



UnityMol: la Biochimie à Portée de Tous

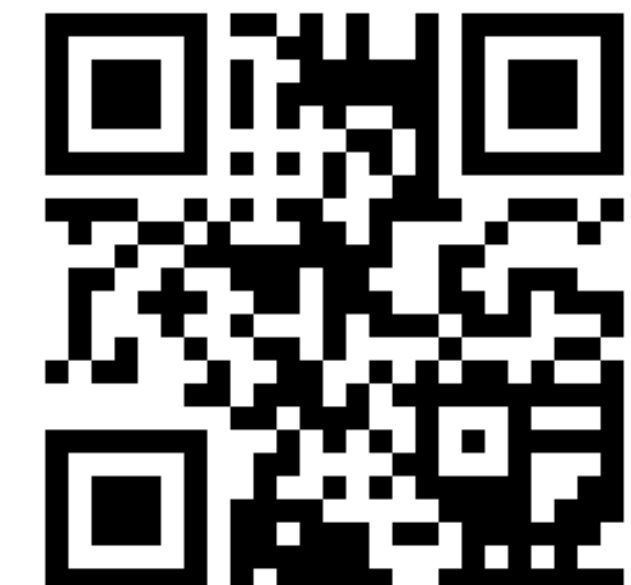
<http://unitymol.sourceforge.net>

Equipes du LBT, Cermav et LIMSI

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

Centre de Recherches sur les Macromolécules Végétales (CERMAV) - CNRS UPR 5301

Laboratoire d'Informatique pour la Mécanique et les Sciences de l'Ingénieur - CNRS UPR 3251



Présentation

Histoire de UnityMol

UnityMol est un **prototype pour la visualisation moléculaire** appliqué à la biologie. Développé depuis 2009 avec le moteur de jeu vidéo Unity3D, UnityMol inclut des représentations variées de molécules biologiques. UnityMol trouve aujourd'hui des applications aussi bien comme **jeu scientifique** qu'en tant d'**outil de recherche** pour différents domaines de la biologie moléculaire.

Pour l'éducation

UnityMol est utilisé à des fins pédagogiques. Nous l'appliquons pour enseigner différentes notions de domaines variés de la biologie moléculaire.

- Types de molécules biochimiques
- Plasticité des molécules
- Formes et propriétés
- Modèles physiques
- Simulation de dynamique moléculaire

Pour la recherche

Nous intégrons différents outils d'analyse pour transformer UnityMol en une véritable plateforme pour investiguer les propriétés physico-chimiques des biomolécules.

Contact: baaden@smplinux.de

Références

Game On, Science - How Video Game Technology May Help Biologists Tackle Visualization Challenges. Zhihan Lv, Alex Tek, Franck Da Silva, Charly Empereur-mot, Matthieu Chavent, Marc Baaden. PLOS ONE 2013

Three-Dimensional Representations of Complex Carbohydrates and Polysaccharides. SweetUnityMol: A Video Game Based Computer Graphic Software. Serge Perez; Thibault Tubiana; Anne Imberty; Marc Baaden. Glycobiology 2014

HiRE-RNA: a high resolution coarse-grained energy model for RNA. S. Pasquali and P. Derreumaux. J. Phys. Chem. B, Sept. 2010.

UnityMol: Interactive Scientific Visualization for Integrative Biology. Sébastien Doutreligne, Tristan Cragolini, Samueta Pasquali, Philippe Derreumaux, Marc Baaden. LDAV 2014

