

Visualisation interactive pour cerner les structures et interactions (macro)moléculaires

X. Martinez, H. Santuz, M. Baaden

Laboratoire de Biochimie Théorique, CNRS UPR 9080, Institut de Biologie Physico-Chimique, Paris

Une plateforme de visualisation à la fois logicielle et matérielle est développée au sein du laboratoire de Biochimie Théorique (LBT) et de l'institut (IBPC), proposant de nouveaux dispositifs pour cerner les structures et interactions (macro)moléculaires.

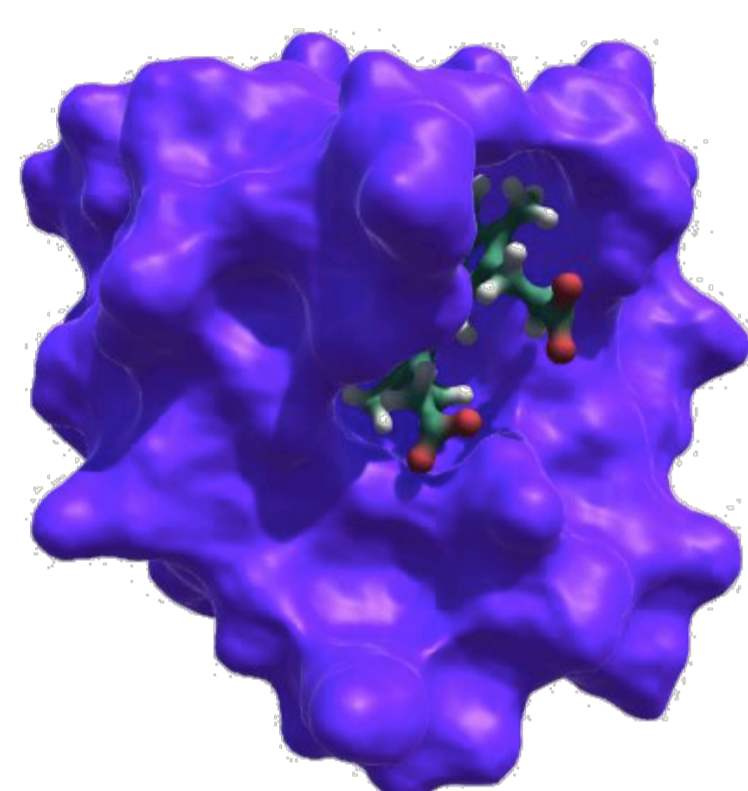
D'une part, il s'agit d'un outil de visualisation moléculaire, UnityMol, proposant un cadre logiciel afin de représenter efficacement les biomolécules. D'autre part, un mur d'images combiné à des casques de réalité virtuelle permettent de mieux visualiser ces dernières.

Combiner de nouvelles méthodes de visualisation avec des dispositifs stéréoscopiques tels que le mur d'images et les casques de réalité virtuelle est aujourd'hui un atout majeur dans la compréhension des systèmes étudiés, de plus en plus complexes et de grande taille.

