

Equipes françaises travaillant dans le domaine de la chemoinformatique

Frédéric PENNERATH

Equipe IMS
Supélec
2 rue Edouard Belin
57070 Metz

Description :

L'équipe IMS (Information Multimodalité Signal) vise à concevoir des outils multimodaux intégrant intelligemment signaux et informations. Sa recherche s'articule autour de 3 axes complémentaires :

- * Traitement de signal et apprentissage numérique
- * Raisonnement artificiel, apprentissage symbolique et fouille de données.
- * Modèles de calcul distribué (grilles)

Les applications se situent dans le domaine de la reconnaissance de formes, la vision par ordinateur, l'aide à la décision, l'extraction de connaissances à partir de données ...

Mots clés : apprentissage, systèmes multimodaux, fouille de données, traitement du signal et d'image, grilles, calculs distribués, intelligence ambiante.

Membres permanents de l'équipe :

- Michel BARRET
- Beatrice CHEVAILLIER
- Jean-Luc COLLETTE
- Abolfazl FATHOLAHZADEH
- Hervé FREZZA-BUET
- Virginie GALTIER
- Jean-Louis GUTZWILLER
- Michel IANOTTO
- Patrick MERCIER
- Philippe MOROSINI
- Frederic PENNERATH
- Olivier PIETQUIN
- Fabrice POPINEAU
- Stephane VIALLE

URL: <http://www.metz.supelec.fr/metz/recherche/ims>

Méthodes et logiciels de chemoinformatique :

* Le logiciel Forage développé à Supélec pour *la fouille de bases de graphes* et notamment la fouille de bases de molécules et de réactions.

Enseignement en chemoinformatique : aucun

VILLOUTREIX Bruno

Inserm U648
45 rue des Sts Peres, 75006 Paris

- les thèmes principaux de vos recherches, mots clefs
Recherche, développement et applications en :
Criblage in silico
Bioinformatique Structurale
Applications: cancer, coagulation, cardio-vasculaire...

La composition de l'équipe,

- Dr. Bruno O. Villoutreix (Inserm)
- Dr. Maria A. Miteva (Inserm)
- David Lagorce (Inserm)
- Matthieu Montes, PhD student
- Olivier Sperandio, PhD student
- Abdul Rauf Siddiqi, M2 student
- Dr. Tania Pencheva (visiting scientist)
- Dr. Richard Eudes (post-doc)

- l'adresse du site WEB du laboratoire,

<http://www.vls3d.com/>

et aussi en collaboration avec Dr Pierre Tuffery (Inserm) la plateforme Ressource parisienne en bioinformatique structurale

(http://bioserv.rpbs.jussieu.fr/RPBS/html/fr/T0_Home.html)

- les méthodes et logiciels utilisés (le cas échéant, précisez si il s'agit de vos propres développements),

Accelrys package, ICM, Dock, Surflex, Autodock, OpenEye package, LigandFit, 3DFS, Pymol, Dino., et aussi nos outils pour scoring, optimisation geometrique, ADME/tox, 2D-to-3D...

- les enseignements de la chemoinformatique (filière, nombre d'heures, effectifs).

Un module sur Paris 7, une semaine, en collaboration avec le Dr. Florent Barbault et Matthieu Montes

Quelques heures de bioinformatique structurale et drug design dans un module de l'école doctorale du médicament, université Paris 5

Jean-Marc NUZILLARD

FRE 2715 "Isolement, Structure, Transformations et Synthèse de Substances Naturelles"
Institut de Chimie Moléculaire de Reims IFR 53 "Biomolécules"
Moulin de la Housse
CPCBAI, Bâtiment 18
BP 1039
51687 REIMS Cedex 2
France

Tel : 03 26 91 35 48

Fax : 03 26 91 35 96

<http://www.univ-reims.fr/Labos/FRE2715/>

<http://www.univ-reims.fr/LSD/JmnSoft>

Mots clés :

Génération de graphes sous contrainte de la RMN Analyse paramétrique des signaux en RMN
Simulations chromatographiques Analyse rétrosynthétique assistée par ordinateur.

Pus de détails...

Génération automatique de graphes moléculaires plans sous contrainte des données de la RMN
1D et 2D pour l'analyse structurale automatique des petites molécules organiques (substances
naturelles, molécules de synthèse).

Analyse paramétrique des spectres de RMN: analyse automatique des multiplets en RMN 1D du
proton, prédiction linéaire pour le traitement de spectres J-résolus en absorption pure,
optimisation d'impulsions sélectives pour la suppression de signaux de solvants.

