

Master « Sciences, Technologie, Santé »



Mention **M2 -BI** **In Silico Drug Design**

SUJET DE STAGE
Année Universitaire 2020/2021

Nom du Responsable du Laboratoire :

Laboratoire : SANOFI R&D - Chilly-Mazarin / Longjumeau

Adresse précise du Laboratoire : 1 avenue Pierre Brossolette 91380 CHILLY-MAZARIN

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) et nom de l'équipe : MINOLETTI-HOCHEPIED Claire

Nom des Responsables du stage : MINOLETTI-HOCHEPIED Claire

Numéro de Téléphone : 0160495067

E- mail : claire.minoletti@sanofi.com

Spécialité du stage : Recherche / privé, national / ~~international~~

Ce sujet constitue-t-il un premier pas vers un travail de thèse : ~~oui~~/non

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

Espace chimique, Analyse de données massives, Generative topographique mapping, Chemoinformatique

Title: *Analyse et mise en parallèle d'espaces chimiques synthétisable avec ceux du patrimoine de Sanofi*

Project Summary :

Suite aux avancées en synthèse chimique et en chimie combinatoire, l'espace parcouru et l'envergure des chimiothèques grandit exponentiellement. Certains espaces ne considérant que des composés synthétisables peuvent déjà dépasser le milliard de molécules tel que Enamine REAL Space. Ces bases de données relèvent d'un challenge vis-à-vis de leur analyse et de leur compréhension rendant l'énumération exhaustive des substances impossible face aux limites de stockage. Ainsi, afin de pouvoir évaluer la qualité de l'espace recouvert, de mettre en évidence des zones non explorées expérimentalement et de comprendre les descripteurs expliquant des clusters moléculaires, des analyses par réduction dimensionnelle peuvent être utilisées. Parmi celles-ci, existent des méthodes linéaires comme l'ACP, illisibles si les espaces chimiques sont trop grands, ou non-linéaire comme le GTM ou le SOM. La mise en pratique de ces méthodes avec des cartes décrivant l'espace de composés druggables, expérimentalement actifs et/ou synthétisables permet alors d'élucider des sous-structures bioactives et ainsi d'effectuer un screening virtuel voire de la prédiction d'activité. Le but du projet sera de comparer le patrimoine de Sanofi avec d'autres espaces chimiques. Cette étape d'évaluation sera focalisée sur la qualité des espaces, leur recouvrement par rapport à la distribution de certains descripteurs et la détection de puits pauvres en composés. Elle permettra de mettre en place un protocole d'exploration et de récupération pratique de composés d'intérêts au sein d'espaces chimiques.