

## Intérêt des méthodes *in silico* dans le développement pharmaceutique des substances d'origine naturelle

Dr. Mohamed Tahar DEROUICHE

Centre de Recherche en Sciences Pharmaceutiques CRSP, Ali Mendjeli, 25000 Constantine, Algeria

Email\* : [tahar.derouiche@univ-constantine3.dz](mailto:tahar.derouiche@univ-constantine3.dz)

Code C10

### Introduction & Objectifs :

Les méthodes bio-informatique ont pris une place prépondérante dans la conception de nouveaux médicaments, mais elles sont insuffisamment exploitées dans la valorisation pharmaceutique des substances d'origine naturelle

Le but de cette communication est d'identifier les principaux champs d'application de l'outil *in silico* dans la conception de produits de santé d'origine naturelle, particulièrement les phyto-médicaments.

Le but de ce travail est de répertorier les activités *in silico* applicables aux substances d'origine naturelle.

### Méthodologie (Matériel et méthodes):

Mini revue de la littérature via la base de données pubmed : avec les mots clés : natural drugs et *in silico*, portant sur les revues de la littérature des 5 dernières années.

### Résultats et Discussion :

L'analyse préliminaire a porté sur 216 publications dont l'analyse a permis de distinguer les résultats suivants relatifs aux domaines d'application de l'*in silico* dans le développement pharmaceutique des substances d'origine naturelle :

- L'identification des métabolites actifs.
- proposition d'indication.
- élucidation du mécanisme d'action.
- évaluation du profil toxicologique.
- prédiction de la pharmacocinétique.

### Conclusion :

L'outil *in silico* est irremplaçable dans la valorisation pharmaceutique des substances naturelles

**Mots clés:** produits naturels de santé, *in silico*, développement pharmaceutique.

### Références bibliographiques

1. Chen Y, Kirchmair J. Cheminformatics in Natural Product-based Drug Discovery. Mol Inform. 2020 Dec; 39(12)
2. Fang J, Liu C, Wang Q, Lin P, Cheng F. *In silico* polypharmacology of natural products. Brief Bioinform. 2018 Nov 27;19(6):1153-1171
3. Yi F, Li L, Xu LJ, Meng H, Dong YM, Liu HB, Xiao PG. *In silico* approach in reveal traditional medicine plants pharmacological material basis. Chin Med. 2018 Jun 19;13:33
4. Peng Y, Cheng Z, Xie F. Evaluation of Pharmacokinetic Drug-Drug Interactions: A Review of the Mechanisms, *In Vitro* and *In Silico* Approaches. Metabolites. 2021 Jan 27;11(2):7



CHAIRMAN OF THE CONGRESS  
Dr. Hanene ZATER


