

Cédric Bouysset

DOCTEUR EN CHIMIE · CHIMIE COMPUTATIONNELLE

Chémoïnformatique · Modélisation Moléculaire · Machine Learning

☎ (+33)6 11 99 27 73 | ✉ cedric@bouysset.net | 🌐 cedric.bouysset.net

🐱 cbouy | 📺 cedric-bouysset | 🐦 @cedricbouysset



Expérience

Académique

Thèse de Doctorat en Chimie

Institut de Chimie de Nice

UNIVERSITÉ CÔTE D'AZUR, FRANCE

2018 – 2021

- Bases Moléculaires de la Perception Chimiosensorielle
- Dirigée par Dr. Sébastien FIORUCCI & Pr. Serge ANTONCZAK
- Compétences : Chémoïnformatique, Modélisation Moléculaire, Machine-Learning, Programmation, RCPG chémosensoriel

Stage

Institut de Chimie de Nice

UNIVERSITÉ CÔTE D'AZUR, FRANCE

Février – Juillet 2018

- Développement de modèles QSAR pour la prédiction de propriétés olfactives et gustatives de molécules chez l'homme et l'insecte
- Encadré par Dr. S. FIORUCCI

Stage

Institut de Science et d'Ingénierie Supramoléculaires

UNIVERSITÉ DE STRASBOURG, FRANCE

Mars – Juin 2017

- Automatisation de calculs d'énergie libre de liaison
- Application à un moteur moléculaire, la myosine
- Encadré par Dr. M. CECCHINI

Stage

Institut de Chimie de Nice

UNIVERSITÉ CÔTE D'AZUR, FRANCE

Juin 2016

- Modélisation par homologie des récepteurs au goût amer
- Encadré par Dr. S. FIORUCCI

Professionnelle

Participant Google Summer of Code

MDAnalysis

TÉLÉTRAVAIL

Juin – Août 2020

Développeur en charge du projet d'interopérabilité entre les modules MDAnalysis et RDKit :

- Conversion entre les objets Python de MDAnalysis et RDKit
- Exploitation des fonctionnalités RDKit (requêtes SMARTS, calcul de descripteurs moléculaires... etc.) directement depuis MDAnalysis.

Technicien

Institut de Science et d'Ingénierie Supramoléculaires

STRASBOURG, FRANCE

Juillet – Août 2017

- Développement de workflows de chimie computationnelle pour le criblage virtuel.

Auxiliaire d'été

Banques

MONACO

2012 – 2016

- Guichetier, opérateur de saisie
- Compagnie Monégasque de Banque, BNP Paribas Wealth Management, LCL Banque et Assurance

Éducation

Master de Chémoïnformatique

France

UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

2016 – 2018

Mention Bien

Compétences en chimie computationnelle : criblage virtuel ligand-based et structure-based, modélisation moléculaire, chimiothèque

Licence de Chimie

France

UNIVERSITÉ DE NICE SOPHIA ANTIPOLIS

2013 – 2016

Mention Bien

Première Année des Études de Santé

France

UNIVERSITÉ DE NICE SOPHIA ANTIPOLIS

2011 – 2013

Compétences

Chimie Computationnelle

Chémoïnformatique

RDKit, ChemAxon

Modélisation Moléculaire

Amber, Modeller, AutoDock, PLANTS

Visualisation

ChimeraX, PyMOL, Blender, VMD

Data Science

Analyse de données

pandas, MDAnalysis, KNIME

Machine Learning

scikit-Learn, KNIME, Weka

Informatique

Programmation

Python, JavaScript, Bash, C, PHP

Web-Frontend

Bootstrap, Sphinx, Jekyll, Streamlit

Web-Backend

Django, Celery

Base de Données

PostgreSQL, SQLite

Génie Logiciel

Git, GitHub Actions

Prix & Distinctions

Déc. 2019	Lauréat du prix d'excellence , Université Côte D'Azur	<i>Nice, France</i>
Nov. 2019	Prix de la meilleure communication orale , 9 ^e journées de la Société Française de Chémoïnformatique (SFCi)	<i>Paris, France</i>
Sep. 2019	Lauréat de la bourse GEN FOUNDATION , récompense les étudiants et chercheurs en sciences naturelles	<i>Londres, Royaume-Uni</i>
Jul. 2019	Bourse de déplacement , XXIX ^{ème} rencontre ECRO	<i>Trieste, Italie</i>
Mar. 2019	Prix du meilleur poster , UCA Complex Days, Académie d'Excellence "Systèmes Complexes"	<i>Nice, France</i>
Déc. 2018	Lauréat de la bourse GIRACT , 9 ^{ème} bourse européenne pour les doctorants de première année sur la recherche en arômes et parfums	<i>Genève, Suisse</i>
Oct. 2018	Bourse ministérielle , Ministère français de l'Enseignement supérieur et de la Recherche	<i>Nice, France</i>

Publications

Premier auteur :

