

# UnityMol X, une plate-forme logicielle *made in France* de visualisation moléculaire multi-fonctions et évolutive



X. Martinez, H. Santuz, J. Rodrigues, N. Férey, M. Baaden

Laboratoire de Biochimie Théorique, CNRS UPR 9080, Institut de Biologie Physico-Chimique, Paris  
Laboratoire d'Informatique pour la Mécanique et les Sciences de l'Ingénieur, équipe VENISE, CNRS UPR 3251, Orsay



UnityMol propose un **cadre logiciel** pour représenter efficacement les biomolécules et y ajouter des briques de visualisation.

L'utilisation du moteur de jeu **Unity3D** facilite le **prototypage** d'interfaces utilisateurs et de **rendus graphiques spécifiques** au domaine.

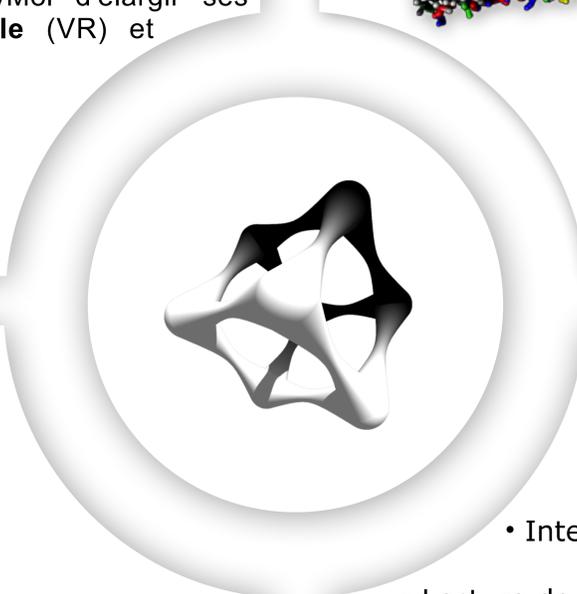
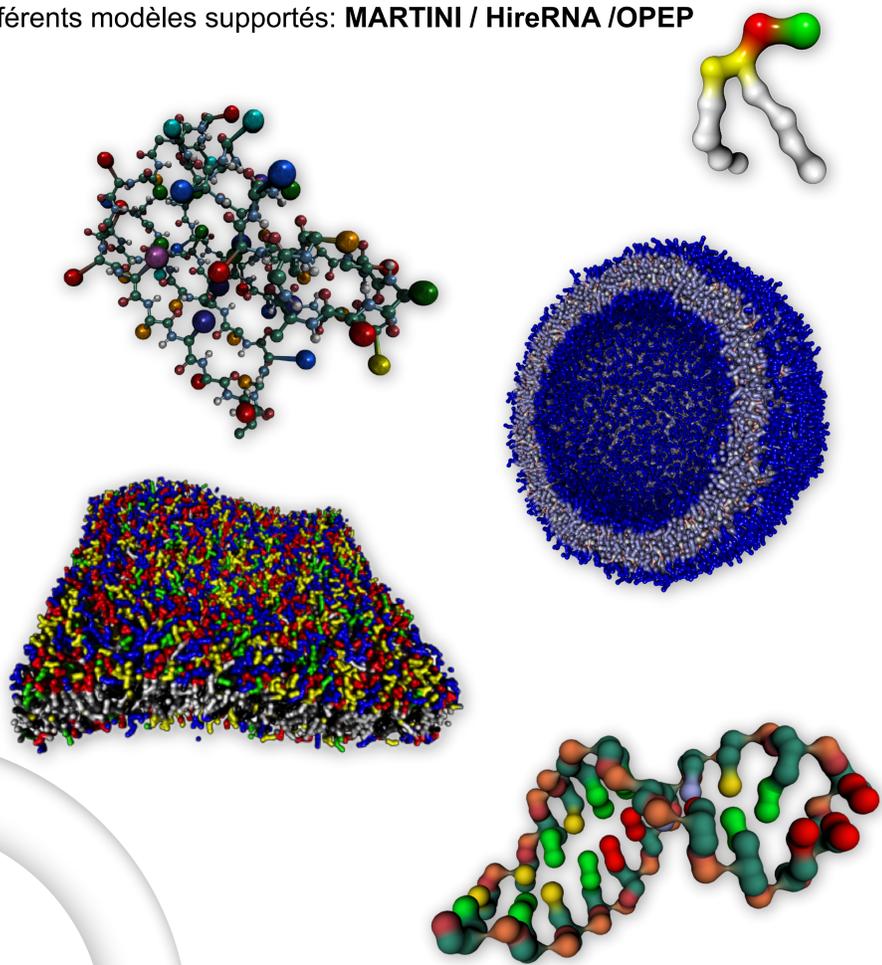
UnityMol propose des **rendus originaux** tels que les **HyperBalls** pour obtenir un rendu de qualité et très performant.

