



Borne UnityMol/HiRE-RNA

<http://unitymol.sourceforge.net/>

Présentation

UnityMol est un prototype pour la visualisation moléculaire appliqué à la biologie. Développé depuis 2009 avec le moteur de jeux vidéo Unity3D, UnityMol inclut des représentations variées de molécules biologiques. UnityMol trouve aujourd'hui des applications aussi bien comme jeu scientifique qu'en tant qu'outil de recherche pour différents domaines de la biologie moléculaire.



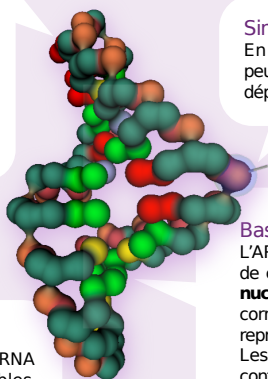
Percer les mystères de l'ARN

UnityMol a trouvé sa première application avec les molécules d'ARN. Plus précisément, nous intégrons à UnityMol un modèle conçu pour prédire la forme et l'assemblage de ce type de molécules: HiRE-RNA.

Une représentation simplifiée (aussi appelée « gros-grain ») d'une molécule permet de réduire le nombre d'atomes à simuler et afficher. Nous tirons partie de cette idée pour effectuer des simulations interactives en temps-réel. L'utilisateur peut à la fois visualiser et interagir avec la molécule.

Grains

Chaque grain est modélisé par une sphère. La couleur indique visuellement le groupement représenté par le grain: ici, orange pour le groupe phosphate, vert pour les chaînes carbonées et quatre couleurs plus vives pour les types de nucléotides (voir ci-dessous).

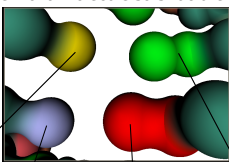


Simulation Interactive

En cours de simulation, l'utilisateur peut sélectionner des atomes et les déplacer au moyen de sa souris.

Bases nucléotidiques

L'ARN est constitué de 4 molécules de compositions différentes appelées **nucléotides**. Chaque type de grain correspondant aux nucléotides est représenté par une couleur différente. Les interactions entre ces bases confèrent à la molécule sa structure.



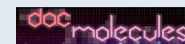
Cytosine
Uracile
Adénine
Guanine

HiRE-RNA Contest

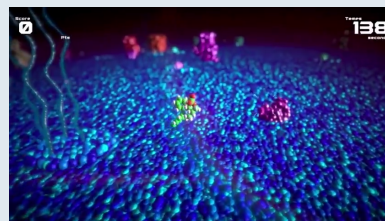
Avec notre application web HiRE-RNA Contest, nos étudiants sont capables de télécharger un ensemble de molécules qui leur est inconnu pour tenter de les replier. Ils envoient ensuite leurs résultats qui sont alors évalués et classés. Vous pouvez vous aussi télécharger nos outils gratuitement depuis:

<http://hirema.galaxy.ibpc.fr/>

DocMolecules



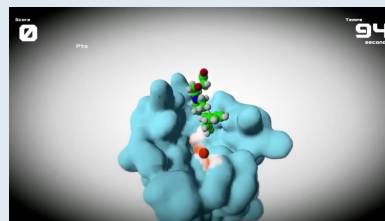
Conçu pour une borne d'arcade munie d'un bras haptique permettant un ressenti tactile, DocMolecules est un jeu de construction moléculaire à l'échelle du vivant. En explorant le mode d'action d'un médicament fréquemment prescrit pour combattre les allergies, le joueur de DocMolecules s'initie à la visualisation et à la manipulation des molécules. DocMolecules est issu de la combinaison de UnityMol et BioSpring: un moteur physique de simulation d'abord conçu pour la recherche et repris ici pour arrimer les molécules entre elles et évaluer la pose du joueur.



Explorer la membrane d'une cellule pour trouver la cible thérapeutique de la molécule dans le temps imparti.



Tester la forme des cavités avec l'agent à insérer.



Arrimer l'ensemble à l'aide d'un bras haptique et de BioSpring.

Références

Innovative interactive flexible docking method for multi-scale reconstruction elucidates dystrophin molecular assembly. A.-E. Molza, N. Férey, M. Czjzek, E. Le Rumeur, J.-F. Hubert, A. Tek, B. Laurent, M. Baaden and O. Delalande. Faraday Discuss. 2014
Game On, Science - How Video Game Technology May Help Biologists Tackle Visualization Challenges. Zhihan Lv, Alex Tek, Franck Da Silva, Charly Empereur-mot, Matthieu Chavent, Marc Baaden. PLOS ONE 2013

UnityMol: interactive and ludic visual manipulation of coarse-grained RNA and other biomolecules. Doutreligne, S.; Gageat, C.; Cragolini, T.; Taly, A.; Pasquali, S.; Derreumaux, P.; Baaden, M., Lab. de Biochimie Theor., Univ. Paris Diderot, Paris, France; VARMS @ IEEVVR; March 2015
HiRE-RNA: a high resolution coarse-grained energy model for RNA. S. Pasquali and P. Derreumaux. J. Phys. Chem. B, Sept. 2010.
Advances in Human-Protein Interaction - Interactive and Immersive Molecular Simulations. Nicolas Férey, et al. InTech 2012