- 5 FUNCTIONAL MOLECULAR SWITCHES OF MAMMALIAN G PROTEIN-COUPLED BITTER-TASTE RECEPTORS
Topin J., Bouysset C., Pacalon J., Kim Y., Rhyu M., Fiorucci S. & Golebiowski J. [2021](#)
Cell. Mol. Life Sci.
- 4 PROLIF : A LIBRARY TO ENCODE MOLECULAR INTERACTIONS AS FINGERPRINTS
Bouysset C. & Fiorucci S. [2021](#)
J. Cheminformatics
- 3 REVERSE CHEMICAL ECOLOGY IN A MOTH : MACHINE LEARNING ON ODORANT RECEPTORS IDENTIFIES NEW BEHAVIORALLY ACTIVE AGONISTS
Caballero-Vidal G., Bouysset C., Gévar J., Mbouzi H., Nara C., Delaroche J., Golebiowski J., Montagné N., Fiorucci S. & Jacquin-Joly E. [2021](#)
Cell. Mol. Life Sci.
- 2 NOVEL SCAFFOLD OF NATURAL COMPOUND ELICITING SWEET TASTE REVEALED BY MACHINE LEARNING
Bouysset C., Belloir C., Antonczak S., Briand L. & Fiorucci S. [2020](#)
Food Chem.
- 1 MACHINE LEARNING DECODES CHEMICAL FEATURES TO IDENTIFY NOVEL AGONISTS OF A MOTH ODORANT RECEPTOR
Caballero-Vidal G., Bouysset C., Grunig H., Fiorucci S., Montagné N., Golebiowski J. & Jacquin-Joly E. [2020](#)
Sci. Rep.

Autres publications :

- 3 RECENT SMELL LOSS IS THE BEST PREDICTOR OF COVID-19 AMONG INDIVIDUALS WITH RECENT RESPIRATORY SYMPTOMS
Gerkin R. C. et 128 collègues [2021](#)
Chem. Senses
- 2 MORE THAN SMELL—COVID-19 IS ASSOCIATED WITH SEVERE IMPAIRMENT OF SMELL, TASTE, AND CHEMESTHESIS
Parma V. et 121 collègues [2020](#)
Chem. Senses
- 1 METAL IONS ACTIVATE THE HUMAN TASTE RECEPTOR TAS2R7
Wang Y., Soohoo A. L., Lei W., Christensen C., Margolskee R. F., Bouysset C., Golebiowski J., Zhao H., Fiorucci S. & Jiang P. [2019](#)
Chem. Senses

Séminaires & Conférences

- | | | |
|-----------|--|-------------------------------|
| Oct. 2021 | 10th RDKit User Group Meeting , “Interactive visualization and filtering of small molecule datasets with mols2grid” | Webinaire |
| Oct. 2020 | 9th RDKit User Group Meeting , “From RDKit to the Universe and back” | Webinaire |
| Nov. 2019 | 9^e journées de la Société Française de Chémoinformatique (SFCi) , “Decoding sweet taste from chemical structures” | Paris, France |
| Avr. 2019 | Musée International de la Parfumerie (MIP) & Collège de l'Archet , “Un cerveau pour percevoir les odeurs et les saveurs” | Nice, France |
| Avr. 2019 | 21^{ème} conférence du Groupe de Graphisme et Modélisation Moléculaire (GGMM) , “Modèles numériques des relations structure-saveur” | Nice, France |

Posters

- | | | |
|-----------|--|-----------------------------------|
| Sep. 2021 | European Chemoreception Research Organization (ECRO) XXXIst Meeting , “Functional Molecular Switches of Mammalian G Protein-Coupled Bitter-Taste Receptors” | Cascais, Portugal |
| Mai 2021 | 16th Weurman Flavour Research Symposium , “Bitter-Taste Receptors : From Sequence to Structure” | Webinaire |
| Aoû. 2020 | International Symposium on Olfaction and Taste (ISOT) , “Bitter-Taste Receptors : From Sequence to Structure” | Webinaire |
| Nov. 2019 | Réunion annuelle GDR-03 , “Relations structure-fonction des récepteurs au goût amer” | Toulouse, France |
| Sep. 2019 | European Chemoreception Research Organization (ECRO) XXIXth Meeting , “Molecular insights into the structure-function relationships of bitter taste receptors” | Trieste, Italie |
| Avr. 2019 | 26^{ème} Journée de la Chimie PACA , “Modèle numérique des relations structure-saveur” | Nice, France |
| Mar. 2019 | 2^{ème} édition UCA Complex Days , “Modeling taste perception from chemical structures” | Nice, France |

Bénévolat

Logiciels open source

PLUS DE 300 CONTRIBUTIONS EN 2020

[GitHub](#)

2017-2021

Modules Python

[PyPI](#)

AUTEUR DE 2 LOGICIELS

2018-2021

- [mols2grid](#) : Librairie de visualisation interactive de chimiothèque
- [ProLIF](#) : Librairie de fingerprint d'interaction pour des complexes composés de ligands, protéines, ADN ou ARN issus de dynamique moléculaire, docking ou structures expérimentales

CONTRIBUTIONS RÉGULIÈRES

2020-2021

- [MDAnalysis](#) : Librairie d'analyse de trajectoires de dynamique moléculaire

Global Consortium for Chemosensory Research (GCCR)

[gcchemosensr.org](#)

DESIGN ET MAINTENANCE DU SITE WEB

2020-2021

Enseignement

2019 – 2021 **Sens chimiques**, cours et travaux pratiques

[Étudiants en Licence 1](#)

2018 – 2020 **Structure et représentation des molécules**, travaux dirigés

[Étudiants en Licence 1](#)

2018 – 2019 **Structure microscopique de la matière**, travaux pratiques

[Étudiants en Licence 1](#)

2019 – 2020 **Chimie en solution**, travaux dirigés

[Étudiants en Licence 2](#)

2019 – 2021 **De la Molécule aux Propriétés Macroscopiques**, travaux dirigés et travaux pratiques

[Étudiants en Licence 2](#)

Loisirs

Jeux vidéo Gestion et configuration de serveurs

Sport Badminton et snowboard

Divers

Nationalité Française

Âge 27 ans

Langues Français (langue maternelle), anglais (courant), italien (notions)