Par ailleurs, des modules pour la simulation moléculaire interactive et l'affichage de données dynamiques ont récemment été ajoutés.

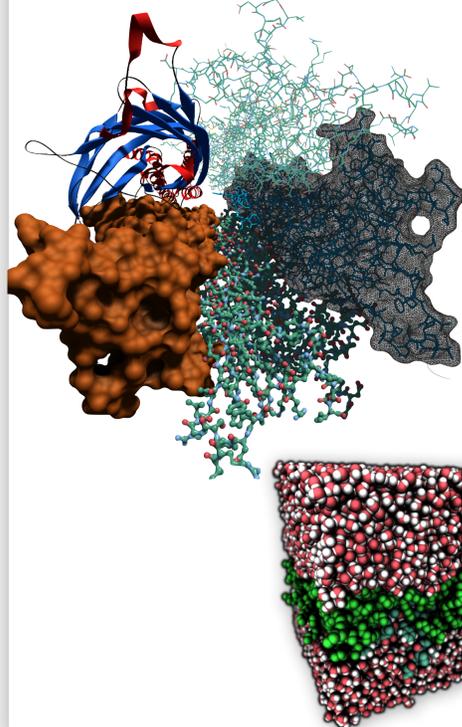
De plus, des **optimisations** récentes permettent désormais d'afficher plusieurs centaines de milliers d'atomes à haute fréquence, rendant accessible l'exploration de complexes volumineux, des modèles tout atome aux gros grains.

Ces améliorations ont également permis à UnityMol d'élargir ses fonctionnalités aux contextes de **Réalité Virtuelle (VR)** et **Augmentée (AR)**.

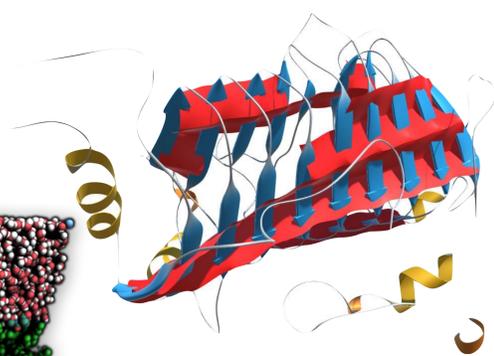
• Différents modèles supportés: **MARTINI / HireRNA / OPEP**



• Large répertoire de représentations classiques ou personnalisées: **ARN/ADN/Protéines/Sucres**



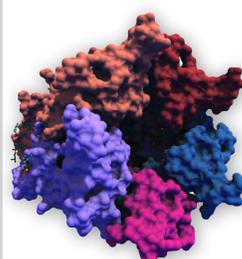
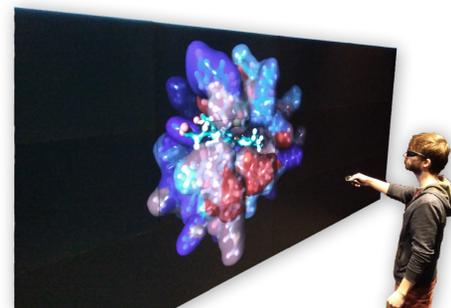
• Sheherasade: représentation des feuillets  $\beta$  (@Reims)



• Interactive Molecular Dynamics

• Lecture de trajectoires : **Gromacs/AMBER/QMM**

- Docking protein-protein interactif (Collaboration @Stanford)
- Console Python 
- Language de selection (Pymol like)
- Multi-utilisateur



Les récentes optimisations apportées à UnityMol lui ont permis d'élargir ses champs d'application à des systèmes moléculaires importants comme les modèles Martini, mais ont aussi rendu possible l'utilisation de casques de réalité virtuelle sur des ordinateurs grand public.

Le caractère innovant de UnityMol embarquant le résultat de travaux de **recherche en Interaction 3D** a su trouver écho autant auprès de partenaires académiques que privés. UnityMol a aussi été utilisé dans le cadre d'**enseignement** à des élèves d'école primaire jusqu'aux élèves de Master.

Enfin, UnityMol ouvre de nombreuses perspectives notamment en exploration de systèmes moléculaires en réalité virtuelle et/ou augmentée dans un **contexte collaboratif**.