Percer les mystères de l'ARN

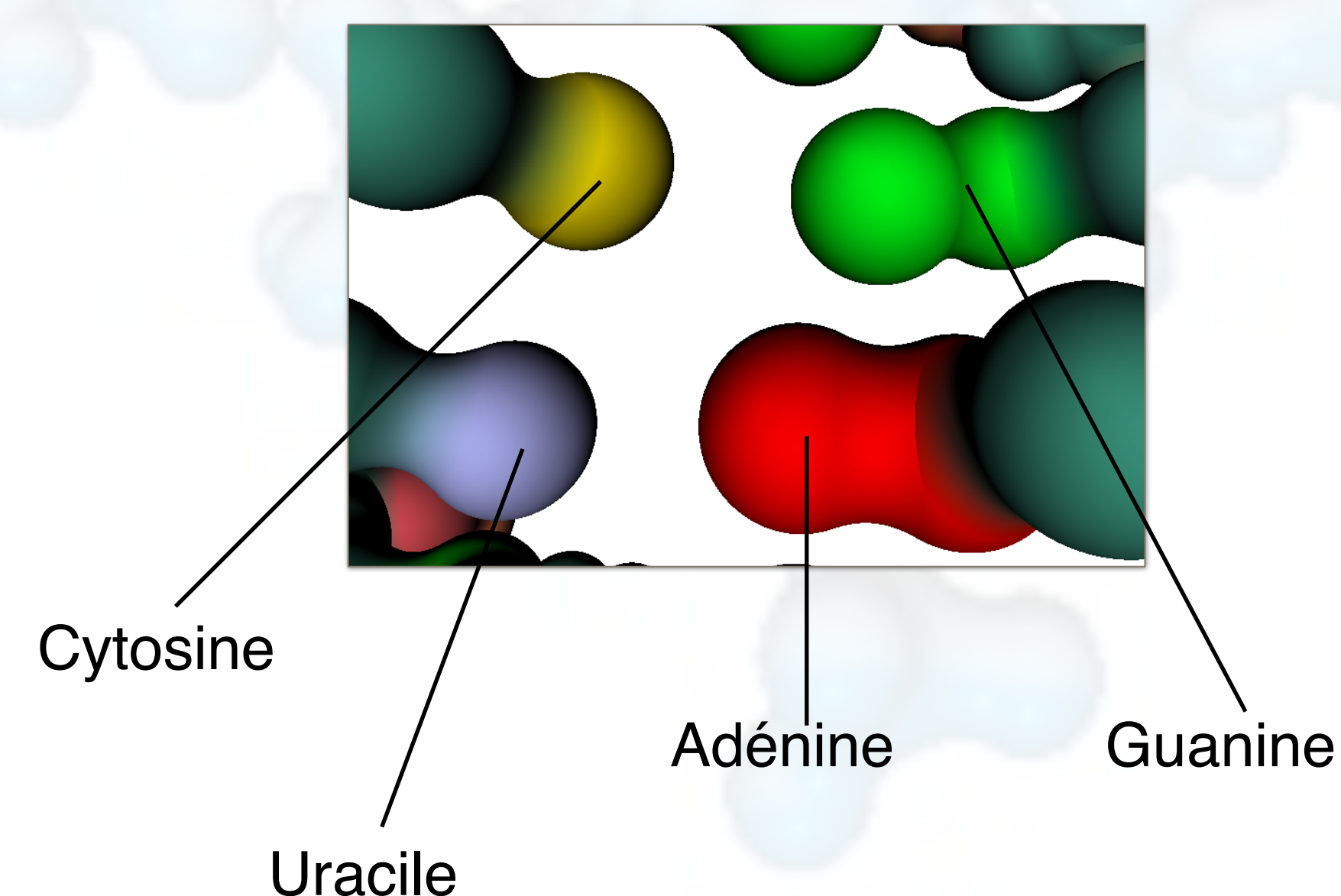
UnityMol a trouvé sa première application avec les molécules d'ARN. Plus précisément, nous intégrons un modèle conçu pour prédire la forme et l'assemblage de ce type de molécules à UnityMol: HiRE-RNA.

Grains

Chaque grain est modélisé par une sphère. La couleur indique visuellement le groupement représenté par le grain: ici, orange pour le groupe phosphate, vert pour les chaînes carbonées et quatre couleurs plus vives pour les types de nucléotides (voir ci-dessous).

