

Rapport de Réunion 4 DeepLig&Target

Date : 12/06/2025 ----- 18h -19h

Participants : Mike MAILLASSON, Ayad HALADI, Mohamed BA

1. Validation des molécules

Avant d'engager tout achat de composés chimiques, des validations virtuelles systématiques seront réalisées (docking, scoring, etc.).

2. Reprise du travail sur Sarah

Reprise des travaux autour de Sarah par Mohamed

3. Réorganisation du dépôt Git

Nettoyage, réorganisation ou remise à zéro du dépôt Git pour refléter la nouvelle architecture de projet et assurer une meilleure collaboration.

4. Déploiement sur Glicid

Déploiement des outils de screening et de modélisation sur la plateforme Glicid.

5. Campagne de tests

Lancement d'une série de tests fonctionnels et de validation croisée sur les outils et prédictions générées.

6. Organisation de la structure

Commencer à penser à la structuration de la société : modèle économique, statuts, rôles des membres, etc.

7. Démarchage

Mise en place d'une stratégie de prospection (clients, partenaires, laboratoires).

8. Répartition des tâches

Mike : Chargé du projet SAR (Structure-Activity Relationship).

Ayad : En charge du projet Théo et de la problématique des off-targets.

9. Proze – Amélioration & ciblage

Améliorer le modèle PROZE. Effectuer un ciblage de domaine pour voir si la poche identifiée est conservée dans des protéines homologues.

10. AlphaFold

Mise à jour vers la dernière version d'AlphaFold pour tirer parti des dernières structures disponibles.

11. Optimisation des calculs PROZE

Multiprocessing en local pour accélérer les runs de génération et d'évaluation de ligands via PROZE.

12. Alignement structurel & rigidité moléculaire

Réaliser un alignement structurel des cibles ou homologues. Ajouter un calcul de rigidité moléculaire pour mieux évaluer la pertinence des résultats de docking.

Prochaines étapes

- Planifier une session dédiée à la structuration de la société.
- Lancer les premières validations virtuelles.
- Organiser une réunion de suivi sous 1 à 2 semaines.
- Faire des séances de co-working de 2h à 3h