André Lanrezac

Bioinformaticien | Développeur scientifique

A https://lanzac.github.io

Paris, France

♀ github.com/lanzac☒ a.lanrezac@gmail.com

Formation

Doctorat en Bioinformatique - Université Paris Cité

2023

Supervisé par Marc Baaden

Licence en Biologie & Master en Bioinformatique - Sorbonne Université, Paris

2019

Expériences professionnelles

Assistant de recherche & Ingénieur de recherche

Nov 2021 - Juin 2024

Laboratoire de Biochimie Théorique, IBPC · CNRS , Paris

- Auteur principal d'un article de revue sur les simulations moléculaires interactives (IMS) [1], synthétisant les travaux de la communauté scientifique sur plusieurs décennies
- Améliorations des logiciels de visualisation moléculaire UnityMol (Unity, C#) et du moteur BioSpring (C++) pour des expériences en temps réel d'insertion de protéines dans une membrane analytique [2, 3]
- Développement de UNILIPID, méthode et outil Python pour adapter les paramètres lipide-protéine dans des membranes implicites, permettant d'étendre la représentation des membranes des modèles tout-atomes au gros-grain et de simuler des géométries membranaires courbes [3]
- Contribution à la maintenance et à la diffusion de BioSpring via la mise en place d'un pipeline CI/CD (GitHub Actions, Docker) automatisant les versions, résolvant des dépendances anciennes et facilitant l'accès au logiciel

Stagiaire en conception de médicaments en bioinformatique

Fev 2019 - Juin 2019

Bioinformatics Research Team, ISYEB \cdot Sorbonne université , Paris Supervisé par Dirk Stratmann

- Élaboration d'un workflow combinant AutoDock et simulations REMD (GROMACS) pour évaluer l'affinité et la stabilité de peptides cycliques, avec comparaison aux résultats HADDOCK pour optimiser les designs
- Conception manuelle de peptides cycliques avec UCSF-Chimera pour optimiser les séquences et structures ciblant des poches protéiques spécifiques

Stagiaire en analyse structurale en bioinformatique

Juillet 2018

Bioinformatics Research Team, ISYEB \cdot Sorbonne université , Paris Supervisé par Mathilde Carpentier

- Poursuite du développement de YAKUSA, outil de recherche rapide de similarité structurale basé sur les SHSPs (motifs structuraux communs à haut score)
- Ré-implémentation de l'algorithme de Bellman (Python) pour calculer le plus long chemin à travers les motifs partagés et optimiser la recherche de similarité
- Développement d'algorithmes heuristiques pour accélérer l'alignement structural et améliorer la vitesse d'appariement

Compétences

Programmation: Python, C++, C#, Bash, C, HTML, CSS **Logiciels & Frameworks:** Django, React, Unity, CMake, SQL

DevOps: Git, CI/CD (GitHub Actions), Docker

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.