



## Atelier de formation 202

Organisateurs / Organizers: Maria Miteva (Inserm UMR-S 973, Université Paris Diderot), Véronique Stoven (Inserm U900, Institut Curie), Bruno Villoutreix (Inserm UMR-S 973, Université Paris Diderot)

### Recherche *in silico* de sondes pharmacologiques et candidats médicaments : succès et défis

**Phase I • Le point sur...**  
23-25 mars 2010 • Saint-Raphaël

#### Objectifs

Les méthodes *in silico* jouent un rôle important dans la recherche biomédicale actuelle. Les approches *in silico* ont été utilisées pendant de nombreuses années pour faciliter la recherche de molécules actives, mais un rapport récent montre que ces outils peuvent aussi aider à la découverte de médicaments. De nombreux exemples de molécules touchées (« hits ») inhibant des enzymes ou bloquant des interactions macromoléculaires identifiées par criblage virtuel ont été publiés. L'objectif de l'atelier est d'introduire les méthodes *in silico* « ligand-based » et « structure-based » actuellement utilisées et de présenter des exemples d'applications de ces méthodes à la découverte de touches innovantes. Ainsi, cet atelier présentera à la fois les aspects théoriques des méthodes existantes et des nouvelles approches et des exemples d'applications sur des cibles thérapeutiques pertinentes. Il montrera aux participants comment de telles méthodes *in silico* combinées aux approches expérimentales peuvent aider à la découverte rapide et à coûts réduits de nouvelles molécules innovantes. Cet atelier va permettre d'adopter un langage commun (biologie-chémoinformatique) et facilitera la mise en place de collaborations entre les chimoinformaticiens et les biologistes.

#### Public

Une large audience scientifique académique ou industrielle (chercheurs, ingénieurs, post-doctorants et doctorants) intéressée par la découverte de molécules bioactives « drug-like » ou de sondes chimiques : bio/chémoinformaticiens ; chercheurs biologistes et chimistes : le but est de présenter les méthodologies *in silico* qui aideront à réaliser (ou initier) des projets à l'interface chimie-biologie axés sur la conception de nouvelles molécules touchées.

Les conférences seront données en anglais.

#### Programme

1. Criblage virtuel basé sur la structure de récepteur : les méthodes existantes et les nouveaux concepts.
2. Recherche de molécules touchées par des méthodes basées sur la structure de ligands connus.
3. « Success stories » : couplage des approches *in silico-in vitro* pour la découverte de nouvelles molécules d'intérêt pharmacologique.
4. Valorisation : transfert de technologies et brevets ; plateformes de criblage en France.

La 4<sup>e</sup> journée annuelle nationale en chémoinformatique organisée par la Société Française de Chémoinformatique se tiendra le 26 mars 2010 à Saint-Raphaël (informations supplémentaires sur :

<http://www.chemoinformatique.fr/modules/smartsection/item.php?itemid=32>)

#### Phase II • Maîtrise technique

8-10 novembre 2010 • MTI, Inserm UMR-S 973, Université Paris Diderot

#### Programme

Travaux pratiques sur ordinateur, visant à l'introduction des outils permettant :

- A. Préparation de chimiothèques des petits composés (**pour tous les participants**), prédiction de certaines propriétés ADME-Tox ; génération et optimisation de structures 3D.
- B. Criblage virtuel basé sur la structure du récepteur.
- C. Criblage virtuel basé sur des ligands connus.

Chaque participant choisira entre le stage B ou C selon ses projets.

#### Sélection

15 participants sélectionnés parmi les participants de la phase I.

#### Avec la participation de / with the participation of

Ruben Abagyan (La Jolla, USA), Andreas Bender (Leiden, The Netherlands), John Hickmann (Paris, France), Denise Hirsch (Paris, France), Richard Jackson (Leeds, UK), Gerard Kleywegt (Cambridge, UK), Bernard Maignet (Nancy, France), Maria Miteva (Paris, France), Xavier Morelli (Marseille, France), Stefano Moro (Padova, Italy), Olivier Sperandio (Paris, France), Jean-Philippe Vert (Paris, France).

**Date limite d'inscription : 25 Janvier 2010 • Registration deadline: January 25, 2010**

**Renseignements et inscriptions • Information and registration**

**Ateliers de formation - 101 rue de Tolbiac - 75654 Paris Cedex 13**

**Tel. 33 (0) 1 44 23 62 04 • Fax 33 (0) 1 44 23 62 93 • ateliers@inserm.fr • www.inserm.fr**

### *In silico* discovery of molecular probes and drug-like compounds: success & challenges

**Phase I • Critical assessment...**  
March 23-25, 2010 • Saint-Raphaël

#### Aims

*In silico* methods play an important role in modern biomedical research. While *in silico* approaches have been used for many years to facilitate the development of bioactive molecules, recent reports demonstrate their successful application for discovery of new drugs. Numerous examples of hit molecules inhibiting enzymes or blocking macromolecular interactions identified by virtual screening have been reported. The objective of the workshop is to get a clear understanding of commonly used *in silico* ligand-based and structure-based virtual screening methods and to master these techniques as well as to present applications of these methodology for discovery of innovative molecule hits. Hence, the workshop will present at the same time the theoretical methods, existing or under development, as well as recent success stories including hit discovery and lead optimization on important therapeutic targets. It will be demonstrated how *in silico* approaches can assist the classical experimental methods for discovery of novel compound hits more rapidly with reduced costs. This workshop will permit to adopt a common language (biology-chemoinformatics) and to facilitate creating new collaborations between biologists and chemoinformatics scientists.

#### Audience

A large scientific audience working in academic or industrial research units (researchers, post-docs and students) and interested in the discovery of drug-like bioactive or molecular probes: bio/chemoinformatics scientists; biomedical scientists, biologists and chemists: to introduce the different methods that will help to complete (or to initiate new) chemical biology projects with the goal of designing new hit molecules.

Lectures will be given in English.

#### Programme

1. Structure based virtual screening: existing methods and novel concepts
2. Ligand-based lead discovery.
3. 'Success stories' of combination of *in silico-in vitro* approaches to discover new hit molecules.
4. Valorization: technology transfer and patents; screening platforms in France.

The 4<sup>th</sup> annual national day in chemoinformatics will be organized by the French Society of Chemoinformatics on March 26, 2010 in Saint-Raphaël (for additional information see:

<http://www.chemoinformatique.fr/modules/smartsection/item.php?itemid=32>)

#### Phase II • Technical workshop

November 8-10, 2010 • MTI, Inserm UMR-S 973, Université Paris Diderot

#### Programme

Computer sessions introducing tools for:

- A. Preparation of libraries of chemical compounds (**for all participants**): prediction of ADME-Tox properties of drug-like molecules; generation and optimization of 3D structures.
- B. Structure based virtual screening.
- C. Ligand-based virtual screening.

**Participants will choose between the training course B or C depending on their projects.**

#### Selection

15 trainees will be selected from the participants phase I.