

Exploration moléculaire du vivant avec un jeu vidéo basé sur UnityMol

Sébastien Doutreligne, Philippe Derreumaux, Marc Baaden

Laboratoire de Biochimie Théorique (LBT) - CNRS UPR 9080
13 Rue Pierre et Marie Curie 75005 PARIS - France



<http://unitymol.sourceforge.net>

<https://twitter.com/unitymol>

Le logiciel UnityMol

Nous présentons UnityMol, une base logicielle pour développer des solutions de visualisation, analyse et exploration de données biologiques. Créé en 2009, une des originalités de UnityMol est son implémentation à travers un moteur de jeu vidéo. Nous connectons ce logiciel de visualisation à des simulations de dynamique moléculaire pour interagir directement avec les molécules que nous étudions. Cette manipulation apporte une nouvelle dimension très concrète et intuitive à l'exploration de la structure des biomolécules. Nous pouvons notamment observer et tester la résistance des liaisons dites hydrogènes formées lors du repliement de ces molécules.

UnityMol est gratuitement disponible sur unitymol.sourceforge.net et fonctionne sur les trois principaux systèmes d'exploitation: Windows, OS X et Linux.



UnityMol intègre les représentations standards que l'on retrouve dans ce type de logiciels: les structures secondaires et la surface des protéines. La mise au point de ce programme nous permet également de proposer des représentations innovantes pour des domaines spécifiques.

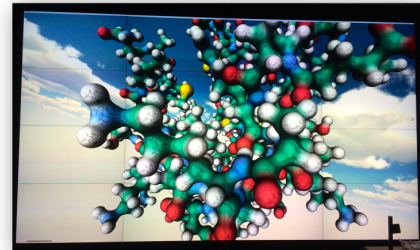
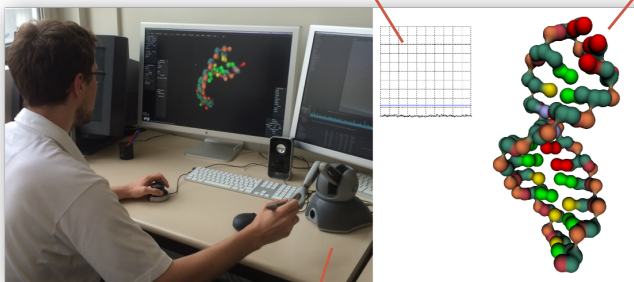


Photo du mur d'écran de la Maison de la Simulation à Saclay avec UnityMol en cours d'exécution.

Accès en temps-réel aux caractéristiques de la simulation.

Visualisation personnalisée pour les besoins de notre laboratoire.



Interaction avec la simulation permettant un retour immédiat à l'utilisateur.

Dispositifs de Réalité Virtuelle

Nous explorons les possibilités rendues accessibles par les nouveaux périphériques de Réalité Virtuelle comme le HTC Vive®, l'Oculus Rift® et le Leap Motion®. Nous visons également à tirer partie des dispositifs de type cave et murs d'écrans avec effet 3D. Nous développons des outils spécifiques à une approche immersive et interactive de l'étude des biomolécules.



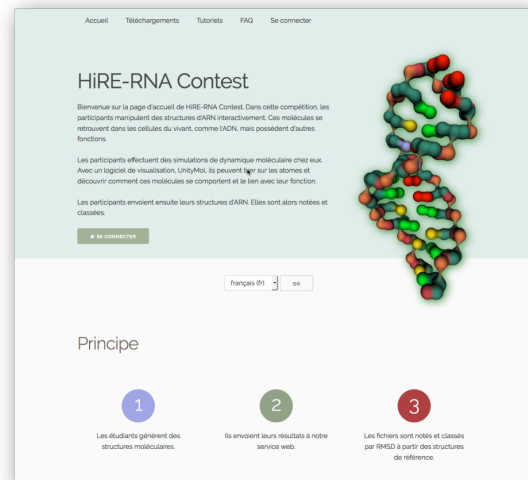
Image du casque de réalité virtuelle HTC Vive®.

HiRE-RNA Contest: UnityMol pour l'éducation

Nous couplons UnityMol avec les moteurs de simulation développés au sein de notre laboratoire pour des études structurales des molécules d'ADN, ARN et protéines. Une des applications possibles est l'enseignement. Entre mai 2015 et aujourd'hui, nous avons utilisé UnityMol avec des groupes d'étudiants de Licence en Biologie et en Bioinformatique à l'université Paris Diderot, ainsi que des lycéens et le grand public à travers un cours massif en ligne, soit un total de près de **400 personnes**. Ces expériences offrent un contact concret avec les simulations et leur fonctionnement. Durant quelques heures, les participants ont tenté de replier 4 molécules d'ARN à la structure connue. Les données ont été collectées et automatiquement évaluées via notre application web HiRE-RNA Contest.

Cette idée s'inscrit également dans la volonté de mener des recherches participatives qui mettent à profit **l'intelligence collective**. Les étudiants sont amenés à partager leurs expériences et à découvrir davantage sur les mécanismes moléculaires. Par ce biais, nous testons et validons nos choix techniques pour ensuite proposer un **espace d'expérimentation virtuel** pour la recherche.

<http://hirena.galaxy.ibpc.fr>



Laboratoire de Biochimie Théorique
CNRS UPR 9080, Université Paris VII - Paris Diderot
13 Rue Pierre et Marie Curie 75005 PARIS - France

PARIS
DIDEROT



Références

1. S. Pasquali and P. Derreumaux. HIRE-RNA: a high resolution coarse-grained energy model for RNA. *J. Phys. Chem. B*, 114(37):11957-11966, Sept. 2010.
2. T. Cragolini et al. Coarse-grained simulations of RNA and DNA duplexes. *J. Phys. Chem. B*, 117(27):8047-8060, 2013.
3. Z. Lv et al. Game on, science - how video game technology may help biologists tackle visualization challenges. *PLoS ONE*, 8(3):e57990, Mar. 2013.
4. S. Pérez, T. Tubiana, A. Imbert, and M. Baaden. Three-dimensional representations of complex carbohydrates and polysaccharides - Sweet UnityMol: A video game-based computer graphic software. *Glycobiology*, page cw1133, Dec. 2014.

Ce travail a bénéficié d'une aide de l'Etat gérée par l'Agence Nationale de la Recherche au titre du programme Investissements d'Avenir: GRAL (ANR SIMI 12- BS07-0017-01), ExaViz (ANR-11-MONU-003) et Dynamo (ANR-11-LABX-0011).