

Florent Henri René HÉDIN

Date de naissance : 28 Sept. 1988

Courrier électronique : florent.hedin@enpc.fr | work@fhedin.com | florent.hedin@inria.fr

Page personnelle : <https://fhedin.com>

Expérience professionnelle :

- Sept. 2017 – Déc. 2017** *Chercheur invité*, à l' "Institute for Pure & Applied Mathematics (IPAM)", University of California Los Angeles (UCLA), Californie, États-Unis.
Durant mon contrat post-doctoral au sein de l'école des ponts, j'ai participé pendant 3 mois au programme de recherche "[Complex High-Dimensional Energy Landscapes](#)", au sein de l'université UCLA à Los Angeles, États-Unis.
- Déc. 2016 – Nov. 2018** *Chercheur Post-Doctoral*, au sein de l'École des Ponts – ParisTech, CERMICS, France
"Implementation of the Generalized Parallel Replica (ParRep) algorithm"
Superviseur: [Prof. Tony Lelièvre](#).
- Oct. 2011 – Oct. 2016** *Doctorant*, Département de Chimie, Université de Bâle, Suisse :
"Development and Application of Accurate Molecular Mechanics Sampling Methods: From Atomic Clusters to Protein Tetramers"
Superviseur: [Prof. Markus MEUWLY](#).
- Mars 2011 – Aout. 2011** *Stage obligatoire de M2*, Département de Chimie, Université de Bâle, Suisse, sous tutelle de l'Université de Strasbourg :
"Protein-Protein interactions from atomistic simulations."
Superviseur: [Prof. Markus MEUWLY](#).
- Juin 2010 – Août 2010** *Stage facultatif entre M1 et M2*, Université de Strasbourg, Laboratoire MSM (UMR 7177): Modélisation et Simulations Moléculaires
"Molecular Dynamics and Simulations of Uranyl Complexes in ionic liquids, with the AMBER Molecular Dynamics Package."
Superviseur: [Prof. Georges WIPFF](#).

Éducation et Diplômes universitaires

- Septembre 2016** *Doctorat*, Département de Chimie, Université de Bâle (Suisse)
"Philosophisch-Naturwissenschaftliche Fakultät der Universität Basel ; Doktoratsexamen im Promotionsfach Chemie"
- Septembre 2011** *Master*, Université de Strasbourg
"Master Sciences, Technologie et Santé, Mention Chimie, spécialité Chemoinformatique" ; avec mention Assez Bien
- Juin 2009** *Licence*, Université de Picardie Jules Verne, Amiens
"Licence Sciences, Technologie et Santé, Mention Chimie" ; avec mention Bien
- Juin 2006** *Baccalauréat Général* ; Académie d'Amiens, Lycée de la Sainte-Famille
"Baccalauréat Général, Série Scientifique, Spécialité Physique-Chimie" ; avec mention Bien

Publications

- 2018** **Article, *J. Chem. Phys.*, Publication en cours**
“A new implementation of the Generalized Parallel Replica dynamics for the long time simulation of metastable biochemical systems”
Florent Hédin and Tony Lelièvre
- Septembre 2017** **Article, *Proc. Natl. Acad. Sci.*, Publication en cours**
“Molecular Dynamics Simulation of the Human Hemoglobin Tetramer: Box Size Matters!”
Krystel El Hage, Florent Hédin, Prashant K. Gupta, Markus Mewly, and Martin Karplus
- Août 2017** **Article, *J. Phys. Chem. B*, Publication en cours**
“Performance and Free Energy Estimation for Solvated Polypeptides and Proteins Using Partial Infinite Swapping”
Florent Hédin, Nuria Plattner, J. D. Doll, and Markus Mewly
- Juillet 2016** **Article, *J. Chem. Inf. Model.*, DOI: [10.1021/acs.jcim.6b00280](https://doi.org/10.1021/acs.jcim.6b00280)**
“A Toolkit to Fit Nonbonded Parameters from and for Condensed Phase Simulations”
Florent Hédin, Krystel El Hage, and Markus Mewly
- Janvier 2015** **Article, *J. Phys. Chem. B*, DOI: [10.1021/jp511701z](https://doi.org/10.1021/jp511701z)**
“Vibrational Relaxation and Energy Migration of N-methylacetamide in Water: The Role of Nonbonded Interactions.”
Pierre-André Cazade, Florent Hédin, Zhen-Hao Xu, and Markus Mewly
- Août 2014** **Article, *J. Chem. Theory Comput.*, DOI: [10.1021/ct500529w](https://doi.org/10.1021/ct500529w)**
“Spatial Averaging: Sampling Enhancement for Exploring Configurational Space of Atomic Clusters and Biomolecules.”
Florent Hédin, Nuria Plattner, J. D. Doll, and Markus Mewly

