



Conscience annonce les résultats du quatrième défi CACHE, qui portait sur l'immunothérapie contre le cancer

Le défi CACHE n° 4 consistait à utiliser des méthodes informatiques pour prédire de nouvelles substances chimiques pour la CBLB, l'ubiquitine-protéine ligase E3

Keunwan Park, de l'Institut coréen des sciences et technologies, a identifié avec succès une molécule à la fois bioactive et chimiquement nouvelle

Les résultats démontrent que des méthodes de travail novatrices, guidées par l'IA peuvent surmonter les obstacles à la découverte de médicaments

Toronto, ON, Canada, 16 juin 2025 — [Conscience](#), une organisation à but non lucratif qui utilise la science ouverte et une véritable collaboration pour favoriser la découverte et le développement de médicaments là où les solutions du marché sont limitées, a le plaisir d'annoncer les résultats de son quatrième défi CACHE (Critical Assessment of Computational Hit-Finding Experiments) et l'identification d'une molécule chimiquement nouvelle et bioactive. Le défi CACHE n° 4 s'est concentré sur la tâche difficile d'identifier de nouvelles molécules qui peuvent se lier à CBLB, une cible d'immunothérapie contre le cancer pour laquelle le paysage des brevets est déjà bien établi.

Le résultat le plus remarquable du défi CACHE n° 4 est celui obtenu par Keunwan Park, de l'Institut coréen des sciences et technologies. Il s'agit en effet du seul participant à avoir identifié une molécule à la fois biologiquement active et chimiquement nouvelle. M. Park y est parvenu en combinant l'apprentissage automatique et les méthodes fondées sur la structure. Son approche consiste en l'apprentissage de modèles à partir de molécules brevetées existantes, ce qui permet de générer de nouveaux échafaudages distincts. Il a ensuite affiné la sélection à l'aide de la structure protéique du Consortium de génomique structurale (SGC). Ce processus en deux étapes a permis

de découvrir un nouveau composé actif. Cette découverte est d'autant plus remarquable que les sociétés pharmaceutiques ont eu du mal à trouver de nouveaux échafaudages chimiques – ou cadres d'une molécule – pour cette cible.

« Au début du défi CACHE n° 4, toutes les molécules connues du brevet CBLB partageaient un échafaudage chimique commun, soulignant la difficulté d'identifier de nouveaux modèles », a expliqué Matthieu Schapira, coordonnateur scientifique de CACHE, chercheur principal au Consortium de génomique structurale et professeur à l'Université de Toronto. « La structure cristalline récemment mise au point au laboratoire de Levon Halabelian au CGS a donné lieu à un nouvel espoir quant à la découverte basée sur la structure. L'un des 23 groupes informatiques participants a ainsi pu identifier une molécule entièrement nouvelle, ce qui met en évidence le potentiel des défis de la science ouverte pour stimuler l'innovation. Cependant, cela met aussi en évidence les obstacles à la prédiction fiable de composés biologiquement pertinents. Félicitations à l'équipe de biophysique dirigée par Cheryl Arrowsmith, qui a passé au crible plus d'un millier de composés prédits et validé la molécule gagnante de Keunwan Park ».

Un autre résultat remarquable a été obtenu par Wei Lu, responsable de la recherche chez Galixir. Il a identifié le composé le plus puissant du défi; cependant, il n'offrait qu'une nouveauté limitée, puisqu'il ressemblait étroitement à des molécules brevetées existantes.

Les défis CACHE sont régis par Conscience, ainsi que par les sociétés pharmaceutiques AstraZeneca, Bayer, Boehringer Ingelheim et UCB. Ils font appel à l'expertise en matière de conception de petites molécules à l'échelle mondiale.

La découverte de M. Park s'inscrit dans la continuité des résultats qu'il a obtenus lors des précédents défis CACHE. Lors du défi n° 3, il a identifié la seule nouvelle molécule active, également appelée « touche » ou « hit ». Toutefois, il n'y avait pas d'analogues chimiques pour soutenir davantage sa découverte. Lors du défi n° 2, il a découvert la molécule la plus puissante, mais elle a été jugée chimiquement instable. Grâce à la réussite de M. Park, le défi CACHE n° 4 a permis de mettre au jour une nouvelle molécule prometteuse, dont l'ensemble des données est maintenant disponible gratuitement [en ligne](#), afin que les chercheurs du monde entier puissent continuer son développement sans avoir besoin d'un brevet ni de restrictions.