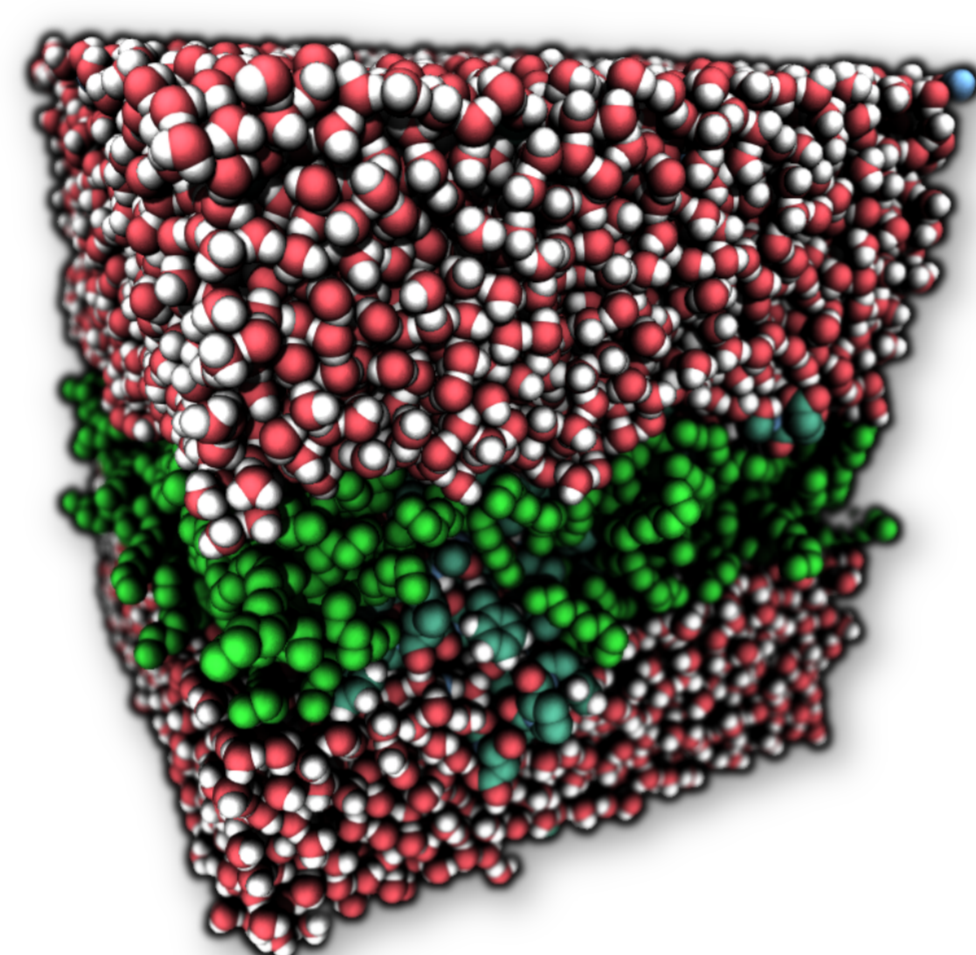
UnityMol

UnityMol propose un **cadre logiciel** pour représenter efficacement les biomolécules et y ajouter des briques de visualisation. L'utilisation du moteur de jeu **Unity3D** facilite le **prototypage** d'interfaces utilisateurs et de **rendus graphiques spécifiques** au domaine.

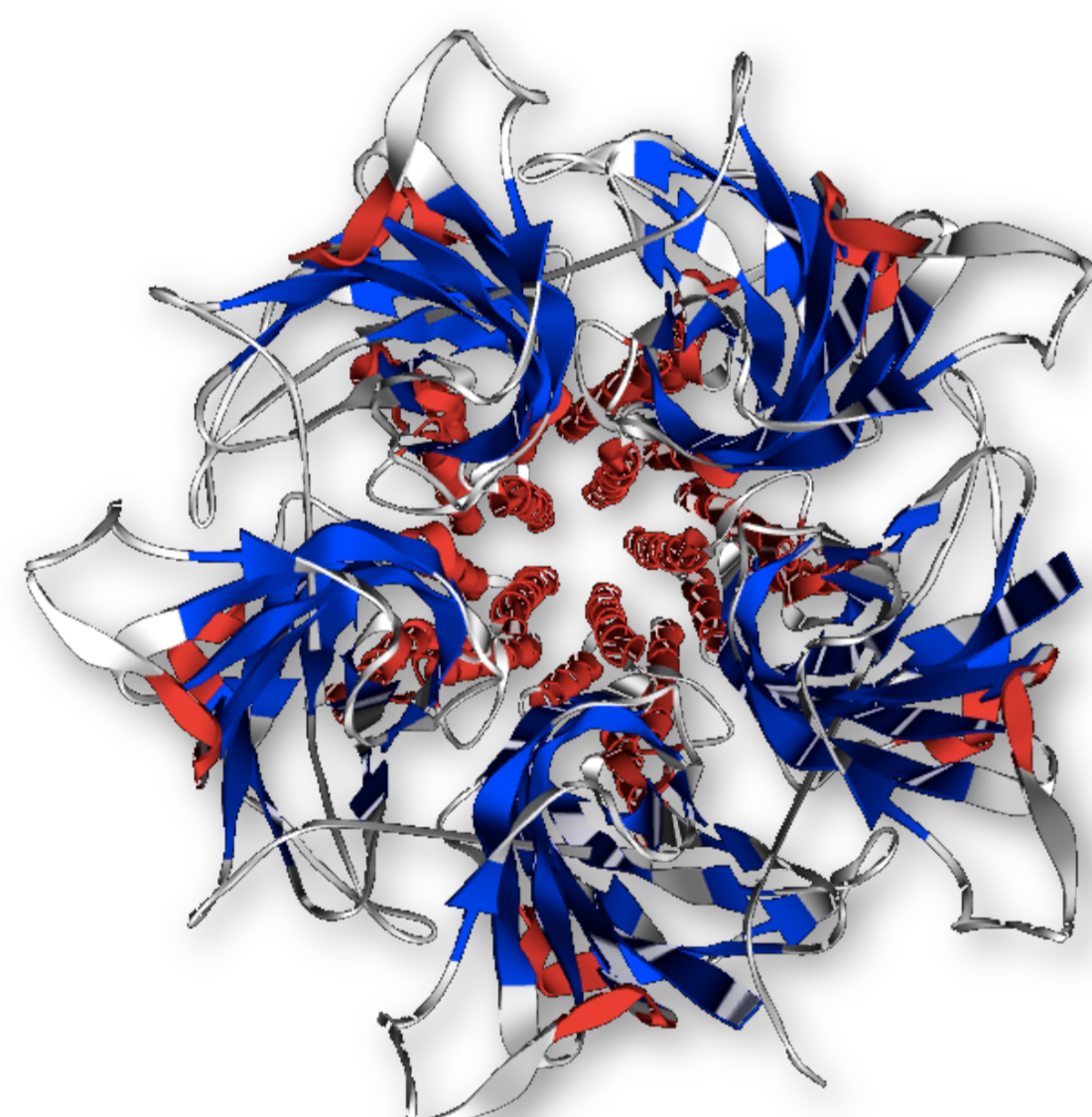
- Visualisation de molécules : **ADN/Sucres/Protéines/Lipides**
- Lecture de trajectoires : **Gromacs/AMBER/QMM/MARTINI**
- Interactive Molecular Dynamics (IMD)
- Rendu temps réel de haute qualité



