

N° d'ordre :

N° de série :

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



UNIVERSITÉ Echahid Hamma Lakhdar - EL-OUED
FACULTÉ DES SCIENCES EXACTES
DEPARTEMENT D'INFORMATIQUE



LICENCE ACADEMIQUE

Domaine: Mathématiques et Informatique

Filière: Informatique

Présenté par:

Betta Asma

Hogui Djihad

Fthiza Ammar Djamila

Thème

**Développement d'un système de calcul de
descripteur topologique d'un produit
chimique**

Sous la Supervision de :

Faouzi Zaiz

Année universitaire 2015/2016

Remerciements

Avant tous, Nous remercions dieu le tout puissant de m'avoir donné le courage et la patience pour réaliser ce travail malgré toutes les difficultés rencontrées.

Nous remercions infiniment tous qui nous a aidé de près et de loin d'avoir compléter ce travail et dépasser tous les obstacles surtout notre enseignant

" ZAIZ FAOUZI "

qui n'a pas cessé de nous donner les conseils et les bonnes orientations et nous priveons pas de son temps et aussi on remercie Ms. "BELGACEM SOIYEI" qui nous écoute avec grande patience pendant toute la période de préparation malgré ses contraintes d'enseignement,

Résumé

La catégorisation des produits chimique sconsiste à calculer un nombre relativement important de caractéristiques ou de descripteurs moléculaires pour le codage de ces produits. Ce descripteur est un nombre ou un vecteur associé à une molécule (par exemple le nombre d'atomes, de liaisons hydrogènes, de cycles aromatiques, de groupes menthyl, la somme des distances entre les atomes, . . .). Les descripteurs se calculer aussi sur les graphes (réseaux sociaux, biologiques), ont parle alors d'invariants de graphes. Dans ce travail, on s'intéresse à développer un système qui calcul le descripteur topologique d'un produit chimique à partir d'une signature moléculaire.

Mots Clés : Molécule, signature moléculaire, Arbre .

Abstract

The categorization of chemical products is to calculate a number relatively important characteristics or molecular descriptors for the coding of these products. This descriptor is a number or a vector associated with a molecule (e.g. the number of atoms of hydrogen bonds, aromatic rings, methyl groups, the sum of the distances between the atoms,...). The descriptors are also calculated on the graphs (social, biological networks), then speaks of graph invariants. In this work, we are interested in developing a system that calculation descriptor topology of a chemical from a molecular signature.

Keywords : molecule, molecular ,signature, Tree.

Table des matières

Remerciements	iii
Résumé	iv
Table des matières	vii
Liste des figures	ix
Introduction	1
1 Mesures de similarités des molécules	3
1.1 produit chimique	3
1.2 Mesures de similarité et de diversité : éléments	3
1.2.1 molécule.....	3
1.2.2descripteurs moléculaire	4
1.2.3descripteur signatur.....	5
1.2.4Indices de similarité.....	5
1.2.5système des poids.....	6
1.2.6Comparaisons intermoléculaires	6
1.2.7Comparaison de descripteurs dans la littérature.....	7
1.3Recherche de similarité pour des structures moléculaires	7
Conclusion	8
2 Langage de modélisation UML	10
2.2 L'UML.....	10
2.1.1Définition.....	10
2.1.2Historique	10
2.1.3Diagrammes de L'UML.....	11
2.1.4 Caractéristique d'UML.....	11
2.1.4.1 UML cadre l'analyse objet en offrant.....	11
2.1.4.2 UML est un support de communication.....	11
2.2 Le Processus de développement	12

2.1.1 Processus Unifié (Unifier Processus) : (UP).....	12
Conclusion	13
3 la modélisation	14
3.1 Diagramme « cas d'utilisation du système général ».....	15
3.2 Diagramme de séquences.....	16
3.3 Diagramme d'activité :«calculer le descripteur d'un produit».....	17
3.4 Diagramme de classe.....	18
Conclusion	19
4 La réalisation	20
4.1 Choix des outils de développement.....	21
4.2 Présentation du logiciel.....	21
4.2.1 L'interface d'authentification.....	22
4.2.2 Créer un nouveau arbre	23
4.2.3 Gestion des arbres des produits	24
Conclusion	26
Conclusion générale	27
Bibliographie	28

Liste des figures

représentation schématique 3D d' une molécule de saccharose.....	4
Quelques exemples de descripteurs et leur classification en 1D, 2D et 3D.	5
Les principes de Processus Unifié.....	12
Diagramme de cas d'utilisation.....	15
Diagramme de séquences (Nouveau Arbre).....	16
Diagramme d'activité pour le calcul des sigma.....	17
Diagramme de classe.....	18
exemple de l'interface d'authentification de l'application.....	22
exemple de l'Interface calcule les discrepateur.....	23
exemple d'Interface d'arber.....	23
Interface : "gérer les données".....	24
exemple de l'interface Afficher Arber d'application.....	25
exemple de l'interface Afficher getDescriptor d'application.....	26