

# Vers la découverte de modèles exceptionnels locaux : des règles descriptives liant les molécules à leurs odeurs

Guillaume Bosc\*, Mehdi Kaytoue\*, Marc Plantevit\*\*\*,  
Fabien De Marchi\*\*\*, Moustafa Bensafi\*\*, Jean-François Boulicaut\*

\*Université de Lyon, CNRS, INSA-Lyon, LIRIS UMR5205, F-69621, France

\*\*Centre National de la Recherche Scientifique UMR5292, INSERM U1028,  
CRNL, Université Claude Bernard Lyon 1 Lyon, France

\*\*\*Université de Lyon, CNRS, Université Lyon 1 LIRIS UMR5205, F-69622, France

Contact : [guillaume.bosc@insa-lyon.fr](mailto:guillaume.bosc@insa-lyon.fr)

**Résumé.** Issue d'un phénomène complexe partant d'une molécule odorante jusqu'à la perception dans le cerveau, l'olfaction reste le sens le plus difficile à appréhender par les neuroscientifiques. L'enjeu principal est d'établir des règles sur les propriétés physicochimiques des molécules (poids, nombre d'atomes, etc.) afin de caractériser spécifiquement un sous-ensemble de qualités olfactives (fruité, boisé, etc.). On peut trouver de telles règles descriptives grâce à la découverte de sous-groupes ("subgroup discovery"). Cependant les méthodes existantes permettent de caractériser soit une seule qualité olfactive ; soit toutes les qualités olfactives à la fois ("exceptional model mining") mais pas un sous-ensemble. Nous proposons alors une approche de découverte de sous-groupes caractéristiques de seulement certains labels, par une nouvelle technique d'énumération, issue de la fouille de redescriptions. Nous avons expérimenté notre méthode sur une base de données d'olfaction fournie par des neuroscientifiques et pu exhiber des premiers sous-groupes intelligibles et réalistes.

## 1 Introduction

L'olfaction, ou la capacité de percevoir des odeurs, est le résultat d'un phénomène complexe : une molécule s'associe à un récepteur de la cavité nasale, et provoque l'émission d'un signal transmis au cerveau qui fait ressentir l'odeur associée [Sezille et Bensafi (2013)–Meierhenrich et al. (2005)]. Si les phénomènes qui caractérisent les sens de l'ouïe et de la vue sont bien connus, la perception olfactive n'est, encore aujourd'hui, toujours pas comprise dans sa globalité. Cependant, on dispose de nombreux atlas (comme celui d'Arctander (1969)) qui renseignent les qualités perçues par l'humain pour des milliers de molécules odorantes : des experts senteurs associent à des milliers de molécules odorantes des qualités d'odeurs (fruité, boisé, huileux, etc : un vocabulaire bien défini et consensuel). On dispose également maintenant d'outils capables de calculer des milliers de propriétés physico-chimiques de molécules<sup>1</sup>. Il a alors pu être montré que ces propriétés déterminent la (les) qualité(s) d'une odeur perçue

1. Par exemple Dragon 6 – <http://www.taletete.mi.it/>