



Société Française de Chémoinformatique

20 décembre 2017

Rejoignez notre [groupe sur linkedin](#) !

Cette dernière lettre de 2017 est pour moi l'occasion de revenir sur les événements marquants de l'année et pour faire un point sur les actions de l'année à venir.

Je vous souhaite à toutes et tous de très belles fêtes de fin d'année.

LA SFCI fête ses 10 années d'existence

Depuis dix ans, le SFCi est animée par les échanges scientifiques et stratégiques entre une centaine de membres actifs, dans une ambiance cordiale et sous l'impulsion de ses présidents successifs, Luc Morrin- Allory, Bruno Villoutreix et Ronan Bureau et moi-même.

La SFCi a organisé ses journées scientifiques aux quatre coins de la France et a participé aux 5 éditions de l'école d'été de chémoinformatique de Strasbourg co-organisées par Alexandre Varneck et Didier Rognan.

LES JOURNEES DE LA SOCIETE - SFCi 2017

Les 8^{es} journées de la Société Française de Chémoinformatique ont rassemblé une centaine de participants à Orléans autour [de 4 conférences plénières, 12 communications orales et 17 posters](#).

Les conférences ont donné un aperçu des problématiques actuelles, et de la manière de les aborder dans le monde académique et dans l'industrie. P Ducrot, des laboratoires Servier, a exposé la stratégie de recherche avec objectifs multiples en drug design. H de Winter, de l'Université de Antwerp, a exposé le concept de spectrophore, un descripteur moléculaire calculé à partir de propriétés atomiques dans des structures 3D. D Hristozovm, d'Evotec, a montré comment la chémoinformatique peut, et pourra encore mieux à l'avenir, améliorer le drug design. M Montes a discuté des bonnes pratiques en benchmarking.

La parole a également été donnée aux jeunes chercheurs. **Hélène Gaspar**, lauréate du prix de thèse 2017, a exposé ses travaux sur l'apprentissage à l'aide de l'algorithme GTM (Generative Topographic mapping).

Trois jeunes chercheurs, étudiants en thèse ou en postdoc, ont été primés pour la présentation orale ou écrite de leurs travaux de recherche.

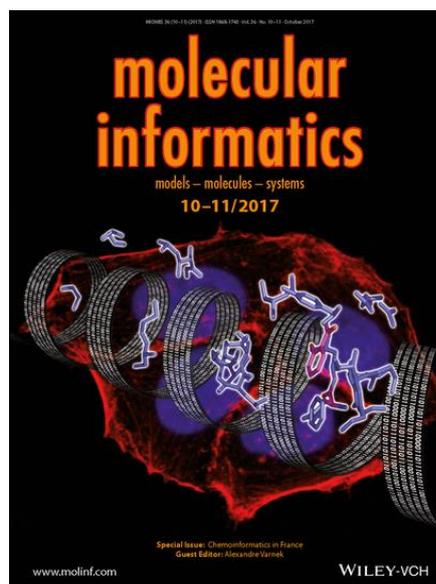
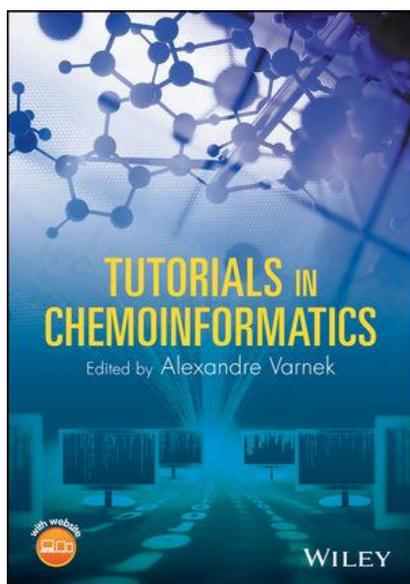
- La présentation de **Baptiste Canault** sur *MetaPredict, une plate-forme in silico de prédiction ADME-Tox*, a été récompensée du prix de la meilleure communication orale.
- La présentation de **Sonia Ziada** sur les *simulations de dynamique moléculaire pour la distinction de temps de résidence court et long d'inhibiteur de la kinase 8 dépendante de la cycline* a été récompensée du prix Groupe de Graphisme et Modélisation Moléculaire

(GGMM) de la meilleure affiche.

