

FlowVRNano

Visualiser, Toucher, déformer et assembler
Des molécules du bout des doigts.



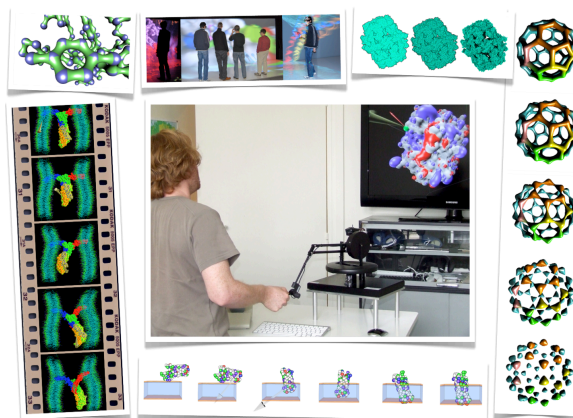
FVNANO

Un laboratoire virtuel pour étudier des molécules biologiques et des matériaux

Les dix dernières années ont apporté des progrès considérables en physique et en chimie appliquée à l'infiniment petit. Les nanotechnologies, étude d'objets de taille atomique et moléculaire, ont grandement profité de ces avancées. Ces nano-objets sont très difficiles à visualiser et à manipuler individuellement, c'est pourquoi, nos recherches portent sur le développement et l'utilisation de la visualisation et les simulations numériques afin de mieux appréhender ceux-ci. Les outils de visualisation à notre disposition permettent de mieux percevoir les formes souvent complexes d'édifices moléculaires de taille croissante tandis que les simulations que nous réalisons miment le comportement dynamique extrêmement complexe des molécules biologiques. Le but de ce travail est d'aboutir à un véritable laboratoire virtuel dédié à la manipulation de structures moléculaires sur ordinateur. Les retombées de cet outil concernent la recherche à la fois fondamentale et appliquée dans le domaine des nanotechnologies, de la recherche biomédicale et des matériaux.

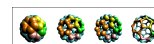
Visualisation, réalité virtuelle et simulations interactives au service de la compréhension des systèmes moléculaires

Pour explorer ce « LEGO™ » moléculaire, nous développons une approche pluridisciplinaire innovante, combinant simulations moléculaires et techniques issues de la réalité virtuelle et du graphisme par ordinateur. Dans cette approche, le chercheur observe en temps réel les mouvements qui animent ces molécules. Il peut ainsi saisir, allonger et manipuler ces molécules de manière interactive, pour étudier à la fois leur déformation et leur agencement, dont la compréhension est primordiale pour mettre en lumière les dysfonctionnements qui donnent naissance à des maladies. Ceci est facilité par une manipulation très intuitive: les molécules étant rendues palpables par un périphérique à retour d'effort. Nous avons appliqué cette méthode aux macrostructures moléculaires, notamment des groupes de protéines impliquées dans la fusion membranaire. Ces systèmes moléculaires de très grandes tailles (pouvant être composés de centaines de milliers voir de millions d'atomes) nous ont amené à développer une visualisation adaptée appelée «HyperBalls». Les résultats obtenus en biologie structurale sont prometteurs et d'autres domaines comme la physique des matériaux ou la conception de nano-objets bénéficient également de cette approche.

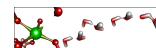


Projet, résultats et productions

Le projet FvNano est un projet de recherche académique coordonné par le laboratoire de biochimie théorique du CNRS. Il associe le laboratoire d'informatique fondamentale de l'université d'Orléans (LIFO), le projet MOAIS de l'INRIA Grenoble et le CEA/DIF à Bruyères-le-Châtel. Le projet a commencé en janvier 2008 et a duré 48 mois. Il a bénéficié d'une aide ANR de 556 000 € pour un coût global de l'ordre de 1,2 millions €.



Parmi les résultats marquants figure le travail accompli pour rendre FvNano performant, une nécessité pour son utilisation interactive. Différentes boucles de simulation, de visualisation et d'interaction coûteuses en calcul et intimement liées ont été agencées. La visualisation « HyperBalls » optimisée sur carte graphique est une avancée majeure. Notre outil est utilisé pour aborder plusieurs « grands défis » scientifiques : avancer dans la compréhension de maladies comme le botulisme, de phénomènes d'addiction liés au tabagisme, ou des processus comme la réparation de l'ADN endommagée.



Plusieurs publications sont parues, entre autres dans J. Comput. Chem., Nucleic Acids Res., J. Supercomputing, IEEE VR 2008, VRST'08, VRIPHYS'08, Briefings in Bioinformatics et Pacific Symposium for Biocomputing. Nos travaux ont été présentés sous forme de communication orale, d'affiche ou de démonstration à de nombreuses manifestations scientifiques nationales et internationales. Plusieurs logiciels sont distribués.

CONTACT : Marc Baaden

baaden@smplinux.de
http://www.baaden.ibpc.fr/projects/fvnano
http://hyperballs.sourceforge.net

