

Reims, le 11 mai 2020

## COMMUNIQUÉ DE PRESSE

**Objet : Face au COVID-19, l'ICMR porte le projet HT-Covid visant à identifier grâce au screening virtuel massif ultra large et à très haut débit, des molécules susceptibles d'inhiber le virus SARS CoV-2.**

Contact presse :

Marie Odette VICTOR  
Directrice de la Communication  
Université de Reims  
Champagne-Ardenne  
Tél. : 03 26 91 39 41

Face au COVID-19, la recherche se mobilise en des temps records. C'est ainsi que le projet HT-Covid " Screening optimisé à très haut débit pour le développement de candidats médicaments antiviraux ciblant SARSCoV-2 porté par le Pr. Jean-Hugues Renault, directeur de l'UMR ICMR (CNRS/URCA) a été déposé fin mars et retenu par l'ANR.

Ce projet a pour objectif de développer une approche à très haut débit, originale et intégrée, reposant sur de l'arrimage moléculaire par criblages directs et inversés, pour une évaluation rapide et efficace de différentes bases de données d'espaces chimiques très larges sur des cibles médicamenteuses pertinentes du SRAS CoV-2, afin de trouver rapidement de petites molécules antivirales comme candidats médicaments.

A l'aide de la performance des supercalculateurs actuels - la puissance de calcul nécessaire à la simulation est notamment permise grâce aux infrastructures nationales du réseau GENCI dont le supercalculateur ROMEO de l'URCA, l'idée est de tester 1,5 milliard de molécules issues d'espaces chimiques virtuels (les molécules sont conçues par intelligence artificielle) ou réels (les molécules existent et peuvent être naturelles ou synthétiques) pour identifier les structures chimiques susceptibles d'avoir une activité antivirale contre le virus SARS-CoV-2 (COVID-19).

« L'originalité de notre approche "virtuelle" est de coupler une échelle ultra-large de criblage avec les connaissances du virus de biologistes et de médecins. Puis de synthétiser, purifier et tester "en vrai" les candidats potentiels », explique Jean-Hugues Renault. Cette étude croisée des résultats des deux approches permettra d'obtenir une sélection de cinq cents candidats pour le passage vers le monde réel et la fabrication des molécules et leur évaluation biologique.

A l'heure actuelle, plus d'un milliard de structures ont déjà été testées et le temps de l'analyse de la quantité colossale des données est arrivé. Des développements méthodologiques ont également été réalisés et ont permis entre autre de fiabiliser le processus d'automatisation des calculs et de réduire considérablement les temps de calcul (d'un facteur supérieur à 100 !)

Afin de trouver les potentielles molécules ayant une activité sur le virus SARS-CoV-2, le projet s'appuie sur un réseau de chimistes, biophysiciens, biologistes, informaticiens et médecins, qui s'est structuré en des temps records en raison du contexte sanitaire.



Ce réseau transdisciplinaire regroupe: trois partenaires académiques du CNRS dans le domaine de la chimie et de la chémoinformatique (ICMR - UMR 7312 - Université de Reims Champagne-Ardenne / UMR 7200 - Université de Strasbourg / UMR 6230 - Université de Nantes), un partenaire académique du CNRS en biophysique-modélisation (MEDyC - UMR 7369, Université de Reims Champagne-Ardenne), un partenaire académique spécialisé en virologie humaine (CardioVir - EA 4684, Université de Reims Champagne-Ardenne), un service hospitalier des maladies infectieuses en région Grand Est (CHU Reims), et un partenaire académique dans le domaine de l'informatique (CReSTIC - EA 3804, Université de Reims Champagne-Ardenne). Ce projet implique également certains des principaux centres de calcul français (CC- IN2P3, GENCI, ROMEO HP Center, et probablement à venir le supercalculateur Jean Zay et le CEPP – Center for Excellence in Parallel Programming - Atos) permettant l'accès à plus de 150 000 processeurs et un stockage de données de l'ordre de 2 Po ; l'infrastructure nationale de recherche ChemBioFrance permettant d'accéder à la chimiothèque nationale ; la plateforme de criblage haut débit AD2P (IBISA, Marseille) déjà opérationnelle sur les cibles SRAS-CoV et enfin la plateforme Chem-Symbiose (IBISA, Nantes) pour la synthèse des candidats médicaments.

Les données produites par le projet HT-Covid pourront être en accès libre.

Ce projet est notamment financé par le CNRS ainsi que la région Grand Est.

---

L'Institut de Chimie Moléculaire de Reims (ICMR) est une unité mixte de recherche de l'université de Reims Champagne-Ardenne associée au CNRS depuis sa création en 2008 et rattachée à l'Institut de Chimie. Ses personnels y mènent une activité de recherche fondamentale sur les différents aspects de son cœur de métier : la chimie moléculaire. Le projet d'unité se structure autour de questionnements originaux en matière de réactivité chimique, de caractérisation structurale ou de développements de procédés intensifiés associant les aspects de relations structures/fonctions, ce en lien avec les secteurs de la Chimie de Végétal, de la Santé, des Matériaux et des Nanosciences. En savoir plus: [www.univ-reims.fr/ICMR](http://www.univ-reims.fr/ICMR)

