

PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2016/2017

A envoyer à Mme Pr Camproux
anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr

Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise: Marc Delarue
Affiliation administrative (CNRS, INSERM, ...) et Numéro d'affiliation de l'unité :
Institut Pasteur / UMR CNRS 3528
Adresse précise du Laboratoire : 25 rue du Dr Roux 750151 Paris

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Bernard Delmas
E-mail : bernard.delmas@pasteur.fr

Nom du Responsable du stage : Olivier Sperandio

Téléphone : 01 40 61 35 31 Fax :

E-mail : olivier.sperandio@pasteur.fr

HDR : oui

Ecole doctorale de rattachement : MTCE

Spécialité du stage : Recherche Professionnel

Indiquez par quelques mots clés, l'orientation scientifique du sujet :

Base de données, chemoinformatique, espace chimique, interactions protéine-protéine

Titre du stage :

Approches chemoinformatiques pour la mise à jour et l'analyse de données chimiques et pharmacologiques de modulateurs d'interactions protéine-protéine.

Ce sujet constitue-t-il un premier pas vers un travail de thèse : Oui

Description du sujet (quelques lignes):

Ce projet est centré sur la base de données iPPI-DB^{1,2} <http://www.ippidb.cdithem.fr/>, qui contient la structure chimique, les principales caractéristiques physico-chimiques, les données pharmacologiques et le profil des cibles thérapeutiques de plusieurs centaines de modulateurs d'interactions protéine-protéine (PPI). IPPI-DB est accessible via une application web et peut être interrogée selon deux approches générales : 1) en utilisant des critères physicochimiques ou pharmacologiques; 2) par similarité chimique avec une structure d'entrée définie par l'utilisateur. Dans le cadre de sa prochaine mise à jour, nous avons besoin d'intégrer et d'analyser de nouvelles données dans la base. Ceci implique la maîtrise de plusieurs approches allant de la bonne connaissance des outils de curation bibliographique et des bases de données à l'usage d'outils chemoinformatiques d'analyse de l'espace chimique notamment. La mission du stage sera donc combiner plusieurs techniques dans le domaine des bases de données et de la chemoinformatique pour saisir les données, les annoter et les intégrer dans la base de données. Le(a) candidat(e) procédera ensuite à une analyse statistique des nouvelles données en utilisant des outils chemoinformatiques avec l'emploi de techniques comme les analyses en composantes principales ou les cartes auto organisatrices (Kohonen – SOM). Les résultats de cette étude feront l'objet d'une publication une fois la mise à jour et l'analyse des données terminées. Nous recherchons des candidat(e)s motivé(e)s souhaitant conforter une expertise en chemoinformatique ou bioinformatique structurale et analyses de données.

1. Labbe, C. M. *et al.* iPPI-DB: an online database of modulators of protein-protein interactions. *Nucleic Acids Res.* (2015). doi:10.1093/nar/gkv982
2. Labbe, C. M., Laconde, G., Kuenemann, M. A., Villoutreix, B. O. & Sperandio, O. iPPI-DB: a manually curated and interactive database of small non-peptide inhibitors of protein-protein interactions. *Drug Discov. Today* **18**, 958–68 (2013).