

Navigation guidée par le contenu pour l'exploration moléculaire

Content-aware navigation for molecular exploration

TRELLET Mikael, Nicolas FERREY, Patrick BOURDOT et Marc BAADEN

English Abstract – Along the last decades, many technics to explore virtual environments have been proposed. Most of these technics are guided either by an interaction context or by the motivation to reproduce a way to navigate close to real conditions. However, in some specific situations, as the exploration of scientific data, virtual objects to explore are very far from any real experience. The design of navigation paradigms that fit scientific objects is then more complicated. It requires taking into account the nature of objects as well as the types of tasks to perform in a virtual environment. There are only few studies linked to navigation paradigms guided by the content and the task in scientific visualization whereas this problematic is crucial, whatever the degree of immersion treated. We present then a current work on the design of a navigation paradigm based on the content and the task for the molecular visualization.

1 RESUME

La navigation est une composante essentielle de l'exploration d'un phénomène scientifique. De nombreuses problématiques liées au contrôle de cette navigation ont été traitées [1], mais rarement en tenant compte de la nature de l'objet d'intérêt ou de la tâche à réaliser relative à l'exploration de cet objet. Pour ajouter cette dimension de « *content awareness* » dans les techniques de navigation déjà proposées, il est important de bien caractériser les objets 3D constituant la scène virtuelle à explorer. Cette caractérisation est la plupart du temps implicite, lorsqu'il s'agit de scènes virtuelles orientées qui contraignent l'utilisateur à évoluer sur un plan comme c'est majoritairement le cas pour des scènes réalistes. Ainsi, appliquer des métaphores de navigation qui imitent les mouvements naturels pour un être humain permet à l'utilisateur de se familiariser rapidement avec la technique de navigation choisie, avec les avantages que cela comporte, comme celui de minimiser le phénomène de « *cybersickness* » [2] en milieu immersif, ou plus généralement d'éviter la perte de repères spatiaux. Cependant l'exploration de phénomènes ou d'objets abstraits n'ayant aucune orientation intrinsèque ni points de repère écologiques rend l'utilisation de techniques de navigation classiques difficilement applicable. L'absence de fonctionnalité de navigation adaptée à ce type de contenu perturbe significativement la réalisation des tâches d'exploration. La mise en place de techniques de navigation basées sur le contenu de la scène virtuelle à explorer est un aspect critique pour une exploration efficace de phénomènes scientifiques. Dans cette étude, nous nous concentrons plus particulièrement sur l'exploration de complexes moléculaires. La nécessité de proposer des paradigmes de navigation adaptés à la visualisation moléculaire a tout d'abord été soulignée par Hanson et al. [3] qui mettent en avant plusieurs familles de navigation sous contraintes améliorant de manière significative

l'efficacité de l'utilisateur. En biologie structurale et en simulation moléculaire, la visualisation scientifique est une activité primordiale et indispensable dans la production du savoir à partir de données issues d'expérimentations ou de simulations. Parallèlement l'apport indéniable de l'immersion pour l'observation de ces objets complexes a rapidement mené à de nombreux travaux pour porter ces outils de visualisation moléculaire dans des contextes plus immersifs [4].

En dépit de son importance pour la navigation, ces aides de navigation adaptées au contenu ne sont étonnamment que peu ou pas proposées dans les outils de modélisation et/ou visualisation moléculaire. Ce constat est fait par Marc Christie et al. [1] à travers un état de l'art des différentes techniques de contrôle de caméra.

Afin de répondre à ce besoin, nous proposons un système de navigation guidé par le contenu pour l'observation de complexes moléculaires. Ce développement tire parti de certains principes fondamentaux de la nature géométrique intrinsèque des complexes moléculaires et des besoins spécifiques des experts du domaine. Ces complexes présentent en effet des agencements symétriques spécifiques (figure 1). Ces symétries jouent un rôle majeur dans la stabilité et la fonction des complexes moléculaires dans les cellules vivantes [5]. A partir de ces informations géométriques et des tâches expertes identifiées en biologie structurale, un ensemble de chemins de navigation et d'interaction sont générés et sont utilisés comme base pour notre modèle de caméra (figure 2).

