



COMMUNIQUÉ DE PRESSE

SOUS EMBARGO JUSQU'AU MARDI 10 DÉCEMBRE 2024, 9 H (HAE)

Pour obtenir de plus amples renseignements, veuillez communiquer avec :

Estrid Jakobsen – estrid.jakobsen@conscience.ca

Preeti Singh – psingh@burness.com

Conscience annonce les meilleurs résultats de son troisième défi ouvert de découverte de médicaments, ciblant les coronavirus

- *23 équipes ont utilisé des méthodes informatiques pour prédire les molécules qui se lient à une cible médicamenteuse potentielle sur le SARS-CoV-2 comme point de départ pour le développement de médicaments contre les coronavirus.*
- *Quatre équipes, originaires du Canada, d'Allemagne, de Corée et des États-Unis, ont été désignées comme les plus performantes.*
- *L'ensemble des données de haute qualité du concours est accessible au public pour d'autres recherches.*

TORONTO (10 décembre 2024) - La biotech à but non lucratif Conscience, spécialisée dans la découverte de médicaments, a annoncé aujourd'hui les résultats de son troisième défi scientifique ouvert CACHE visant à trouver des molécules qui pourraient être développées en médicaments empêchant les coronavirus d'échapper au système immunitaire. Sur les 1 739 molécules prédites par 23 équipes, quatre molécules étaient chimiquement nouvelles et se sont révélées prometteuses en tant que points de départ pour le développement de médicaments.

Quatre équipes se sont classées au premier rang sur la base de la confirmation expérimentale et de la nouveauté chimique des molécules qu'elles ont découvertes. Ces équipes étaient dirigées par : Francesco Gentile (Université d'Ottawa et Institut de biologie des systèmes d'Ottawa) et Artem Cherkasov (Hôpital général de Vancouver et Université de Colombie-Britannique), Gerhard Wolber (Freie Universität Berlin), Minghu Song (Université du Connecticut) et Keunwan Park (Institut coréen de science et de technologie). Cinq autres équipes avaient chacune au moins une molécule confirmée, mais ont obtenu des résultats inférieurs en termes de nouveauté chimique. Les chercheurs ont utilisé diverses méthodes informatiques, dont l'intelligence artificielle, pour établir leurs prédictions.

L'ensemble des données générées par le concours, y compris les nouvelles molécules prometteuses, est désormais accessible au [public sur le site Web des défis CACHE](#), afin que les chercheurs de n'importe quel pays puissent poursuivre leur développement sans brevet ni restriction.

Cette édition des [défis CACHE \(Critical Assessment of Computational Hit-Finding Experiments\)](#), organisée par Conscience et les sociétés pharmaceutiques AstraZeneca, 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.

« Alors que l'attention et les ressources se sont détournées de la COVID-19, la menace de futures pandémies de coronavirus persiste », a déclaré Ryan Merkley, PDG de Conscience. « L'IA et les outils de science ouverte peuvent aider à identifier des médicaments potentiels contre des menaces pandémiques, comme la COVID, ainsi que pour traiter des maladies rares et lutter contre la résistance aux antimicrobiens, et ces équipes de recherche du monde entier ont partagé leurs compétences pour faire avancer des découvertes indispensables dans des domaines sous-étudiés ».

Les participants à ce défi CACHE devaient concevoir des molécules qui se lient au site ADPr du macrodomaine Nsp3 (Mac1) du SRAS-CoV-2. Ce site sur une protéine de coronavirus permet au virus d'échapper au système immunitaire. Toutes les molécules soumises ont été évaluées en laboratoire par l'équipe de biophysique du Consortium de génomique structurale de l'Université de Toronto pour déterminer leur capacité à se lier à la cible.

Bien que les quatre premières molécules confirmées expérimentalement dans ce défi aient été jugées chimiquement nouvelles par le comité d'évaluation des résultats de CACHE, trois d'entre elles étaient apparentées de près ou de loin à des [molécules découvertes](#) par le laboratoire dirigé par James Fraser à l'Université de Californie à San Francisco. M. Fraser est un collaborateur du défi CACHE et un expert de la protéine cible.

« Les participants à CACHE ont réussi à trouver quelques nouveaux « hits » ciblant SARS-CoV-2 Nsp3-Mac1, mais la découverte d'échafaudages chimiques vraiment nouveaux s'est avérée être un défi presque insurmontable », a déclaré le Dr Matthieu Schapira du Consortium de génomique structurale de l'Université de Toronto et le scientifique en chef du programme CACHE.

Dr Schapira a noté que le Laboratoire Fraser a publié en août un [article préliminaire](#) décrivant une molécule puissante ciblant Nsp3-Mac1 qui présente des effets in vivo prometteurs. L'évaluation de telles molécules hautement personnalisées dépasse le cadre des défis CACHE, qui exigent que les molécules sélectionnées figurent dans le catalogue des fournisseurs commerciaux.

« Les molécules confirmées expérimentalement dans le cadre de ce défi CACHE complètent les données générées par d'autres groupes, notamment le Laboratoire Fraser et, nous l'espérons, stimuleront la recherche et le développement de nouveaux médicaments de restauration immunitaire contre les coronavirus », a déclaré Dr Schapira. « Entre les résultats de notre [deuxième défi CACHE](#), qui ciblait l'hélicase Nsp13 du SRAS-CoV-2 pour empêcher le

virus de se répliquer, et ces succès Nsp3-Mac1 pour affaiblir le virus face au système immunitaire, nous ouvrons des voies pour de futures thérapies combinées ».

Conscience a maintenant dévoilé les résultats de trois défis CACHE : le premier a permis de découvrir des cibles médicamenteuses potentielles pour la maladie de Parkinson héréditaire, et les deuxième et troisième pour la COVID. Les autres défis en cours portent sur le développement de traitements contre de multiples formes de cancer et contre l'obésité.

###

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 conscience.ca/fr.

À propos des défis CACHE

Les défis CACHE (Critical Assessment of Computation Hit-finding Experiments) offrent une plateforme de compétition ouverte pour aider à accélérer l'une des premières étapes de la découverte de médicaments. Les chercheurs du monde universitaire, de l'industrie et des organisations sans but lucratif sont invités à déployer leurs meilleures méthodes de calcul pour prédire les molécules qui se lieront à une cible prédéfinie en lien avec une maladie, une étape critique dans la découverte de médicaments connue sous le nom de « hit-finding ». Leurs prédictions sont évaluées et comparées dans un laboratoire de pointe par nos partenaires du Consortium de génomique structurale (CGS). Tous les résultats des tests d'évaluation des performances des prédictions sont partagés ouvertement et publiquement avec le monde entier, et toutes les structures chimiques sont mises à la disposition de toutes et tous, sans brevet. Visitez conscience.ca/fr/cache-challenge.