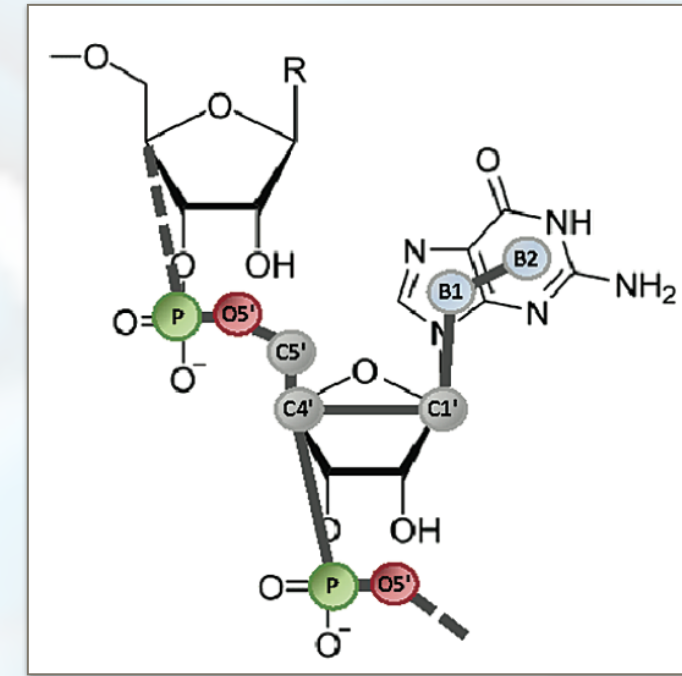
Bases nucléotidiques

L'ARN est constitué de 4 molécules de compositions différentes appelées **nucléotides**. Chaque type de grain correspondant aux nucléotides est représenté par une couleur différente. Les interactions entre ces bases confèrent à la molécule sa structure.



Représentation simplifiée

Une représentation simplifiée (aussi appelée « **gros-grain** ») d'une molécule permet de réduire le nombre d'atomes à simuler et afficher. Nous tirons partie de cette idée pour effectuer des simulations interactives en temps-réel. L'utilisateur peut à la fois visualiser et interagir avec la molécule.



Simulation Interactive

En cours de simulation, l'utilisateur peut sélectionner des atomes et les déplacer au moyen de sa souris.

Réalité Virtuelle

L'utilisateur peut intervenir dans la simulation au moyen de dispositifs de réalité virtuelle: un **bras haptique** à retour de force et une **souris 3D** pour naviguer dans la scène.



Nous expérimentons également des dispositifs de type **mur d'images** à très haute résolution et le périphérique sans contact **Leap Motion**.