Pour ce faire, les informations de symétrie sont extraites manuellement ou automatiquement du système moléculaire étudié. Le système moléculaire est ensuite plongé dans une grille 3D. Chaque voxel contient plusieurs chemins et orientations préférentielles de caméra calculés en fonction de sa position par rapport aux éléments de symétrie, proposés à l'utilisateur (figure

2). Une interpolation trilineaire de la position et de l'orientation de la caméra est utilisée afin d'assurer un mouvement de caméra fluide et continu.

De manière complémentaire à ces guides de navigation, les éléments de symétrie entre monomère nous permettent aussi d'automatiser certaines tâches récurrentes de navigation, comme celle d'observer de manière successive une zone identique sur chaque occurrence d'un monomère.

Au-delà de la simple exploration, il est enfin possible d'exploiter les éléments de symétrie pour augmenter la lisibilité du phénomène observé ou l'accessibilité de certaine partie de l'objet d'intérêt. En effet, la densité des atomes à observer est parfois telle que certains objets, en dépit des algorithmes de meilleur point de vue, ne sont pas visibles car trop enfouis dans la protéine. Dans ce cas, les symétries peuvent constituer des centres ou axes « d'éclatement » qui vont servir de base pour enclencher un éloignement adapté des composants d'un complexe (figure 3).

Ces paradigmes de navigation sont en cours d'évaluation en utilisant un programme de visualisation moléculaire largement utilisé dans la communauté scientifique et appelé PyMol [6].

2 CONCLUSION

Les algorithmes de navigation guidée par le contenu de la scène scientifique à explorer, sont implémentés sous la forme de plugins pouvant être reliés de manière simple à tout programme autorisant l'accès au contrôle de sa caméra virtuelle. Cette possibilité est souvent permise parmi les logiciels experts de visualisation moléculaire. Ces aides à navigation ont un double rôle puisqu'ils doivent permettre d'explorer plus efficacement une scène scientifique virtuelle abstraite et d'aider à l'exécution de tâches de navigation expertes. Il est aussi important de noter que le contrôle de ces aides à la navigation, étant indépendant des dispositifs d'interaction utilisés, permet une certaine transparence entre les fonctionnalités de navigation proposées et le

contexte de travail, de bureau, mobile, ou immersif (clavier/souris, joystick, head-tracking,...).

3 REFERENCES

- [1] Christie, M., Olivier, P., & Normand, J. M. (2008, December). Camera control in computer graphics. In *Computer Graphics Forum* (Vol. 27, No. 8, pp. 2197-2218). Blackwell Publishing Ltd.
- [2] LaViola Jr, J. J. (2000). A discussion of cybersickness in virtual environments. *ACM SIGCHI Bulletin*, 32(1), 47-56.
- [3] Hanson, A. J., Wernert, E. A., & Hughes, S. B. (1997, June). Constrained navigation environments. In *IEEE Scientific Visualization Conference, 1997* (pp. 95-95).
- [4] Van Dam, A., Forsberg, A. S., Laidlaw, D. H., LaViola Jr, J. J., & Simpson, R. M. (2000). Immersive VR for scientific visualization: A progress report. *IEEE Computer Graphics and Applications*, 20(6), 26-52.
- [5] Goodsell, D. S., & Olson, A. J. (2000). Structural symmetry and protein function. *Annual review of biophysics and biomolecular structure*, 29(1), pp. 105-153.
- [6] DeLano, W. L. (2002). The PyMOL molecular graphics system.

- *Moi-même* : Groupe VENISE, LIMSI, rue John Von Neumann 91403 ORSAY CEDEX
E-mail : trellet@limsi.fr.
- *Co-auteur1* : Groupe VENISE, LIMSI, rue John Von Neumann 91403 ORSAY CEDEX
E-mail : ferey@limsi.fr
- *Co-auteur2* : Groupe VENISE, LIMSI, rue John Von Neumann 91403 ORSAY CEDEX
E-mail : bourdot@limsi.fr
- *Co-auteur3* : LBT-IBPC, 13 rue Pierre et Marie Curie 75005 PARIS
E-mail : baaden@smplinux.de

