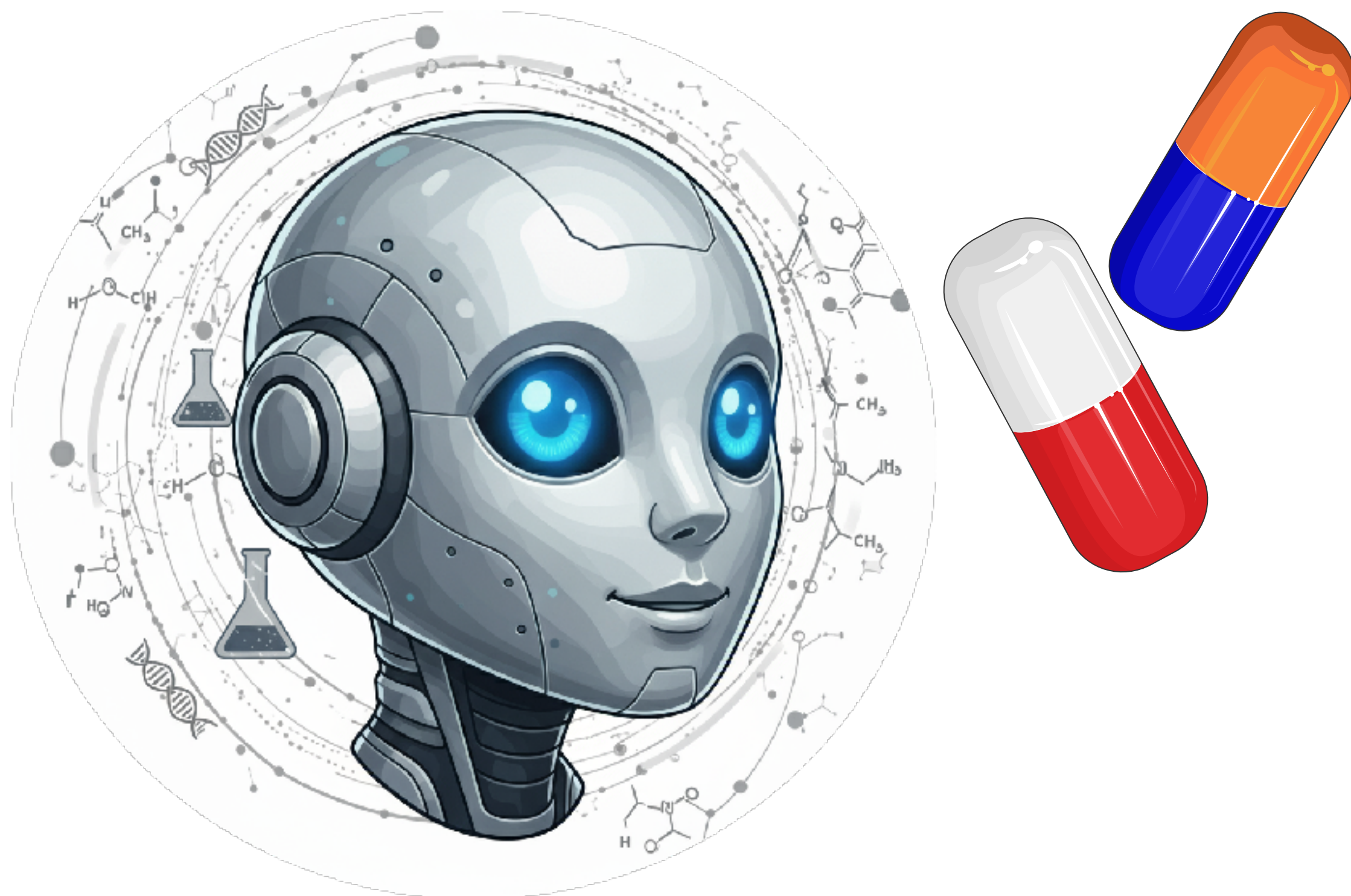


Intégration de l'IA dans le Pipeline de Découverte & de Développement de Médicaments:

Vers une mutation majeure dans la prochaine décennie?

