

Formation

Université Paris Cité – Doctorat en Bioinformatique	2023
Directeur: Dr Marc Baaden	
Sorbonne Université, Paris – Licence en Biologie & Master en Bioinformatique	2019

Expériences professionnelles

Assistant de recherche & Ingénieur de recherche 2019 – 2024

Laboratoire de Biochimie Théorique, IBPC · CNRS , Paris

- Auteur principal du premier article détaillé sur les simulations moléculaires interactives (IMS) [1], synthétisant des décennies de recherches
- Amélioration d'une interface de visualisation moléculaire 3D (Unity, C#) pour l'interaction et la visualisation en temps réel des études d'insertion de protéines dans des membranes [2, 3]
- Standardisation des workflows multi-threads (C++, C#) pour le contrôle et le suivi en temps réel des simulations, permettant un échange fluide de données et une analyse en direct des propriétés de l'état du système
- Développement d'algorithmes Python adaptant les modèles implicites tout-atomes à Martini3 en gros grain, permettant des simulations interactives avec des géométries membranaires courbées [3]
- Création d'un pipeline CI/CD (GitHub Actions, Docker) automatisant les versions du moteur de simulation, résolvant des problèmes de dépendances et améliorant l'accessibilité du logiciel

Stagiaire en conception de médicaments en bioinformatique Fev 2019 – Juin 2019

Équipe de bioinformatique et de biophysique, IMPMC · Sorbonne université , Paris

- Développement d'une méthode d'amarrage de peptides cycliques en combinant Autodock avec des simulations REMD dans GROMACS (en utilisant un supercalculateur national), et comparaison des résultats avec l'outil d'amarrage HADDOCK
- Conception manuelle de peptides cycliques avec UCSF-Chimera

Stagiaire en analyse structurale en bioinformatique Juillet 2018

Équipe de recherche en bioinformatique, ISYEB · Sorbonne université , Paris

- Optimisation d'une recherche de similarité protéique en réimplémentant l'algorithme de Bellman (Python) pour identifier le plus long chemin à travers des motifs communs, et en développant des algorithmes heuristiques pour un alignement plus rapide

Compétences

Programmation: Python3, C++, C#, Bash, C, HTML, CSS

Technologies: Git, CI/CD (GitHub Actions), Docker, Unity, GDB, LLDB, CMake, MongoDB

Langues: Français (natif), Anglais (maîtrisé), Mandarin (débutant)

Publications

- [1] André Lanrezac, Nicolas Férey, and Marc Baaden. "Wielding the power of interactive molecular simulations". *WIREs Computational Molecular Science* (July 2022). DOI:10.1002/wcms.1594.
- [2] André Lanrezac et al. "Fast and Interactive Positioning of Proteins within Membranes". *Algorithms* (Nov. 2022). DOI:10.3390/a15110415.
- [3] André Lanrezac and Marc Baaden. "UNILIPID, a Methodology for Energetically Accurate Prediction of Protein Insertion into Implicit Membranes of Arbitrary Shape". *Membranes* (Mar. 2023). DOI:10.3390/membranes13030362.
- [4] André Lanrezac, Nicolas Férey, and Marc Baaden. "Interactive Molecular Dynamics". *Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering*. Elsevier, 2023. DOI:10.1016/B978-0-12-821978-2.00115-X.