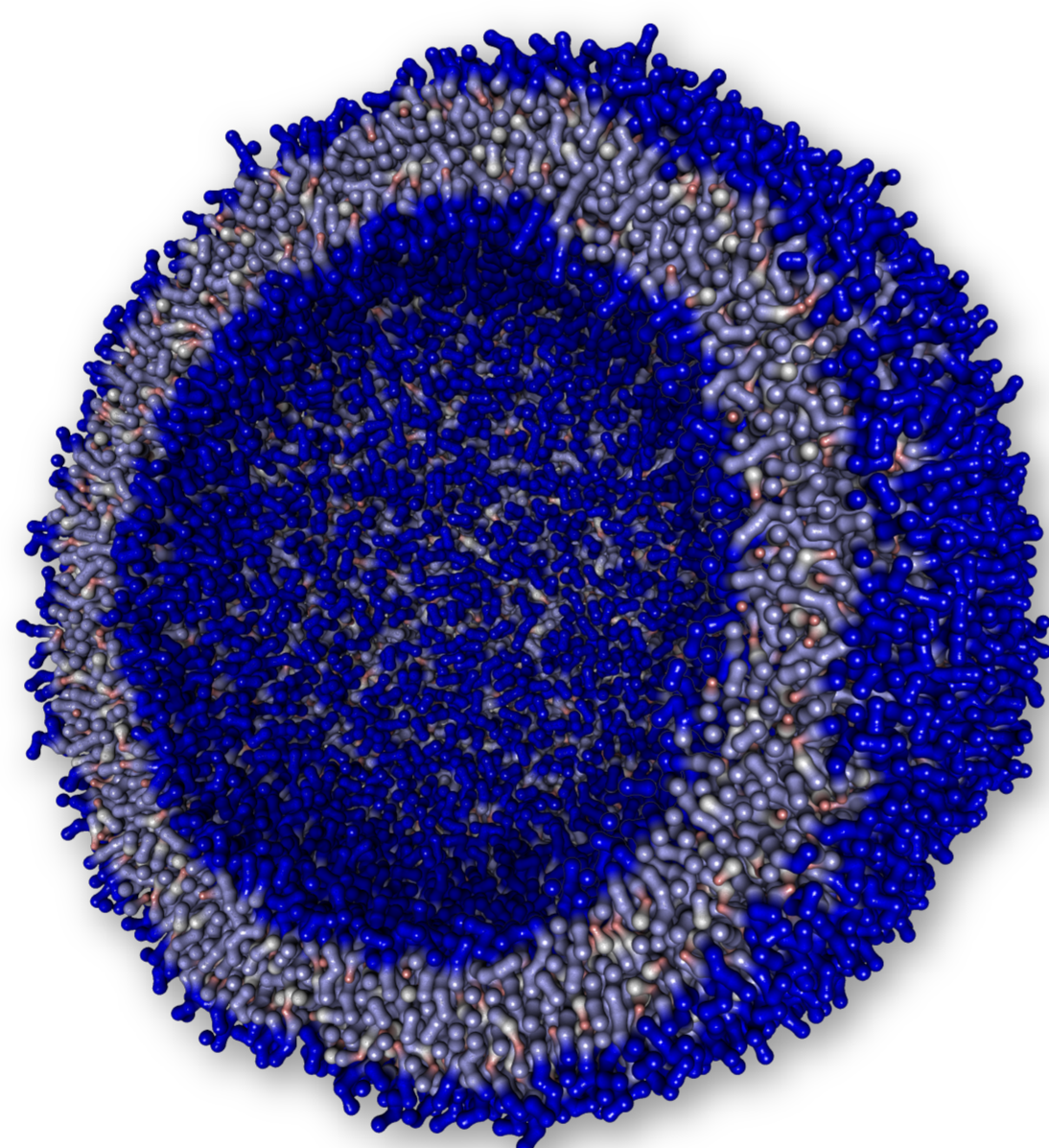
Ferrocyanochrome lié à l'hème



Bicouche lipidique en tout atome solvatée



Récepteur ionotrope pentamérique (GLIC)



Vésicule lipidique en modèle MARTINI

<http://unitymol.sourceforge.net/>

Plateforme de Visualisation