Journée INSERM de réflexion – 23 janvier 2026

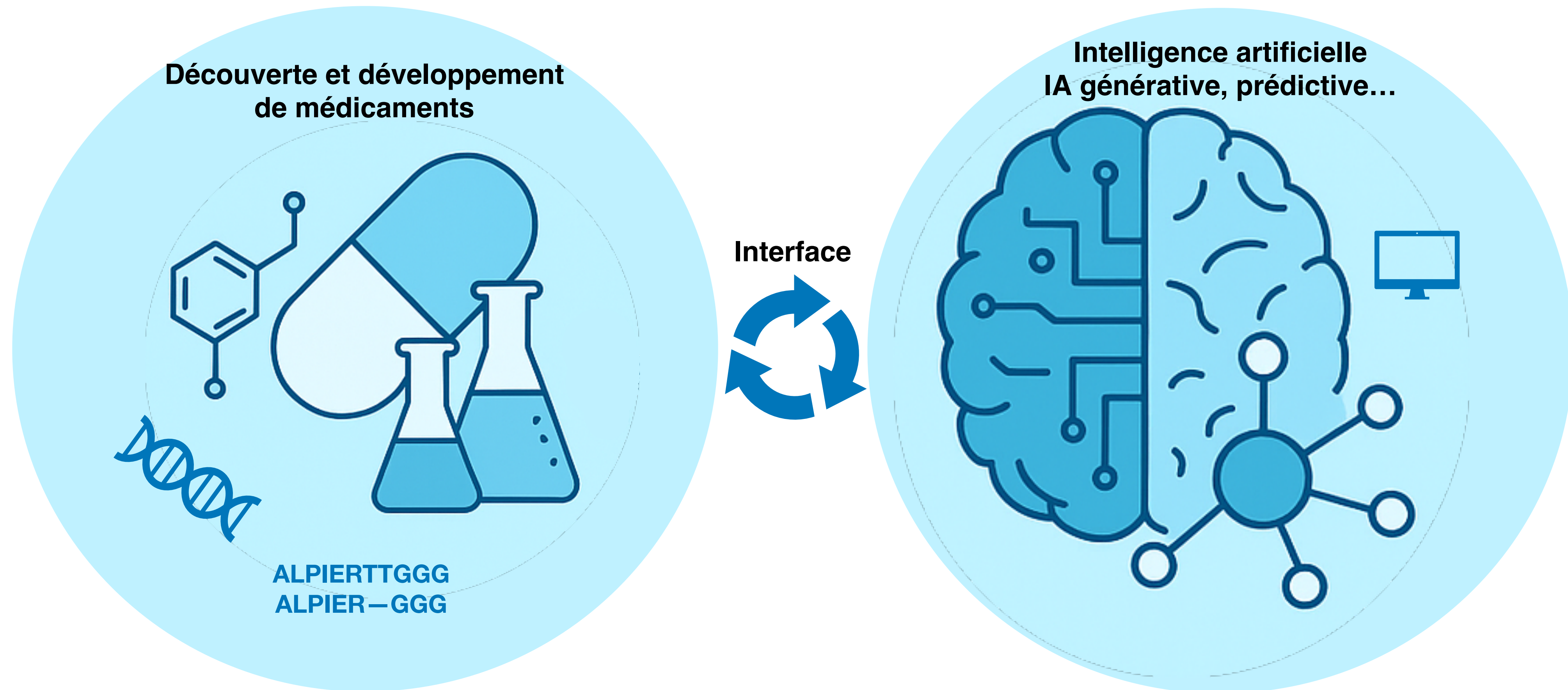


Bruno Villoutreix
(DR INSERM)
UMR 1141

48 boulevard Sérurier,
Hôpital Robert-Debré
75019, Paris, France



DD-IA France & monde académique: le paysage actuel - complexe et relativement fragmenté



Compétition internationale **forte** - concentration des **moyens États-Unis - Asie**.

Que va faire concrètement la France? Si nous poursuivons la **logique des 20 dernières années**, la France va **décrocher...**

“EU initiatives AI-Health” → avalanche de jargon **philosophico-technocratique...**

→ Création d'une **plateforme collaborative nationale d'IA pour la découverte et le développement de médicaments ou santé?**

Mais pas une nouvelle couche dans le millefeuille...

Fragmentation historique par **aires/agents thérapeutiques** → **silos** → focus: approches **agnostiques?**

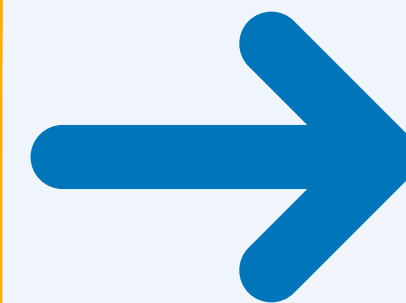
Un long chemin... vers un nouveau médicament

Agents thérapeutiques:

- “Small molecules” (~60-70%, 2025: 70%)
- “Biologics”

Actuellement, les approches IA/ML varient selon le type d'agent thérapeutique, mais une convergence est possible pour certains types de prédictions.