- La présentation de **Franck Da Silva** sur *l'archivage des interfaces protéine-protéine de structure 3D connue et des sites de liaison droguables correspondants*, a été récompensée du prix SFCi de la meilleure affiche.

Enfin, nous avons pu apprécier le charme et la gastronomie de la vallée de la Loire. Nous remercions Samia Aci-Sèche, Pascal Bonnet, Stéphane Bourg et Laurent Robin, pour l'organisation de cet évènement.

Les publications collectives



Un recueil des tutoriaux des écoles de chémoinformatique de Strasbourg est désormais disponible chez Wiley depuis août 2017 : **Tutorials in Chemoinformatics**, Alexandre Varnek (Editor) ISBN: 978-1-119-13796-2 488 pages

Une **issue spéciale France** a été publiée à l'automne 2017 dans **Molecular Informatics**. Elle comprend 17 articles de recherche.

PRIX ET SPONSORING SFCi

La SFCi reconduit le prix de thèse. Le prochain prix sera décerné en 2019. Il récompensera les travaux en chémoinformatique d'un docteur ayant soutenu entre le juin 2017 et mai 2019. Le lauréat sera invité à exposer ses travaux lors des 9es journées de la SFCi. Attention, seront éligibles uniquement les candidats ayant été membre de la société au moins un an durant leur thèse. Directeurs de thèse, informez vos doctorants : inscrivez-les en janvier 2018 !

La SFCi souhaite promouvoir la chémoinformatique en soutenant ses jeunes membres, en thèse ou en postdoc, pour la participation à un congrès ou une école thématique, ou encore pour un stage de recherche chez un collaborateur. Pour plus de détails, consulter le site de la SFCi.

MANIFESTATION, CONGRES ET ECOLES

CS3-2018 : La prochaine école d'été en chémoinformatique aura lieu du 25 au 29 Juin 2018

Cours, conférences plénières, session poster, présentations orales et tutoriaux pratiques.

Les sujets abordés seront :

- "Big Data" en Chimie
- *In silico* pharmacologie
- Modélisation des propriétés des matériaux
- "Text mining" en chimie
- Techniques de criblage virtuel
- "Deep learning"

Intervenants confirmés: J. Bajorath (Univ. Bonn, Germany), T. Langer (Univ. Vienna, Austria), G. Schneider (ETH, Zürich, Switzerland), C. Sotriffer (Univ. Wuerzburg, Germany), A. Tropsha (Univ. North Carolina, Chappel Hill, USA), I. Tetko (Helmholz Institute, Neuherberg, Germany), K. Funatsu (Univ. Tokyo, Japan), M. Rarey (Univ. Hamburg, Germany), X. Morelli (Univ. Marseil), I. Baskin (Univ. Moscow), H. Senderowits (Univ. Bar-Ilan, Israel) et O. Engkvist (ASTRAZENECA).

Une pré-conférence "Crash course in Chemoinformatics" pour les participants débutants sera organisée le 25 Juin de 9:00 à 16:00.

La langue de la conférence est l'anglais.

Inscriptions et détails sont disponibles à cette adresse: <http://infochim.u-strasbg.fr/spip.php?rubrique221>

ADHESION 2018

L'adhésion à la société est faite par année civile.

La cotisation annuelle est de 20 Euros. Les étudiants en thèse bénéficient d'un demi-tarif. L'adhésion est gratuite pour les étudiants en master.

L'inscription dans l'annuaire implique d'avoir acquitté sa cotisation avant le 31 avril 2018.

L'adhésion au groupe LinkedIn de la SFCi est libre.

Vous avez une annonce à faire passer :

Vous l'envoyez à : ekellen@unistra.fr

Merci d'envoyer un message simple avec :

Le nom de la conférence, La date et le lieu

Ou

Le type de poste, Le Laboratoire d'accueil, ville, pays

Et de joindre l'adresse d'un site WEB ou un document pdf