



CYCLE DE CONFÉRENCES DE CHIMIE

*Avec le concours de : Université Clermont Auvergne
INP Clermont Auvergne*

Jeudi 2 décembre à 16 h

Amphi 9109 – Pôle Physique

Marc BAADEN

Laboratoire de Biochimie Théorique UPR 9080,
Institut de Biologie Physico-Chimique (IBPC), Paris

Vers des outils de prochaine génération pour explorer et construire des assemblages moléculaires

Mon équipe vise à explorer des relations moléculaires complexes grâce à des approches interactives de visualisation, de manipulation et d'analyse pour soutenir la génération d'hypothèses et l'exploration d'ensembles de données complexes. Le cadre UnityMol [1] constitue un outil central pour ces études. Il est basé sur le moteur de jeu Unity3D. Une première ligne de recherche vise à soutenir le contexte 3D, par exemple par la navigation guidée par le contenu, les vues éclatées et les liens sémantiques entre les objets moléculaires et leurs données d'analyse [2].

En ce qui concerne la représentation des molécules, nous avons étendu le répertoire d'UnityMol pour inclure des visualisations spécifiques telles que pour les propriétés électrostatiques [3]. Nous avons également inclus des simulations interactives qui sont particulièrement pertinentes pour guider les tâches de construction de molécules, y compris en enseignement ou via la science participative. Un accent particulier est mis sur l'intégration de matériel spécialisé tel que de grands écrans haute résolution ou, plus récemment, des casques de réalité virtuelle montés sur la tête ou des configurations de réalité augmentée.

[1] Lv et al., Game on, Science - how video game technology may help biologists tackle visualization challenges, PLoS ONE 8(3):e57990, 2013 (<http://unitymol.sourceforge.net>).

[2] Trellet et al., Interactive Visual Analytics of Molecular Data in Immersive Environments via a Semantic Definition of the Content and the Context, IEEE VR 2016/VR 2016 Workshop on Immersive Analytics.

[3] Laureanti et al., Visualizing biomolecular electrostatics in virtual reality with UnityMol(APBS) and APBS, Protein Science, arXiv:1908.11261 [q-bio.BM] and <https://doi.org/10.1002/pro.3773>.

Coordinateur : Alain DEQUIDT ☎ 33 473 407 194 courriel : alain.dequidt@uca.fr
Institut de Chimie de Clermont-Ferrand (ICCF-UMR 6296)

Université Clermont Auvergne, 24, avenue Blaise Pascal, TSA 80026 63178 AUBIERE cedex-France