→ Développement “de modèles IA” pour la conception d'agents thérapeutiques variés?



Quelques chiffres:

- Durée : ~12-15 ans
- Coût : ~1 à 2 milliards d'euros
- Brevets: ~20 ans et ~12 ans pour AMM

“Small molecules & Biologics”:

- Malgré toutes les avancées technologiques/scientifiques, le **taux d'échec global en phases cliniques** reste élevé (autour de **85-90 % small molecules, 75-80% mAbs, proteins**).

📌 Echecs “small molecules”:

- ~40%: “Mauvaise cible” / absence d'efficacité clinique
- ~40%: Toxicité non-maîtrisable & ADME (Absorption, Distribution, Métabolisme, Excrétion, les 4 étapes clés de la PK) - PK/PD (Pharmacocinétique, ce que le corps fait au médicament / Pharmacodynamique, ce que le médicament fait sur l'organisme)
- ~10%: Raisons commerciales

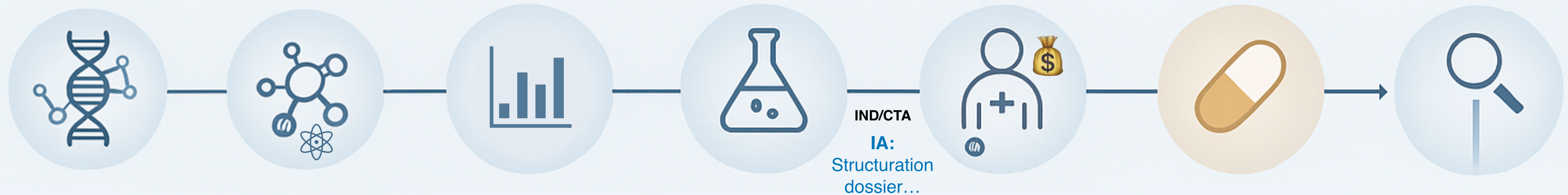
→ Travailler ensemble sur ces problèmes? Réunir les bonnes compétences/outils adaptés pour renforcer les brevets très en amont?

Singh et al., Front. Drug Discov., 2023 (~200,000 views)
Dowden & Munro, Nat Rev Drug Discov 2019
Sun et al., Acta Pharm Sin B. 2022
Makurvet Med. Drug Discov. 2021
Wellcome Trust report 2023
Hann & Keserú, Expert Opinion on Drug Discovery 2025
Oo et al., DDT 2025

Un long chemin... vers un nouveau médicament

Dans les livres : 
 Dans la vraie vie : 

Aujourd'hui, l'IA s'intègre étape par étape... **Demain**, l'IA au cœur, associée à des systèmes robotiques, potentiellement humanoïdes + des humains pour superviser?



Compréhension de la maladie & identification de "cibles/pathways"
 2-5 ans
IA:
 Priorisation des cibles via intégration multi-omiques (data)? Prédiction de la druggability...

Découverte de molécules actives
 1-3 ans
IA:
 Criblage virtuel intelligent, GenAI...
 Filtres ADMET...
 Zero-shot, Few-shot learning, Transfer learning...
 Priorisation tests biologiques...
 modèles hybrides IA-physique.

Optimisation
 1-3 ans
IA:
 Optimisation moléculaire multi-paramétrique, ADMET endpoints (data?), GenAI, Synthétisabilité...
 Recommandation expérimentale...
 modèles hybrides IA-physique

Développement préclinique
 1-3 ans
IA:
 Prédiction toxicité multi-organes, Toxicité off-target, Modélisation ADME / PK-PD, Sélection intelligente des candidats, Réduction / remplacement partiel modèles vivo, Recommandation, Intégration données...

Développement clinique
 6-8 ans
IA:
 Stratification des patients, automatisation du reporting.... données synthétiques, monitoring...

Mise sur le marché (AMM)
 ~1 an
IA:
 Préparation accélérée des dossiers...

Phase IV Suivi post-AMM
IA:
 Détection précoce des effets secondaires...

→ Définir des workflows indiquant qui fait quoi? Quoi implémenter? Ce qui doit être externalisé...

Le moment d'agir, c'est maintenant!



▶ Place aux **présentations** et aux **échanges**: comment **structurer** les communautés et **maximiser** nos chances de succès?



Répertoire d'outils et tutoriels pour le drug design

<https://www.youtube.com/@AI-Biotech-Studio>

<https://vls3d.com/>