



COMMUNIQUÉ DE PRESSE

EMBARGO JUSQU'AU MARDI 10 SEPTEMBRE 2024 À 9 H (HEURE AVANCÉE DE L'EST)

Pour obtenir de plus amples renseignements, veuillez communiquer avec :

Estrid Jakobsen – estrid.jakobsen@conscience.ca

Preeti Singh – psingh@burness.com

Conscience annonce les meilleurs participants au défi de science ouverte visant à concevoir des médicaments prometteurs contre tous les coronavirus

L'équipe la plus performante est issue d'universités régionales du Brésil et a utilisé une combinaison d'outils libres et d'intelligence artificielle pour concevoir des molécules.

TORONTO (10 septembre 2024) – Afin de répondre à la nécessité d'améliorer les traitements contre les futures menaces de pandémie de coronavirus, l'organisation de biotechnologie à but non lucratif Conscience, spécialisée dans la découverte de médicaments, a publié aujourd'hui sept molécules prometteuses nouvellement découvertes à un stade précoce, qui pourraient conduire à un nouveau traitement efficace contre tous les coronavirus, et pas seulement contre le SRAS-CoV-2. Ces molécules ont été découvertes par des équipes de recherche du monde entier dans le cadre du concours de « science ouverte » de Conscience. L'équipe la plus performante, dirigée par Karina dos Santos Machado, est issue de deux universités brésiliennes moins connues.

Cette édition des [défis CACHE \(Critical Assessment of Computational Hit-Finding Experiments\)](#), organisée par Conscience, en collaboration avec les sociétés pharmaceutiques Bayer et Boehringer Ingelheim, a été parrainée par les National Institutes of Health des États-Unis et a fait appel à l'expertise en matière de conception de petites molécules de tous les continents. L'équipe brésilienne la plus performante a soumis le plus grand nombre de prédictions confirmées en utilisant une combinaison d'outils d'intelligence artificielle (IA) libres et développés à l'interne pour concevoir les molécules qui pourraient traiter les coronavirus. Les autres meilleurs participants provenaient d'universités du Canada, du Royaume-Uni et des États-Unis – dont un groupe utilisant une interface de jeu de science citoyenne appelée Drug-It pour concevoir des molécules – ainsi que d'entreprises biotechnologiques du Canada et de l'Ukraine.

L'ensemble des données générées dans le cadre du concours, y compris les nouvelles molécules prometteuses, est désormais accessible au public sur le [site web des défis CACHE](#)

pour que les chercheurs de n'importe quel pays puissent faire avancer la recherche, entre autres pour l'entraînement des algorithmes de conception de médicaments par l'IA.

« Les incitations commerciales à la recherche et au développement dans le domaine des coronavirus ont diminué, mais pas le besoin de nouveaux traitements », a déclaré Ryan Merkley, directeur général de Conscience. « Les défis CACHE utilisent la collaboration là où la concurrence n'est pas à la hauteur, en rassemblant des chercheurs talentueux de partout – à la fois des entreprises pharmaceutiques bien financées et des institutions manquant de ressources – pour stimuler des découvertes dans des domaines où les besoins ne sont pas satisfaits. »

Pour ce deuxième défi CACHE, les participants ont été invités à concevoir des molécules qui se lient au site le plus conservé dans les protéines des coronavirus, situé sur l'hélicase NSP13, une protéine essentielle à la réplication virale. Le ciblage des hélicases en tant que stratégie antivirale s'est avéré efficace contre des virus tels que l'herpès, le zona et l'hépatite C, mais n'a pas encore été exploré pour les coronavirus, aucun médicament candidat n'ayant ciblé ce site jusqu'à présent. L'objectif est de créer un traitement contre les coronavirus qui complète les thérapies existantes, comme le Paxlovid, et qui serait résistant aux nouvelles souches de coronavirus, ce qui permettrait de faire face aux futures éclosions de coronavirus.

Toutes les molécules soumises ont été testées en laboratoire afin que l'on puisse vérifier leur capacité à se lier à la cible.

