

# André Lanrezac

Bioinformaticien | Développeur scientifique

📧 <https://lanzac.github.io>

📍 Paris, France

🔗 [github.com/lanzac](https://github.com/lanzac)

✉ [a.lanrezac@gmail.com](mailto:a.lanrezac@gmail.com)

## Formation

**Doctorat en Bioinformatique** - Université Paris Cité

2023

**Licence en Biologie** ⇒ **Master en Bioinformatique** - Sorbonne Université, Paris

2019

## Expériences professionnelles

### Assistant de recherche & Ingénieur de recherche

Nov 2019 - Juin 2024

Laboratoire de Biochimie Théorique, IBPC · CNRS, Paris

Supervisé par Dr. Marc Baaden

- Auteur principal d'un article de revue sur les simulations moléculaires interactives (IMS) [1]
- Extension et optimisation des logiciels de visualisation moléculaire UnityMol (Unity, C#) et du moteur BioSpring (C++) pour simuler l'insertion de protéines dans des membranes implicites (modèle analytique), avec interaction et supervision en temps réel des données de simulation [2, 3, 5]
- Développement d'UNILIPID, méthodologie multi-échelle pour décrire les interactions lipide-protéine dans des membranes implicites simples, doubles ou courbes, avec paramétrisation reproduisant des échelles expérimentales d'hydrophobicité [3]
- Mise en place de pipelines CI/CD (GitHub Actions, Docker), facilitant la maintenance et la diffusion de la suite interactive en open-source

### Stagiaire en conception de médicaments en bioinformatique

Fev 2019 - Juin 2019

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

Supervisé par Dr. Dirk Stratmann

- Développement d'un protocole automatisé couplant REMD (GROMACS) et docking moléculaire (AutoDock4/Vina) pour l'amarrage de peptides cycliques sur des poches allostériques protéiques.
- Mise en œuvre et validation du workflow sur un système modèle cristallisé (streptavidine-ligand cyclique), incluant échantillonnage conformationnel, clusterisation, docking massif et analyse RMSD/énergie.
- Design et évaluation de peptides cycliques allostériques ciblant la caspase-3, intégrant REMD, docking et premiers tests de flexibilité du récepteur (HADDOCK).

### Stagiaire en analyse structurale en bioinformatique

Juillet 2018

Atelier de bioinformatique (ABI), ISYEB · Sorbonne université, Paris

Supervisé par Dr. 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

<b>Programmation</b>	Python, C++, C# (Unity), Bash
<b>Bioinformatique</b>	VMD, GROMACS, AutoDock, HADDOCK, Chimera
<b>Web &amp; Data Viz</b>	Django (PostgreSQL), Plotly, HTML, CSS, Bootstrap 5
<b>Ingénierie logicielle &amp; CI/CD</b>	Git, GitHub Actions, Docker, pytest
<b>Langues</b>	Français (natif), Anglais (avancé), 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.
- 5 Laurent B, Lanrezac A, Santuz H, Férey N, Delalande O, Baaden M. "BioSpring: An elastic network framework for interactive exploration of macromolecular mechanics". Protein Science (April 2025). DOI:10.1002/pro.70130/