



# UnityMol: Simulation et Visualisation Interactive à des fins d'Enseignement et de Recherche

Sébastien Doutréigne, Philippe Derreumaux, Marc Baaden

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



## UnityMol pour la recherche

Nous présentons **UnityMol**, une base logicielle pour développer des solutions de visualisation, analyse et exploration de données biologiques. Une des originalités de UnityMol est son implémentation à travers un moteur de jeux vidéo. Nous venons de connecter ce logiciel de visualisation à des simulations de dynamique moléculaire pour interagir directement avec la molécule d'intérêt. Cette manipulation apporte une nouvelle dimension très concrète et intuitive à l'exploration de la structure des biomolécules.

Nous nous sommes inspirés des expériences de type **AFM** pour réaliser des manipulations virtuelles automatiques sur des molécules d'ARN. En mesurant la distance entre les extrémités d'une chaîne nucléotidique, nous sommes en mesure d'observer la **résistance des liaisons hydrogènes** formées lors du repliement de la structure.

<http://unitymol.sourceforge.net>

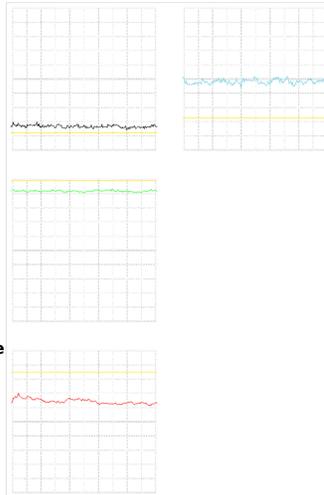
## Fonctionnalités

- Rendu 3D de molécules d'**ARN**, **ADN** et **protéines**.
- Personnalisation (texturation, coloration, représentation)
- Manipulation interactive avec les **simulations de dynamique moléculaire** et des **dispositifs haptiques**
- **Multi-plateforme**



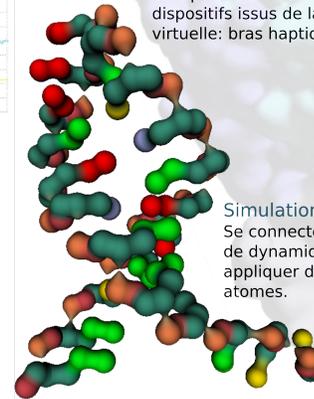
## Information temps-réel

Accès direct et temps-réel aux mesures de la simulation. Ici, nous pouvons observer l'énergie globale (noir), l'énergie des liaisons hydrogènes (vert), l'énergie d'empilement (rouge) et l'énergie de répulsion des phosphates (bleu) au cours du temps.



## Périphériques spéciaux

Manipulation intuitive à l'aide de dispositifs issus de la réalité virtuelle: bras haptiques, souris 3D.



## Simulations interactives

Se connecter à des simulations de dynamique moléculaire et appliquer des forces sur les atomes.

## HiRE-RNA Contest: UnityMol pour l'éducation

Nous utilisons un moteur de simulation qui implémente le modèle gros-grain **HiRE-RNA** développé au laboratoire. Une des applications possibles est l'enseignement. Au cours du mois de mai 2015, nous avons utilisé UnityMol avec des groupes d'étudiants de Licence en Biologie et en Bioinformatique à l'université Paris Diderot, soit un total de près de 100 personnes. Ces expériences offrent un contact concret avec les simulations et leur fonctionnement. Durant 3 heures, les étudiants ont tenté de replier 4 molécules à la structure connue: le pseudo-noeud 2G1W, l'épingle à cheveux 1F9L, la double hélice 1N8X et la triple hélice 2K96. Ces structures possèdent respectivement 22, 22, 36 et 184 nucléotides.

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.

357 inscrits

1418 fichiers PDB

7 molécules

1.81 RMSD min.

1 Les étudiants génèrent des structures avec, comme indices sur leur stabilité, l'énergie totale, l'énergie des liaisons hydrogènes et l'énergie d'empilement.

2

Ils envoient leurs fichiers à notre serveur web. L'application calcule la déviation (RMSD) entre les fichiers des étudiants et la structure de référence.

3

Les étudiants comme les enseignants accèdent au classement des structures.

<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

## 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. Cragnolini 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 cwu133, 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- B507-0017-01), ExaViz (ANR-11-MONU-003) et Dynamo (ANR-11-LABX-0011).