Simulation des processus chromatographiques.

Analyse rétrosynthétique de molécules chirales utilisant les sucres comme matières premières.

L'équipe se compose d'une personne (Dr. Jean-Marc Nuzillard, DR2 CNRS).

L'adresse du site WEB du laboratoire,

www.univ-reims.fr/LSD/JmnSoft

les méthodes et logiciels utilisés

LSD, Quiral, CPCSim (développements locaux)

Programmation sous GNU/Linux (C/C++, langages de scripts Tcl/Tk, Perl, Octave)

Philippe VISMARA

Université MONTPELLIER 2, CNRS,
161 Rue Ada, 34392
MONTPELLIER CEDEX 5

Thèmes de recherche :

- Systèmes d'information chimique
- Représentation de connaissances
- Algorithmique des graphes

Laboratoire :

LIRMM à Montpellier (www.lirmm.fr)
Département Informatique
Équipe "Données Objets Composants pour les systèmes complexes"

Enseignements en chemoinformatique :

- module de Chemoinformatique en 2e année du Master Recherche Informatique de l'Univ. Montpellier II

Cédric LOGE

MCU UFR Sciences Pharmaceutiques
BioCiT, UPRES EA1155
Département de Pharmacochimie
1 rue Gaston Veil
F-44035, Nantes cedex 1
France

Département de modélisation au sein de BioCiT (Nantes) :

1 MCU (moi même), 2 SGI octane et octane2, la suite de logiciel Tripos (Sybyl base, Advcomp (recherche conformationnelle), Molcad (surface moléculaire et propriétés sur ces surfaces), QSAR with CoMFA (3D), Dynamics, Biopolymer), Gold (docking), X-Score (fonction de scoring consensus), jackal (homologie) ...

Thématique : cancer (cancéropôle grand-ouest, Servier : inhibiteurs de protéine-kinases), anti-infectieux (en interne et en collaboration avec notre département de parasitologie et mycologie médicale : inhibiteurs de CYP51)

Christian DE BOUILLE

Ambinter SARL,
avenue de Versailles F 75016 Paris

-thèmes principaux:

utilisant le logiciel jchem en jsp avec mysql et tomcat, le site d'Ambinter

<http://www.ambinter.com> présente sur le web

+ de 5 millions de structures chimiques

recherches par sous-structures, par IDNUMBER etc.

Le même site présente également des classifications biologiques telles que Agonists and Antagonists, Inhibitors et autres cibles regroupant une vingtaine de familles thérapeutiques dont les molécules sont présentes dans la base de 5 millions de structures chimiques.

Ces classifications sont basées sur une bibliographie existante.

De plus le même site présente des structures privilégiées dont les molécules sont dans la base de 5 millions de structures chimiques.

Vient d'être mis en place une sélection de building blocks qui utilise le Ruby on Rails et le bean mview. Cette technologie permet de voir les molécules, de les glisser dans un panier et de demander un prix.

A partir de cette technologie un site marchand avec achat en ligne est rapidement envisageable.

La sélection est du type interactif en utilisant Ajax et les messages ouvrables par passage de la souris. Quelques atomes tels que N, S, Cl, O et des carbones sur des format smiles permettent de visualiser immédiatement quelques structures à partir de milliers de molécules et de les sélectionner aussitôt.

-la composition de l'équipe

1 personne

-l'adresse du site web

<http://www.ambinter.com>

et adresse des messages: ambinter@wanadoo.fr

-les méthodes et logiciels

jchem en jsp avec mysql et tomcat

Ruby on Rails et le bean mview

Ajax et les messages ouvrables

-les enseignements : pas jusqu'à maintenant

Bernard MAIGRET

Equipe ORPAILLEUR – sous-groupe biomodelling

Thèmes principaux du sous-groupe :

Screening virtuel, reconnaissance moléculaire, assemblages protéines-protéines
Systèmes étudiés : RCPGs, kinases, récepteurs membranaires et récepteurs nucléaires
Développements méthodologiques en visualisation moléculaire, docking et bases de données

Composition de l'équipe :

Alexandre Beaufrait, doctorant
Mathieu Chavent, doctorant
Leo Ghentio, ingénieur
Vincent Leroux, Postdoc
Bernard Maigret, DR CNRS

Adresse du site WEB :

<http://bioinfo.loria.fr/>

Méthodes et logiciels utilisés :