« Les molécules découvertes par les participants aux défis CACHE et confirmées expérimentalement par l'équipe de biophysique du Consortium de génomique structurale sont des points de départ chimiques prometteurs pour l'étude d'une stratégie thérapeutique entièrement nouvelle contre le coronavirus », a déclaré le Dr Matthieu Schapira, du Consortium de génomique structurale de l'Université de Toronto et scientifique principal du programme CACHE. « Si l'une de ces molécules permet de développer un médicament, celui-ci devrait être efficace pour traiter n'importe quel coronavirus, et pas seulement le SRAS-CoV-2; le médicament serait donc utile pour contrer les futures menaces de pandémie. »

« Comblent les lacunes dans le développement de médicaments et de produits thérapeutiques est une partie importante de l'éventail des solutions de biofabrication pour les Canadiens. Nous avons hâte de voir les résultats de cette nouvelle série de défis de Conscience et de les ajouter à la liste des réussites canadiennes en matière d'innovation », a déclaré l'honorable François-Philippe Champagne, ministre de l'Innovation, des Sciences et de l'Industrie du Canada. Le Canada a [annoncé un financement de 49 millions de dollars pour Conscience](#) en octobre 2023.

Au total, 22 équipes issues du monde universitaire et de l'industrie, utilisant différentes méthodes de calcul, ont participé au concours. Elles ont soumis 2 576 molécules, qui ont

ensuite été testées en laboratoire. Selon M. Merkley, cet ensemble de données, qui est désormais à la disposition des chercheurs du monde entier, contribue à jeter les bases du développement de méthodes d'intelligence artificielle efficaces pour accélérer les premières étapes de la découverte de médicaments.

« La valeur des défis CACHE ne réside pas seulement dans les résultats scientifiques, mais aussi dans la possibilité de comparer des méthodes concurrentes et leurs résultats, en s'appuyant sur une rétroaction impartiale et de haute qualité sur les méthodes et les conceptions de la part d'experts en IA et de chimistes-informaticiens du monde entier », a déclaré M. Merkley.

Les équipes les plus performantes de ce défi CACHE, classées en fonction du nombre et de la force des molécules qu'elles ont découvertes, sont les suivantes :

1. **Karina dos Santos Machado, Adriano Velasque Werhli** (Universidade Federal do Rio Grande – FURG, Rio Grande, Brésil), **Frederico Schmitt Kremer** (OmixLab, Universidade Federal de Pelotas, Capão do Leão, Brésil)
2. **David Koes, Ian Dunn** (Université de Pittsburgh, Pittsburgh, États-Unis)
3. **Dmitri Kireev** (Université du Missouri, Columbia, États-Unis)
4. **Rocco Moretti, Thomas Scott** (Université Vanderbilt, Nashville, États-Unis), **Jens Meiler** (Université Vanderbilt, États-Unis et Université Leipzig, Allemagne)
5. **Yurii Moroz, Olga Tarkhanova, Mykola Protopopov** (Chemspace, Kiev, Ukraine)

Si ces cinq équipes ont obtenu les notes les plus élevées pour l'ensemble des molécules qu'elles ont découvertes, quatre autres équipes ont également découvert une molécule prometteuse chacune : **Gennady Poda** et **Laurent Hoffer** (Institut ontarien de recherche sur le cancer et Université de Toronto, Canada), une équipe dirigée par **Douglas Houston** et **Vincent Blay** (Université d'Édimbourg, Écosse), une équipe dirigée par **Daniel Cole** (Université de Newcastle, Royaume-Uni) et une autre équipe du Canada. Collectivement, les participants au défi ont découvert sept résultats prometteurs et six autres points de départ chimiques potentiels qui pourraient se traduire en molécules prometteuses grâce à des recherches supplémentaires.

Les résultats de ce deuxième concours de la série des défis CACHE de Conscience font suite aux résultats du premier défi lancé en janvier, qui visait à trouver des médicaments plus efficaces contre les formes familiales de la maladie de Parkinson. Quatre autres défis sont en cours (axés sur le développement de traitements contre la COVID-19, de multiples formes de cancer et l'obésité), et un cinquième sera annoncé au début de 2025.

###

À propos de Conscience

Conscience est une organisation de biotechnologie à but non lucratif dont l'objectif est de changer la donne en matière de développement de médicaments, en permettant des découvertes pour des maladies qui n'ont reçu qu'une attention limitée de la part de l'industrie

pharmaceutique. Grâce à des approches collaboratives et à l'intelligence artificielle, elle fait tomber les barrières et les inefficacités imposées par les modèles axés sur le profit. Les défis CACHE, alimentés par un réseau comprenant des universitaires, des industriels, des technologues et un soutien public, constituent une initiative clé. Ils permettent aux scientifiques du monde entier de découvrir des cibles médicamenteuses prometteuses, accélérant ainsi la mise au point de traitements pour les personnes qui en ont le plus besoin. Pour obtenir de plus amples renseignements, visitez le site www.conscience.ca/fr.