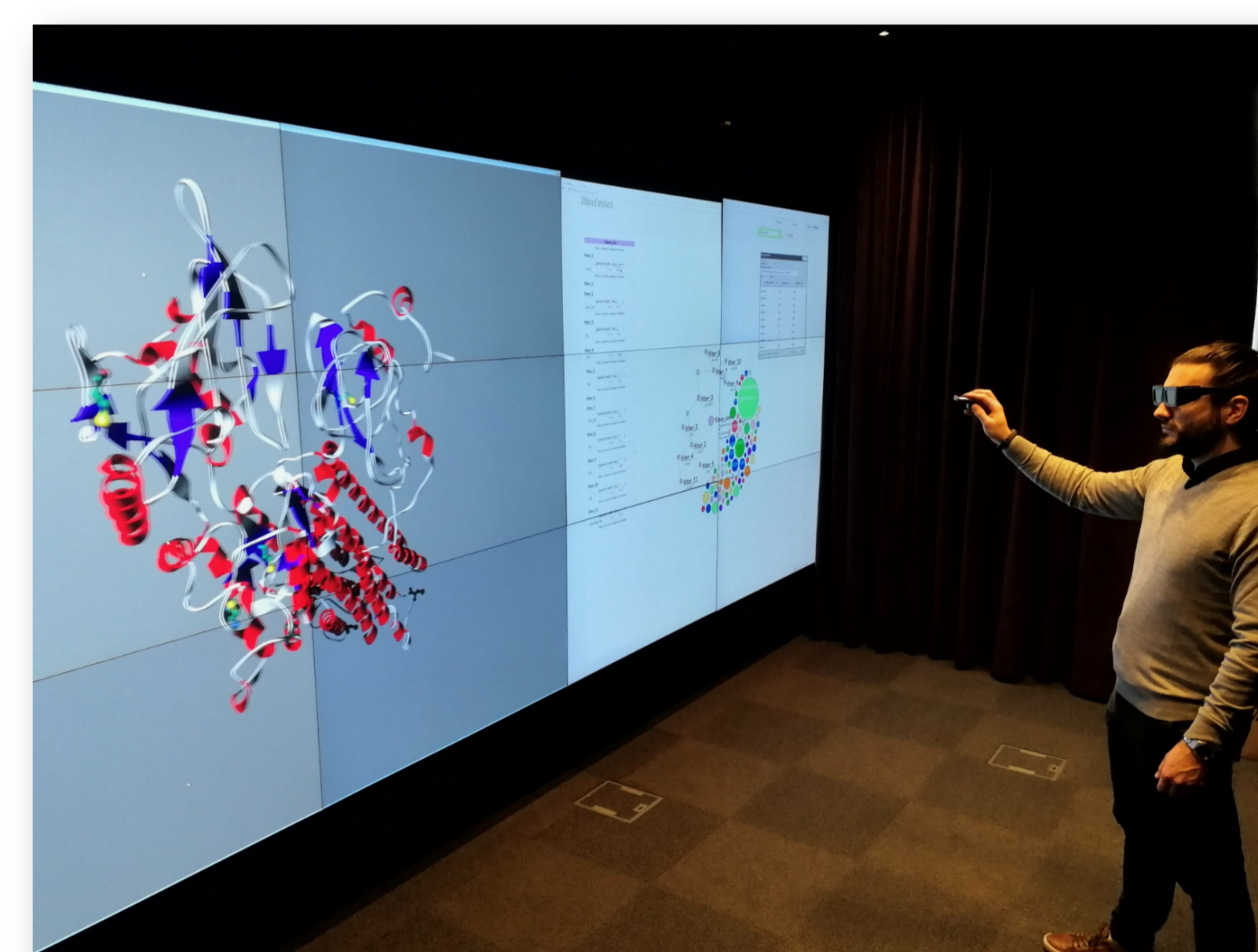
La plateforme, acquise par l'IBPC à travers l'EquipEx CACSICE, propose aux chercheurs un mur d'écrans stéréoscopique de grande taille et de haute résolution pour l'exploration/manipulation de leur données.