Développement de la plateforme VSM-G (Virtual Screening Manager for computational Grids)
Logiciels CHARMM et NAMD

Enseignements :

Nancy Université : M2P Génomique et Informatique
INPL : S5 Bioinformatique

Sylvaine ROY

**Equipe « Intelligence Artificielle pour la Chemo-Génomique »
DSV/iRTSV/LBIM - CEA Grenoble**

Site Web de l'équipe : <http://www-dsv.cea.fr/lbim/iacc>

La composition de l'équipe :

Sylvaine Roy - ingénieur-chercheur CEA

Samia Aci (post-doctorante CEA, de mars 2005 à octobre 2006)

Samuel Wiczorek (ingénieur-chercheur CEA et doctorant, co-encadré par [l'équipe Apprentissage du Laboratoire Leibniz](#))

Loraine Brillet stagiaire de Mastère de Chemo-Informatique (formation dirigée par A. Varnek, ULP de Strasbourg)

Les travaux de cette jeune équipe portent sur le développement de méthodes et d'outils adaptés au traitement et à l'analyse de données issues d'une approche globale en biologie, la chemo-génomique. Cette discipline vise à explorer les espaces chimique et biologique pour en comprendre les relations. Elle recouvre un ensemble d'approches dans lesquelles les petites molécules sont utilisées pour l'étude des systèmes biologiques.

Ces approches génèrent et utilisent un grand nombre d'informations très diverses tant au niveau des molécules, que des systèmes biologiques étudiés (encore appelés "cibles"), ou que de l'interaction entre les molécules et les cibles. Pour répondre aux questions biologiques posées, il faut pouvoir modéliser, analyser et intégrer ces informations souvent hétérogènes. Les approches informatiques, bio-informatiques ou chemo-informatiques possibles sont multiples, et selon le besoin nous développons la méthodologie appropriée en nous rapprochant, si nécessaire, des experts du domaine considéré par le biais de collaborations privilégiées. Nous favorisons cependant les méthodologies d'Intelligence Artificielle pour plusieurs de nos projets.

Voici des exemples d'axes thématiques intéressant la chemo-informatique et dans lesquels s'inscrivent nos travaux actuellement :

- développement d'outils (notamment un système d'information interne *PhenoScreen*) pour la gestion de chimiothèques, l'analyse et l'intégration de données de criblage
- recherche et extraction de descripteurs moléculaires pertinents pour du criblage virtuel par apprentissage artificiel
- développement de méthodes d'apprentissage relationnel, comme la Programmation Logique Inductive, pour représenter et manipuler des données structurées comme les molécules (en collaboration avec G. Bisson et M. Gordon, équipe Apprentissage du laboratoire Leibniz, IMAG)
- validation de nouveaux algorithmes de docking conduits sur grilles de calcul par analyse et comparaison des résultats de ceux-ci avec d'une part les performances obtenues par des algorithmes classiques et d'autre part les résultats expérimentaux obtenus in vivo (en collaboration avec l'équipe de D. Horvath, Université de Lille, et le centre de Criblage pour des Molécules Bio-Actives dirigé par L. Lafanechère)

Mots-clefs

Apprentissage-machine, intelligence artificielle, modélisation, chemo-génomique, SAR, descripteurs moléculaires, criblage virtuel, docking.

Alexandre VARNEK

Laboratoire d'Infochimie,
Institut de Chimie de Strasbourg (UMR 7177),
Université Louis Pasteur
<http://infochim.u-strasbg.fr>

Composition de l'équipe :

Alexandre Varnek – professeur,
Gilles Marcou – maître de conférences,
Olga Klimchuk _ chercheuse contractuelle,
Denis Fourches – doctorant,
Frank Hoonakker– doctorant,
Cédric Gaudin – doctorant,
Natalia Kireeva– doctorante,
Thomas Fleurentdidier – doctorant.

Professeurs invités en 2004-2007 :

J. Gasteiger, A. Tropsha, C. Steinbeck, I. Baskin, V. Solovev, I. Tetko

Projets de recherche

- développement des outils en chemoinformatique (projet ISIDA) ;
- plate forme du criblage virtuel ADME/Tox ;
- outils de recherche de réactions chimiques par similarité,
- prédicteur de constantes de complexation des métaux (projet COMET),

Enseignement

- Master en Chemoinformatique (depuis 2001) ;
- Cours d'initiation à a chemoinformatique en Licence de Chimie et Chimie Physique