

Sujet de thèse de Doctorat

VASSIMODO - Visual Analysis of Secondary Structures In MOlecular Dynamics

L'équipe MIME (Modélisation Moléculaire et Imagerie Multi-échelle) de l'unité MEDyC (UMR 7369) à Reims dispose d'un financement de thèse de 3 ans dans le domaine de la visualisation scientifique.

Mots-Clés : Visualisation scientifique – Serious game – Informatique graphique – Optimisation – Modélisation

Descriptif du projet :

Dans le domaine de la modélisation moléculaire, de nombreuses simulations numériques sont produites pour des systèmes de plus en plus complexes sur des temps de simulation de plus en plus longs. Pour visualiser ces larges systèmes complexes tels que les macromolécules pouvant être composées de plusieurs dizaines de milliers d'atomes, les représentations classiques de la biologie structural tout atome ne sont pas satisfaisantes. Et les représentations simplifiées en structures secondaires ne représentent pas ces motifs structuraux dans leur ensemble. De plus, à l'heure actuelle les représentations de ces données sont étudiées pour la visualisation d'une molécule statique, elles ont bien sûr été adaptées pour permettre la visualisation frame par frame d'une simulation mais ne prennent pas en compte les changements au cours du temps afin de les représenter.

L'enjeu de ces travaux consiste à la création d'une méthode 4D d'analyse visuelle de l'ensemble des motifs structuraux réguliers des protéines définissant les structures secondaires pour la visualisation de simulation moléculaire. Notre but est de mettre en place pour chaque motif structural (feuillet β , hélice α , coude, coil) une représentation dédiée permettant de comprendre l'utilité de ces structures et pouvant être utilisée en temps interactif, sur une molécule statique ou sur une simulation moléculaire, sur un ordinateur de bureau ou dans un système immersif. De plus cette visualisation, utilisée dans le cadre d'une simulation, devra être capable de représenter, pour chaque motif, les mouvements de ce motif durant une simulation afin de mettre en valeur leur fonction tout le long d'une simulation.

Des premiers travaux ont permis de déterminer des représentations pour les feuillets β [1] (figure 1) et les hélices α [2] (figure 2) qui devront être optimisées (utilisation des GPU) pour être utilisées dans le cadre de la lecture d'une simulation sur un ordinateur de bureau, puis adaptées pour prendre en compte les mouvements tout le long de la simulation. Cela servira de base pour ensuite mettre en place la représentation des autres motifs structuraux.

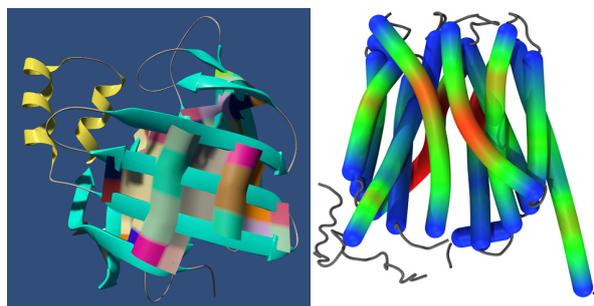


Figure 1 : représentation des feuillets β appelée SheHeRASADe[1] et des hélices α appelée Bendix[2].

Ce projet se place dans le cadre du développement de la plateforme UnityMol[3]. C'est une plateforme de visualisation moléculaire interactive programmée avec le moteur de jeu Unity3D, utilisable aussi bien dans un contexte de bureau que dans un contexte stéréoscopique (comme dans un casque de réalité virtuelle ou sur un mur d'image). Elle a été développée par l'équipe du Dr Marc Baaden au laboratoire LBT de l'institut IBPC du CNRS à Paris. Elle est facilement modifiable et extensible d'où notre souhait d'y intégrer de nouvelles fonctionnalités.

Environnement de travail :

Le/la candidat(e) recruté(e) mènera ses travaux au sein de l'unité de recherche MEDyC (UMR CNRS 7369) située à Reims, sur le campus Moulin de la Housse. Il/elle bénéficiera du soutien d'une équipe pluridisciplinaire, composée d'experts en informatique graphique et bioinformatique, et du support de l'équipe du laboratoire LBT de l'institut IBPC du CNRS à Paris à l'origine de la plateforme UnityMol.

Dates : à partir d'octobre 2020 (durée 3 ans)

Profil du/de la candidat(e) :

- Master ou diplôme équivalent en informatique
- Compétences en informatique graphique
- Expérience sur une plateforme de développement (type Unity)
- Aucune compétence en bio-informatique n'est requise

Pièces et informations à fournir par le/la candidat(e) avant le 15 juin :

- Curriculum vitæ
- Lettre de motivation
- Diplômes (résultats, classements, attestations de réussite)

Encadrants et contacts :

- Jessica Jonquet-PrévotEAU (jessica.jonquet@univ-reims.fr)
- Manuel Dauchez (manuel.dauchez@univ-reims.fr)

Références :

- [1] L. Nolin, Outils d'aide à l'étude des protéines : modélisation surfacique et visualisation sémantique des feuillets béta, Thèse de doctorat, soutenue en 2010.
- [2] Dahl AC, Chavent M, Sansom MS. Bendix: intuitive helix geometry analysis and abstraction. *Bioinformatics*. 2012;28(16):2193–2194. doi:10.1093/bioinformatics/bts357
- [3] Lv Z, Tek A, Da Silva F, Empereur-mot C, Chavent M, Baaden M. Game On, Science - How Video Game Technology May Help Biologists Tackle Visualization Challenges. *PLoS ONE*. 2013;8(3): e57990. doi:10.1371/journal.pone.0057990