- mur de 12 écrans stéréoscopiques (4.4m * 1.8m pour une résolution de **7680 x 3240**)
- 3 stations de travail source puissantes (**Windows, Mac OS X, Linux**)
- Un système (tablette de contrôle, écran, clavier/souris) permettant le pilotage du dispositif.
- Une solution de **partage de contenu** à partir de PC portables.

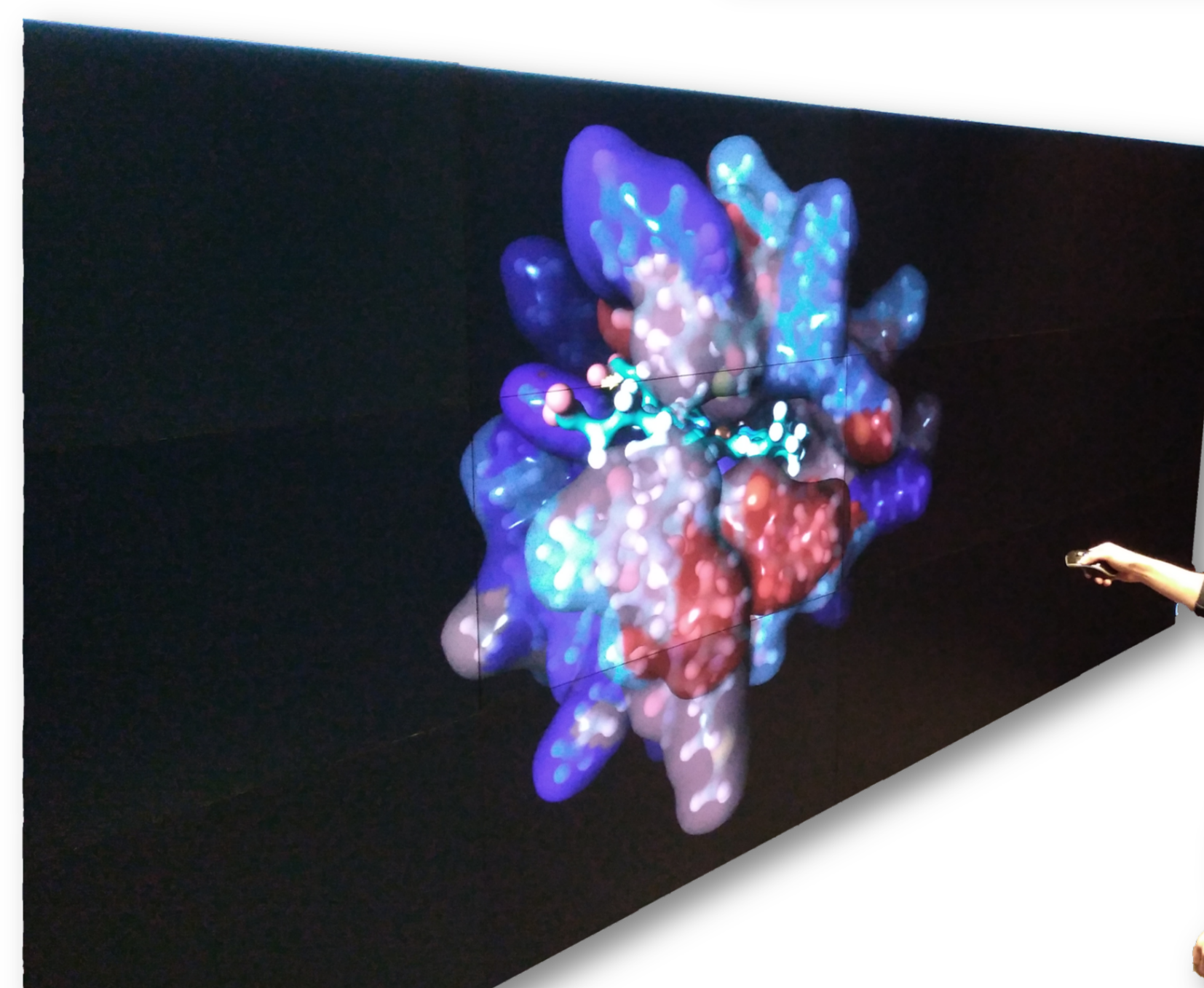


Applications :

- Visualiser des images hautes résolutions (MEB, Confocal,...)
- Visualiser des structures de macromolécules et des simulations en 3D (Pymol, Chimera, Coot, VMD, UnityMol, ...)
- Visualiser simultanément différentes données grâce à la grande surface de projection.



Logiciel d'analyse MinOmics (partie droite) liée à un rendu 3D, de la protéine d'intérêt (partie gauche).



Une souris gyroscopique est utilisée pour interagir avec l'ensemble des éléments.

Réalité Virtuelle (VR)/Réalité Augmentée

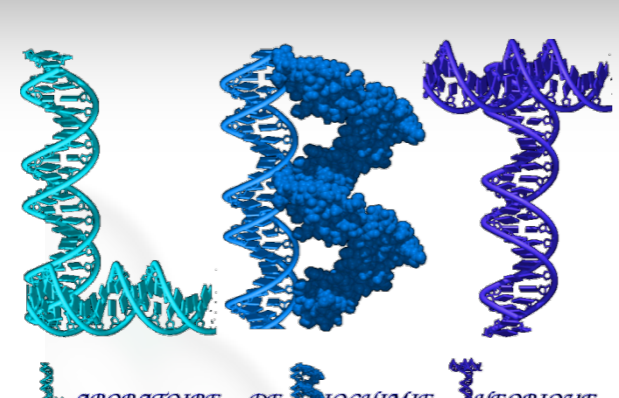
- Exploration de systèmes moléculaires en **VR immersive**
- Support de nombreuses plateformes de VR (Oculus, Vive,...)
- Implémentation pour le mur d'écran de l'IBPC
- IMD en VR avec différents types d'**interaction** : contrôleurs, bras haptique, souris 3D...
- **Réalité augmentée** grâce à l'Hololens



Plusieurs collaborations internationales, dans le privé comme dans le public, montrent l'intérêt de la communauté pour l'outil UnityMol et son caractère innovant, embarquant le résultat de travaux de recherche en interaction 3D et en visualisation haute performance.

La plateforme de visualisation a déjà été utilisée avec succès auprès des chercheurs de l'Institut pour faciliter l'exploration de leur données.

L'alliance des dispositifs hautes résolutions et de ces outils de visualisation moléculaires ouvrent des perspectives en recherche mais également dans l'enseignement.



Nous remercions la société UCB BioPharma pour leur soutien. 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: Dynamo (ANR-11-LABX-0011) et CACSICE (ANR-11-EQPX-0008)