Quelques sucreries

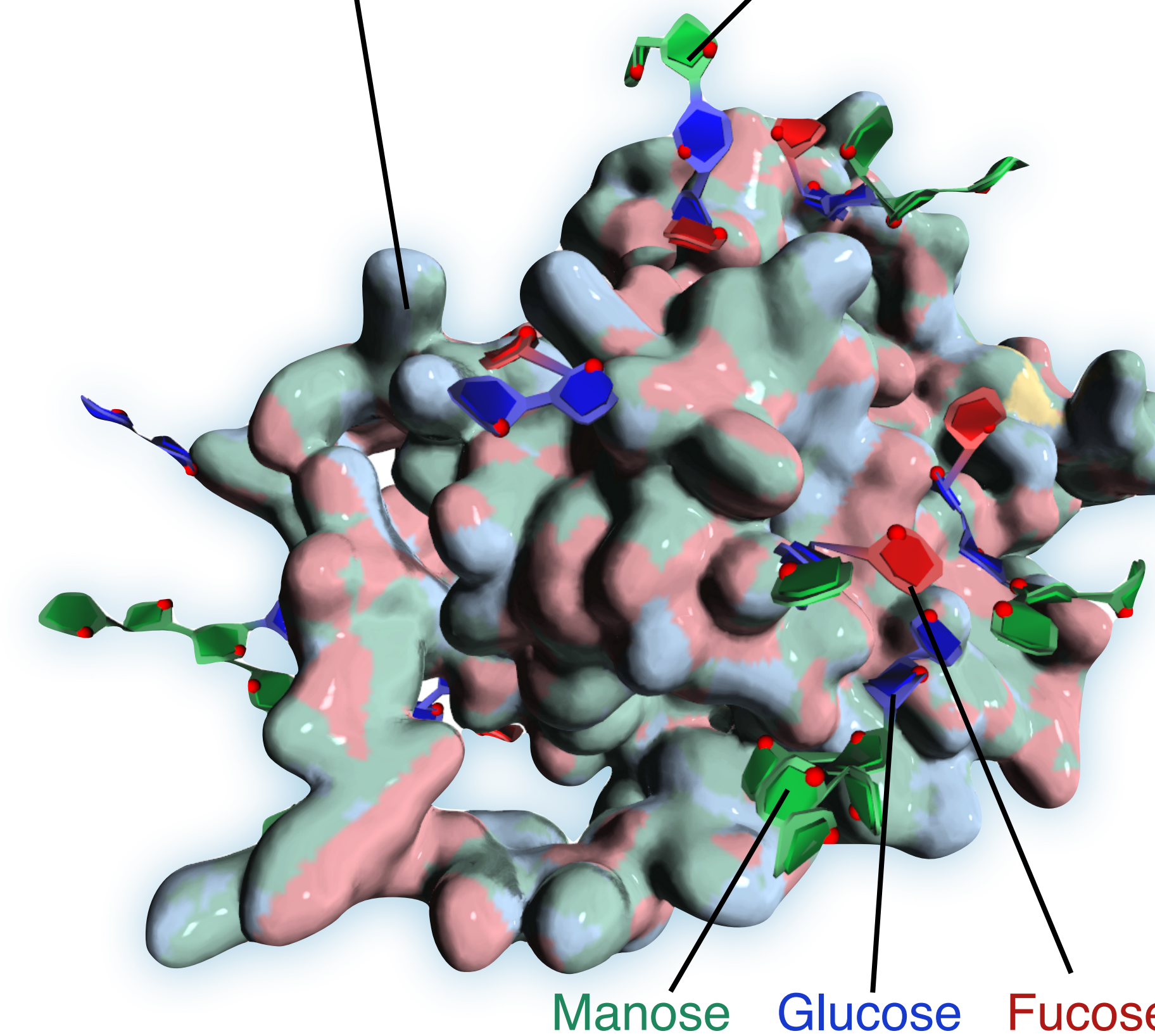
Dans la nature, les **sucres** forment une importante famille de biomolécules. Ils sont présents dans des formes très diverses et très complexes. En comparaison aux autres biomolécules, les sucres exposent une diversité bien plus grande. Pour une molécule de 5 éléments de base:

Type de molécule	# de combinaisons
ADN/ARN	1024
Protéines	3.2×10^6 (3200000)
Sucres	5.4×10^{181} (54 suivi de 180 «0»)

