stage :

Optimisation par colonies d'abeilles pour la conception de molécules

Contexte et Objectif :

La conception de molécules est un défi majeur dans les domaines de la chimie et des sciences de la vie, impliquant la création de structures moléculaires répondant à des critères multiples. Ce problème se caractérise par plusieurs contraintes:

- Exploration de l'espace moléculaire: L'espace chimique potentiel est immense, avec des milliards de combinaisons possibles. Explorer cet espace efficacement est nécessaire pour identifier des molécules prometteuses.
- Satisfaction de critères multiples: Les molécules doivent répondre simultanément à plusieurs critères, comme la taille, la solubilité, la polarité, la toxicité, et une affinité pour une cible biologique.
- Faisabilité chimique: Les molécules doivent être synthétisables en laboratoire, ajoutant une contrainte de faisabilité.
- Optimisation de la fonction "fitness": Pour évaluer chaque molécule, il est crucial de définir une fonction de fitness permettant de guider un algorithme vers des solutions viables.

Les métaheuristiques bio-inspirées, comme l'optimisation par colonies d'abeilles (ABC) [3, 2], offrent une solution puissante pour relever ce défi. Inspiré du comportement de recherche de nourriture des abeilles, l'ABC est particulièrement efficace pour explorer de grands espaces de solutions, ce qui en fait une approche prometteuse pour la conception de molécules. L'objectif du stage est d'exploiter

cette approche pour la conception de séquences d'ARN [1]. Les ARN peuvent se replier en structures complexes qui leur permettent d'interagir spécifiquement avec d'autres molécules dans les cellules, ouvrant la voie à des applications thérapeutiques (par exemple régulation génique, ARN thérapeutiques) et technologiques (capteurs, outils diagnostiques). Le stagiaire appliquera l'algorithme ABC pour explorer des séquences d'ARN répondant à des critères spécifiques.

Description des tâches:

1. Recherche et analyse bibliographique:
 - Étudier les méthodes actuelles de conception de molécules par optimisation et l'application d'algorithmes bio-inspirés.
 - Déterminer les critères essentiels pour la conception de séquences d'ARN
2. Implémentation de l'algorithme ABC:
 - Développer un algorithme d'optimisation par colonies d'abeilles pour le problème de conception de séquences d'ARN.
 - Concevoir une fonction de fitness prenant en compte plusieurs critères moléculaires. Cette fonction va être utilisée par l'algorithme pour guider les abeilles dans leur recherche de solutions
3. Génération et évaluation des solutions moléculaires

Responsable et Contact:

Pour plus d'informations, contactez le Professeur Tristan Cazenave à l'adresse mail suivante: tristan.cazenave@lamsade.dauphine.fr

References

- [1] Tristan Cazenave and Hamza Touzani. Monte carlo inverse RNA folding. *RNA Design, Methods in Molecular Biology*, 2024.
- [2] Dervis Karaboga and Bahriye Akay. A comparative study of artificial bee colony algorithm. *Applied Mathematics and Computation*, 214(1):108–132, 2009.
- [3] Dervis Karaboga and Bahriye Basturk. Artificial bee colony (abc) optimization algorithm for solving constrained optimization problems. In Patricia Melin, Oscar Castillo, Luis T. Aguilar, Janusz Kacprzyk, and Witold Pedrycz, editors, *Foundations of Fuzzy Logic and Soft Computing*, pages 789–798, Berlin, Heidelberg, 2007. Springer Berlin Heidelberg.