Conscience a maintenant annoncé les résultats de quatre défis CACHE. Le [premier défi CACHE](#) a permis de trouver des cibles médicamenteuses potentielles pour la maladie de Parkinson héréditaire et de reconnaître que les techniques d'intelligence artificielle sont prometteuses pour l'identification de molécules actives. Le [deuxième défi CACHE](#)

consistait à identifier des molécules qui se lieraient à un site hautement conservé d'une protéine du SARS-CoV-2. Si le développement de ce médicament s'avère fructueux, il pourrait être utilisé pour traiter tous les coronavirus. Dans le cadre du [troisième défi CACHE](#), des chercheurs du monde entier ont utilisé des méthodes informatiques pour prédire quelles molécules se lieront à une cible potentielle afin de développer des médicaments contre une autre série de COVID, le SARS-CoV-2. Quatre molécules chimiquement nouvelles ont été identifiées et se sont révélées prometteuses comme points de départ pour la mise au point de médicaments. Le [quatrième défi CACHE](#) portait sur l'immunothérapie contre le cancer. D'autres défis en cours portent sur le développement de traitements contre l'obésité et d'autres types de cancer, et le septième défi CACHE sera lancé cette année.

Autres citations

« En soutenant des initiatives comme les défis CACHE, nous contribuons à stimuler le genre de réflexion originale qui aidera à positionner le Canada comme un centre de calibre mondial pour les sciences et l'innovation. Dans le cadre de ces défis, Conscience invite les meilleurs esprits au monde à concevoir de nouveaux médicaments et de nouvelles approches thérapeutiques. Je tiens à féliciter Keunwan Park de l'Institut coréen de science et de technologie, qui a découvert une molécule capable de se lier à des cibles d'immunothérapie. Cette découverte pourrait mener à de nouveaux traitements contre le cancer. »

- La ministre de l'Industrie et ministre responsable de Développement économique Canada pour les régions du Québec, l'honorable Mélanie Joly

« J'éprouve une grande satisfaction à avoir découvert une molécule bioactive et chimiquement inédite pour la CBLB, une réalisation particulièrement importante pour moi en tant qu'informaticien scientifique. C'est la troisième fois que je participe à un défi CACHE, et grâce à ces expériences, j'ai eu de précieuses occasions d'affiner notre approche et d'appliquer ce que nous avons appris, ce qui a finalement permis d'obtenir un résultat positif. Je suis heureux de démontrer que les flux de travail pilotés par l'IA peuvent surmonter les obstacles à la découverte de médicaments, et j'apprécie les efforts déployés par les défis CACHE pour promouvoir la science ouverte et la collaboration au moyen d'initiatives à fort impact ».

- Keunwan Park, chercheur principal à l'Institut coréen des sciences et technologies

« Les défis CACHE offrent une occasion unique d'accélérer la découverte de médicaments à un stade précoce. Comme le montre le défi CACHE n° 4, l'identification

de nouvelles molécules qui se lient à la CBLB était un défi de taille. Pourtant, cet effort illustre à la fois la complexité de la tâche et la promesse d'une science ouverte pour s'y attaquer ensemble. Chaque fois que nous franchissons une étape supplémentaire ou établissons une nouvelle relation, nous contribuons à faire avancer la découverte de médicaments et nous sensibilisons davantage à l'importance de la science ouverte. Je suis fier de contribuer à cet effort collectif et de faire partie d'une initiative qui met en évidence le véritable potentiel de l'IA en tant qu'outil de découverte de médicaments et, en fin de compte, pour le progrès scientifique.

- Wei Lu, responsable de la recherche chez Galixir

À propos de Conscience

Conscience est un organisme sans but lucratif dont l'objectif est de faciliter la découverte et le développement de médicaments dans des domaines où le partage ouvert et la collaboration sont essentiels pour progresser et où les solutions offertes sur le marché sont limitées. Ces domaines incluent notamment les maladies rares ou négligées, la préparation aux pandémies et la résistance aux antimicrobiens. Pour y parvenir, l'organisation encourage le travail d'équipe, le partage ouvert des connaissances et des outils, l'utilisation et l'amélioration de l'intelligence artificielle, ainsi que l'élaboration de politiques qui remettent en question les modèles traditionnels de développement de médicaments. S'appuyant sur un réseau composé d'universitaires, d'industriels, de technologues, d'experts et d'expertes en politiques ainsi que sur le soutien public, Conscience vise à promouvoir l'innovation en faisant de la découverte et du développement de médicaments un sport d'équipe. Grâce à des projets phares, tels que son programme DMSO (Développer des médicaments en science ouverte) et les défis CACHE (Critical Assessment of Computation Hit-finding Experiments), Conscience accélère le développement de traitements pour les personnes qui en ont le plus besoin. Ainsi, aucune d'entre elles n'est laissée pour compte. Pour en savoir plus, visitez le site www.conscience.ca.

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 scientifiques provenant du milieu universitaire, de l'industrie et des organismes sans but lucratif sont encouragés à mettre en œuvre leurs techniques de calcul les plus avancées pour identifier les petites molécules capables de se fixer sur une cible prédéfinie liée à 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 analyses comparatives sont ensuite rendus publics et accessibles à tous. De plus, toutes les structures chimiques sont mises à la disposition de toutes et tous, sans restriction de brevet. Pour de plus amples renseignements, visitez conscience.ca/fr/cache-challenge/.

Contact :

Julia Smith

Finch Media

julia@finchmedia.net