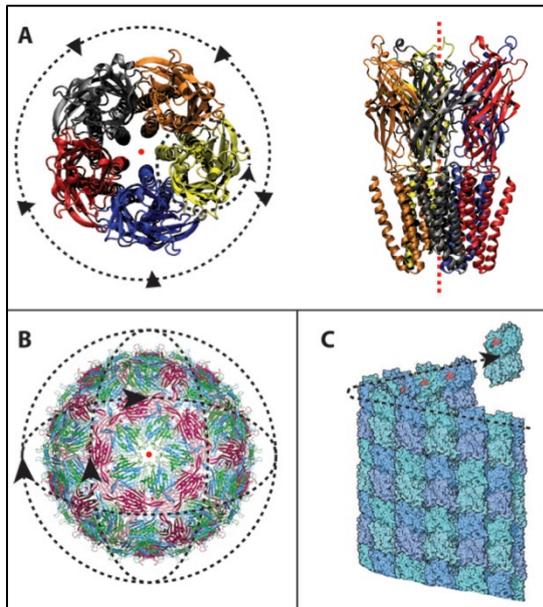


Figure 1 - Différentes structures moléculaires présentant des symétries. (A) GLIC, protéine transmembranaire composée de 5 monomères présentant un axe de symétrie. L'axe de symétrie est montré en rouge. (B) Capside de virus avec 2 types de monomères présentant un centre de symétrie confondu avec le centre de gravité du virus. (C) Enchevêtrement de molécules de tubulines formant un microtubule d'une symétrie plus complexe.

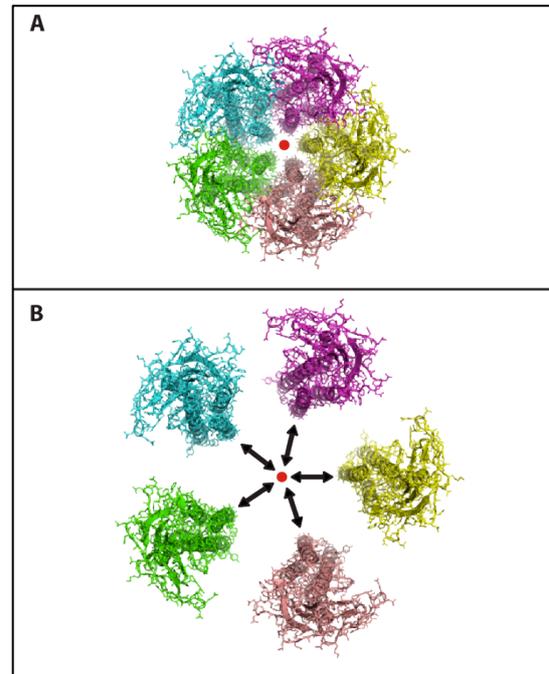


Figure 3 – Vue du dessus de la protéine GLIC. (A) Agencement par défaut des différents monomères. (B) Eclatement des monomères par translation selon un vecteur reliant l'axe de symétrie central au centre de masse de chaque monomère.

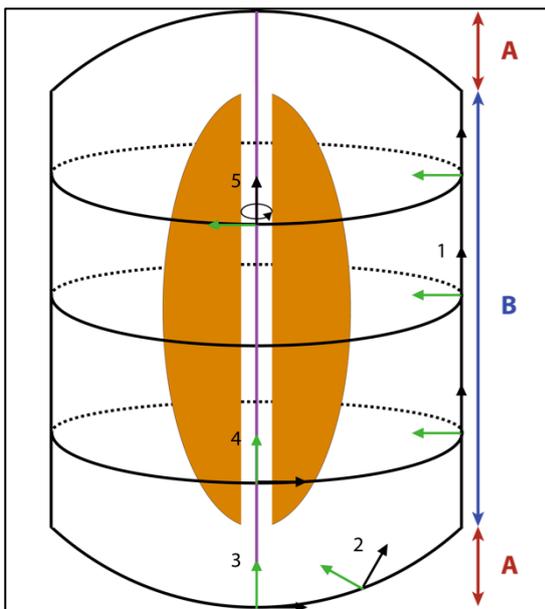


Figure 2 - Vue schématique des chemins de navigation et des orientations pour la caméra lorsqu'un axe de symétrie a été détecté. Le complexe moléculaire est représenté en orange, les zones A sont des zones hors structures alors que la zone B englobe l'ensemble de la structure le long de l'axe y. Chaque exemple de position de caméra est représenté par un numéro de 1 à 5. Le forward de la caméra est en vert et le up en noir.