Participations à des conférences et ateliers : posters et présentations

- Mai 2018** **Présentations lors de l’atelier “7th Workshop on Parallel-in-Time methods”, Roscoff, Finistère, France**
“A new implementation of the Generalized Parallel Replica dynamics for the long time simulation of metastable biochemical systems.”
- Sept. – Déc. 2017** **Présentations lors du programme “Complex High-Dimensional Energy Landscapes”, IPAM, UCLA, U.S.A.**
“The Generalized ParRep algorithm: developing an OpenMM based implementation for studying biochemical systems” et “Benchmarking of the ParRep and AMS methods”
- Juin 2017** **Poster lors de l’atelier CECAM “Beyond Kds: New computational methods to address challenges in drug discovery”, Lausanne, Suisse**
“Generalized Parallel Replica algorithm : implementation and application to chemical and biochemical systems”
- Août 2016** **Poster lors de la conférence “Theory and applications of Computational Chemistry (TACC 2016)”, Seattle, U.S.A.**
“Partial Infinite Swapping: Implementation and Application to peptides and proteins in the Gas Phase and in Solution”

- Janvier 2016** **Poster lors de la conférence “6th Annual Meeting of the NCCR MUST”, Engelberg, Suisse**
 “A new toolkit for fitting forcefield parameters used for Permanent Multipoles molecular simulations”
- Septembre 2015** **Présentation lors de la conférence “Swiss Chemical Society Fall Meeting 2015”, Lausanne, Suisse**
 “Addressing the Rare Event Sampling problem with the PINS and SA-MC Methods : studying Structure and Dynamics of the Myoglobin protein”
- Janvier 2015** **Présentation et Poster lors de la conférence “5th Annual Meeting of the NCCR MUST”, Engelberg, Suisse**
 “A new toolkit for fitting forcefield parameters used for Permanent Multipoles molecular simulations”
- Septembre 2014** **Poster lors de la conférence “Swiss Chemical Society Fall Meeting 2014”, Zürich, Suisse**
 “A new toolkit for fitting forcefield parameters used for Permanent Multipoles molecular simulations”
- Septembre 2013** **Présentation lors de la conférence “Swiss Chemical Society Fall Meeting 2013”, Lausanne, Suisse**
 “Spatial averaging : enhancement of the sampling of the configuration space for atomic clusters and biomolecules”
- Octobre 2012** **Posters lors de l’atelier “Monte Carlo Methods in the Physical and Biological Sciences”, organisé par la “Brown University”, Providence, Rhode Island, U.S.A.**
 “Sampling rare events with spatial averaging: theory and applications” and “Ligand uptake in truncated hemoglobin: a Monte Carlo study”
- Septembre 2012** **Poster lors de la conférence “Swiss Chemical Society Fall Meeting 2012”, Zürich, Suisse**
 “Sampling rare events with spatial averaging: theory and applications”
- Juillet 2012** **Poster lors de la conférence “Energy Landscape Conference”, organisé par l’ “European Science Foundation”, Obergurgl, Autriche**
 “Sampling rare events with spatial averaging: theory and applications.”

Compétences en Informatique

Depuis le début de mon Master en 2009, j’ai acquis les compétences suivantes dans le domaine de l’informatique et du calcul scientifique:

- Systèmes d’exploitation : Connaissance des systèmes Microsoft Windows depuis XP ; connaissance en utilisation et administration des systèmes Linux et FreeBSD.
- Calcul scientifique : Expérience utilisateur avancée des suites logicielles de dynamique moléculaire AMBER, CHARMM, GROMACS, OPENMM ; expérience développeur pour CHARMM et OpenMM.
- Programmation : connaissance avancée de C, C++ (orienté objet, templates, standards 2011 et 2014, bibliothèque STL), JAVA, FORTRAN, Lua, Python. Connaissance basique de: Ocaml, Ruby.
- Programmation parallèle/HPC : connaissance avancée de MPI (dernier standard 3.1) et OpenMP ; pour les GPUs : connaissance de CUDA et OpenCL.
- Débogage, profilage et benchmarking : connaissance de GDB, GPROF et Scalasca.
- Scripts : connaissance avancée des langages de script Unix (bash, csh, zsh), et notions de : Perl, TCL.

- Programmation scientifique : notions de MATLAB, MAPLE et MATHEMATICA.
- Analyse de données : connaissance avancée de R.
- Machine learning : notions de base avec: Keras et TensorFlow.
- Visualisation : connaissance avancée de VMD et PyMOL (systèmes moléculaires) ; connaissance basique de ParaView.
- Virtualisation et cloud computing : connaissance de OpenStack, VirtualBox, virtualisation via QEMU-KVM ou Xen.
- Gestion de ressources sur clusters de calcul : connaissance de SLURM et Sun Grid Engine (SGE).
- Bases de données : connaissance de SQL ; expérience installation/administration pour : MySQL/MariaDB et SQLITE.
- Bureautique : connaissance des outils Microsoft Office ou équivalents libres; connaissance avancée de LaTeX.

Connaissance linguistiques

- Français langue maternelle.
- Anglais courant.
- Espagnol, niveau LV2 lycée.
- Notions d'Allemand.