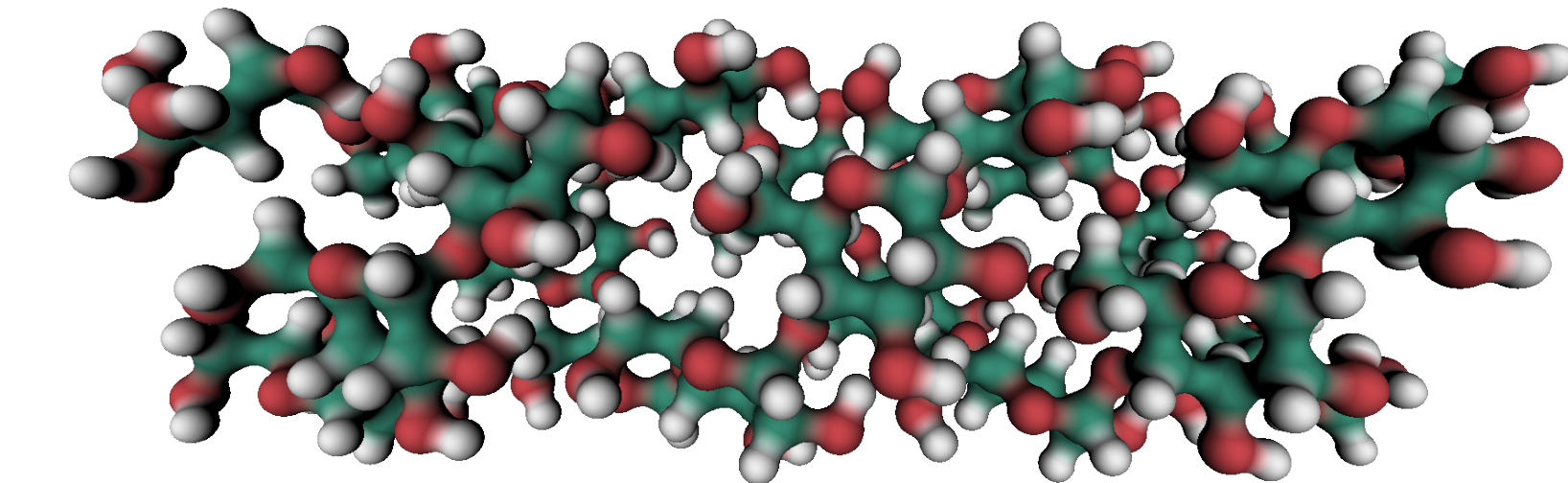
Sweet UnityMol vise à apporter des visualisations adaptées à la complexité des sucres pour la communauté des glycosciences.

Glycoprotéine GP120 (VIH)

Les représentations de **Sweet UnityMol** s'intègrent aux rendus déjà présents. Voici l'exemple d'une protéine (en représentation de type Surface) associée à des sucres.

