

Docteur Fan WANG

LG2A, CNRS FRE 3517, UFR de Pharmacie,

Université de Picardie Jules Verne

1, rue des Louvels

80036 Amiens Cedex, France

E-mail : fan.wang@u-picardie.fr

fan.wang@q4md-forcefieldtools.org

Site web : <http://q4md-forcefieldtools.org/FW>

Numéro de téléphone : +33-6-2853-7733

Nationalité : Chinoise

Date de naissance : Août 1986

Situation actuelle

Chercheur associé au projet q4md-forcefieldtools

A la recherche d'une position dans le domaine académique (en chimie théorique et informatique, bio-informatique ou dans le calcul scientifique).

Education

Oct 2014 **Doctorat en Chimie Informatique et Théorique**

Titre : Développements informatiques et études structurales de complexes bioinorganiques par dynamique moléculaire

Manuscrit : <http://q4md-forcefieldtools.org/FW/Thesis>

Université de Picardie Jules Verne, Amiens, France

2010 **Master en Informatique** Université de Picardie Jules Verne

2008 **Licence en Informatique** Université de Picardie Jules Verne

2007 **Licence en Mathématiques** Université de Picardie Jules Verne

2005 **Licence un en Mathématiques**

Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, China

Compétences et réalisations

Logiciels de calcul scientifique et de modélisation moléculaire :

- Développement des outils PyRED (ou R.E.D. Python) et R.E.D. Server Development (<http://q4md-forcefieldtools.org/REDServer-Development>) pour la génération de champs de forces (Amber et Glycam).
- Optimisation du programme R.E.D. IV (langage de programmation Perl)
- Simulations de dynamique moléculaire avec les programmes pmemd et sander (AMBER)
- Visualisation de molécules (VMD, GaussView, Avogadro, PyMol)
- Chimie quantique (Gaussian, GAMESS, Firefly)
- Babel (conversion de format de fichier), Bkchem (dessin en deux dimensions)

Programmation et Systèmes d'exploitation :

- Développement avec des langages : Python, Perl, C/C++, Fortran, Java
- Développement Web : XHTML, PHP, JavaScript, MySQL, CSS
- Expérience avec les logiciels de mathématiques (Matlab, Scilab)
- Programmation parallèle MPI et OpenMP
- Scripts Shell (tcsh, bash, sed, awk)
- Installation et gestion de Linux sur stations de travail et grappe d'ordinateurs (administration, installation et compilation de programmes, gestionnaire de queue PBS)

Langues

Chinois	langue maternelle
Français	écrit, lu, parlé
Anglais	écrit, lu, parlé

Expérience de recherche

Oct 2011 - Nov 2014 :

LG2A, CNRS FRE 3517, UFR de Pharmacie, Université de Picardie Jules Verne

Doctorant, Superviseur : Professeur F.-Y. Dupradeau

- **Projet : Développement de champs de forces empiriques par une approche de programmation orientée objet et simulations de dynamique moléculaire de complexes bioinorganiques**
- **Projet international France-USA entre l'Université de Picardie Jules Verne et le Sanford Burnham Medical Research Institut, San Diego, USA**
- **Bourse du "Conseil Régional de Picardie" et du "Fonds Européen de Développement Régional"**

Jan 2010 - Aug 2010 :

Doonya Technologies, Lille, France - Université de Picardie Jules Verne

Master, Superviseur : Professeur A. Lapujade

- **Projet : Développement de l'application WebConf pour contrôler des conférences par Internet selon le protocole Voice Over Internet (VOIP Asterisk, QoS, PHP, Javascript, C/C++, Linux)**

Publications

- *Object oriented programming for Amber force fields: application to the study of bioinorganic complexes by molecular dynamics simulation*
F. Wang, J.-P. Becker, P. Cieplak, F.-Y. Dupradeau, en preparation.
- *β -hematin crystal formation: first insights from molecular dynamics of small clusters in water*
J.-P. Becker, F. Wang, P. Sonnet, F.-Y. Dupradeau, J. Am. Chem. Soc. submitted Jul 28, 2015.

- *Effects of Hypoxanthine Substitution in Peptide Nucleic Acids Targeting KRAS2 Oncogenic mRNA Molecules: Theory and Experiment*
J. M. Sanders, M. E. Wampole, C.-P. Chen, D. Sethi, A. Singh, F.-Y. Dupradeau, F. Wang, B. D. Gray, M. L. Thakur & E. Wickstrom, *J. Phys. Chem. B* **2013**, **117**, 11584-11595.

Communications

- *R.E.D. Python: Application of object oriented programming to charge derivation and force field library building for the Amber additive and non-additive force field models*
F. Wang, J.-P. Becker, P. Cieplak, F.-Y. Dupradeau, GGMM 2013 meeting (Groupe Graphisme et Modélisation Moléculaire), Ile d'Oléron, May 21 – 23, 2013.
- *R.E.D. Python: Object oriented programming for Amber force fields*
F. Wang, J.-P. Becker, P. Cieplak, F.-Y. Dupradeau, 247th American Chemical Society national meeting, Dallas, TX, March 16-20, 2014.

Programme, serveur web et tutorial

- *R.E.D. Server Development - Performing calculations with the PyRED program : Application to charge derivation, force field library building and force field parameter generation*
Fan Wang, [1] Jean-Paul Becker, [1] Piotr Cieplak, [2] François-Yves Dupradeau [1] FRE CNRS 3517 & UFR de Pharmacie, Université de Picardie - Jules Verne, rue des Louvels, Amiens, France
[2] Sanford | Burnham Medical Research Institute, 10901 North Torrey Pines Road, La Jolla, CA 92037, USA
<http://q4md-forcefieldtools.org/Tutorial/Tutorial-4.php>
<http://q4md-forcefieldtools.org/REDServer-Development>

Références

- **F.-Y. Dupradeau**, Professeur de chimie; LG2A, CNRS FRE 3517, UFR de Pharmacie, Université de Picardie Jules Verne
E-mail : fyd@u-picardie.fr, numéro de téléphone : +33-3-2282-7498
- **P. Cieplak**, Research Associate Professor; Sanford Burnham Medical Research Institut, San Diego, USA
E-mail : pcieplak@sanfordburnham.org, numéro de téléphone : +1-858-646-3100 x 3076
- **Y. Li**, Professeur d'informatique; UFR de Mathématiques et d'Informatique, Université de Picardie Jules Verne
E-mail : yu.li@u-picardie.fr, numéro de téléphone : +33-3-2282-7872