



Société Française de Chémoinformatique



Admin

Accueil

Appel à communications et posters

Dates

Comité de programme

Programme

Posters

Assister à SFCi '13

Contact

Programme

Pré-Programme des Journées de la Société Française de Chémoinformatique 2013

<http://sfci2013.loria.fr/>

10 et 11 octobre 2013

Inria Nancy Grand Est — LORIA

Les journées se déroulent dans l'amphithéâtre du centre Inria, bâtiment C.

- Jeudi 10 octobre 2013
- 10h – 12h30
Réunion du GDR de chémoinformatique
- 12h30 – 13h45
Pause Déjeuner
- 13h45 – 14h
Ouverture et présentation générale des journées de la SFCi
- Session 1 : Relations structure-activité et conception de ligands
- 14h – 15h
Présentation invitée : **Luc Morin-Allory**
Espace chimique ; Mythe(s) ou réalité(s)
- 15h – 15h20
Developments for a Novel Inverse Docking Method

- R. Vasseur, S. Baud, L.A. Steffanel, X. Vigouroux, L. Martiny, M. Krajecki, M. Dauchez (Reims — Echirolles)
- 15h20 – 15h40
Exploring novel targets for anti-malarial chemotherapy: ligand-based approaches for hit identification
Dominique Douguet, Emilie Pihan, Roberto Delgadillo, Maryse Lebrun, Michelle Tonkin and Martin Boulanger (Valbonne — Montpellier — Victoria)
 - 15h40 – 16h
Computer-aided design of new antithrombotic agents
T. Khristova, P. Polishchuk, A. Krys'ko, G. Samoylenko, O. Krys'ko, T. Kabanova, V. Kuzmin, S. Andronati, and A. Varnek (Strasbourg — Odessa)
 - 16h – 16h15
Pause café
 - Session 2 : Méthodes symboliques en chémoinformatique
 - 16h15 – 17h
Présentation invitée : **Alain Krief** (Namur)
The “hook” concept: Matching words to visual perceptions
 - 17h – 17h20
A new hypergraph molecular representation
Benoît Gaüzère, Luc Brun and Didier Villemin (Caen)
 - 17h20 – 17h40
Plant phenolic metabolism pathway: modeling ligand/cytochrome P450 interactions involved in lignin biosynthesis
Gabriella Jonasson, Hugues Renault, Frédéric Bihel, Martine Schmitt, Richard Sibout, Danièle Werck-Reichhart et François André (Saclay — Strasbourg — Versailles)
 - 17h40 – 18h
MobyLe: resource integration as a mean to federate communities
Pierre Tuffery (Paris)
 - 18h – 18h05
Petite pause.
 - 18h05 – 19h05
Table ronde: « La chémoinformatique est-elle interdisciplinaire ? », animée par **Alain Krief** (Namur) et **Claude Laurenço** (Montpellier)
 - 19h05 – 20h05
Assemblée générale de la SFCi
 - 20h05 – 22h
Séance posters et buffet
Apéritif dînatoire dans la « rue » avec quelques notes chémo-musicales !
 - Vendredi 11 octobre
 - Session 3 : Fouille de données (Data Mining) et chémoinformatique
 - 9h – 09h20
Comparing chemical fingerprints for ecotoxicology
Leander Schietgat, Bertrand Cuissart, Alban Lepailleur, Kurt De Grave, Bruno Crémilleux,

- Ronan Bureau and Jan Ramon (Leuven — Caen)
- 9h20 – 9h40
Relational Machine Learning for Understanding Drug Side-Effect Profiles
Emmanuel Bresso, Renaud Grisoni, Gino Marchetti, Arnaud Sinan Karaboga, Michel Souchet, Marie-Dominique Devignes and Malika Smail-Tabbone (Nancy)
 - 9h40 – 10h
Chiral Kernel: Taking into account stereoisomerism
Pierre-Anthony Grenier, Luc Brun and Didier Villemin (Caen)
 - 10h – 10h20
Data mining on protein Kinase inhibitors. c-Met as a test case
Yasmine Asses-Marcuola, Aleksey Buzmakov, Bernard Maigret and Amedeo Napoli (Nancy)
 - 10h20 – 10h40
Pause café
 - Session 4 : Interactions protéines-protéines et polypharmacologie
 - 10h40 – 11h25
Présentation invitée : **Xavier Morelli** (Marseille)
2P2I3D: An Academic Diverse Chemical Library Dedicated to PPIs
 - 11h25 – 11h45
Toward a generation of drug-like inhibitors of protein-protein interactions
Mélaine Kuenemann, Céline M. Labbé, David Lagorce, Maria A. Miteva, Bruno O. Villoutreix, Olivier Sperandio (Paris — Lille)
 - 11h45 – 12h10
A novel and powerful preclinical compound profiling and drug repositioning tool: GES polypharmacology fingerprints
Violeta I. Perez-Nueno, Arnaud S. Karaboga, Michel Souchet and David W. Ritchie (Nancy)
 - 12h10 – 12h35
In-silico prediction of P450 cytochromes substrates through virtual screening and geometric modeling of active site access channels
Lydia Benkaidali, François André, François Maurel and Michel Petitjean (Paris — Saclay)
 - 12h36
Fin des journées SFCi 2013.

Dernières modifications le 7 octobre 2013

Institutions



© 2013 SFCi 2013



Responsive Theme Propulsé par
WordPress WordPress