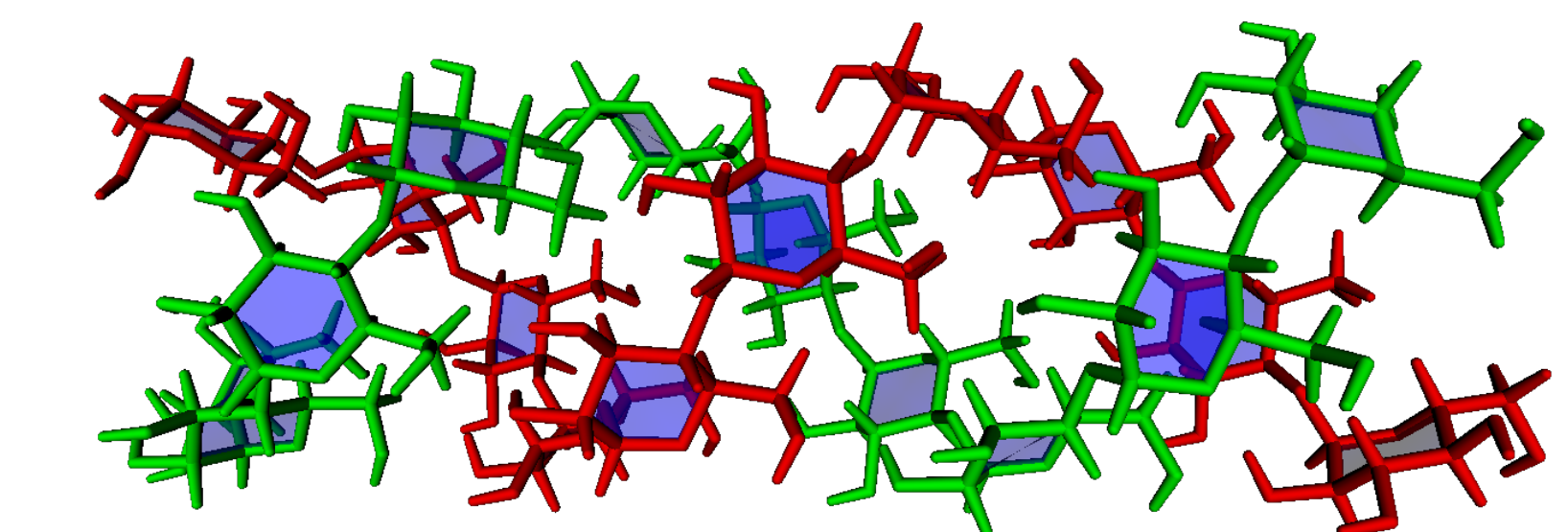


Représentation tout-atome



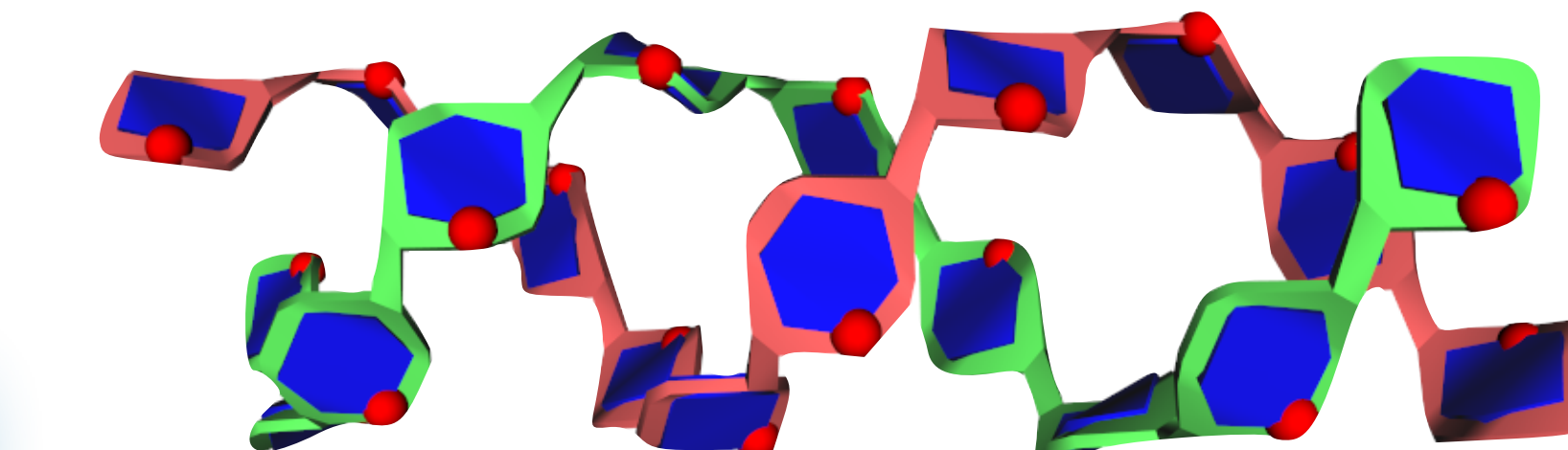
Visualisation d'une double hélice de sucres avec une représentation tout-atome. Les atomes sont colorés selon une convention classique: blanc pour l'hydrogène, rouge pour l'oxygène.

RingBlending



Mise en évidence des cycles sur une représentation en bâtons. La couleur du cycle correspond au type de sucre; ici, le bleu pour le glucose. Les chaînes sont mises en évidence par des couleurs différentes (ici, le vert et le rouge).

SugarRibbons



Simplification de la géométrie. On retrouve les sucres identifiés par une couleur « interne » spécifique à chaque type. Ils sont ensuite reliés entre eux par des rubans pouvant être colorés selon la chaîne moléculaire ou le type de sucre.

Les conformations des sucres, qui ont une influence sur la forme de la molécule, peuvent être identifiées par la position de l'oxygène. Ici, les sphères rouges les mettent en évidence.

Essayez vous-même les démos UnityMol!