



HAL
open science

Navigation guidée par le contenu pour l'exploration moléculaire.

M. Trellet, N. Férey, M. Baaden, P. Bourdot

► **To cite this version:**

M. Trellet, N. Férey, M. Baaden, P. Bourdot. Navigation guidée par le contenu pour l'exploration moléculaire.. Journées de l'Association Française de Réalité Virtuelle (AFRV), 2013, Laval, France. hal-01498083

HAL Id: hal-01498083

<https://hal.science/hal-01498083>

Submitted on 17 Dec 2022

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Navigation guidée par le contenu pour l'exploration moléculaire

Mikael Trellet^{*1}, Nicolas Ferey¹, Marc Baaden² et Patrick Bourdot¹

¹LIMSI, rue John Von Neumann 91403 ORSAY CEDEX

²LBT-IBPC, 13 rue Pierre et Marie Curie 75005 PARIS

ABSTRACT

De nombreuses techniques de navigation pour explorer des environnements virtuels ont été proposées. Cependant, la plupart de ces techniques sont guidées soit par un contexte d'interaction, ou par une motivation de reproduire une navigation proche des conditions écologiques. Cependant dans certaines situations particulières, comme en exploration de données scientifiques, les objets virtuels explorés sont très éloignés de l'expérience réelle de l'utilisateur. La conception de paradigme de navigation adapté aux objets scientifiques est donc plus complexe, et nécessite de prendre en compte les caractéristiques de ces objets, ainsi que le type de tâches à réaliser sur ces objets dans un environnement virtuel. Il existe peu de travaux liés à la conception de paradigmes de navigation guidée par le contenu et la tâche en visualisation scientifique, pourtant cette problématique est cruciale dans ce contexte, quelque soit le degré d'immersion. Nous présentons donc dans ce papier un travail en cours sur la conception d'un paradigme de navigation basé sur le contenu et sur la tâche, appliqué à l'exploration de données de biologie structurale.

Keywords: visualisation moléculaire, navigation sous contrainte, biologie structurale.

Index Terms: H.5.1 [Information Interfaces and Presentation]: Multimedia Information Systems—Artificial, augmented, and virtual realities;

1 INTRODUCTION

La navigation est un prérequis à toute exploration d'environnement virtuel. De nombreuses problématiques liées au contrôle de cette navigation ont été traitées [1], mais rarement en tenant compte du contenu du monde virtuel ou de la tâche à réaliser dans ce monde. Pour intégrer ce « *content awareness* » dans les techniques de navigation déjà proposées, il est important de bien caractériser 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 la plupart des 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 la diminution du cybersickness [3] par une plus forte

implication physique ou de la perte de repère. Par exemple, quand il s'agit d'explorer un bâtiment ou une ville, il est raisonnable de penser qu'utiliser une technique de Walking-In-Place [2], soit adaptée pour explorer cette scène réaliste. En effet dans ce cas, le paradigme utilisé est par nature adapté au contenu, et donc la problématique est reportée sur le fait d'apporter un certain degré de réalisme du paradigme à l'aide des dispositifs d'interaction ou de tracking disponibles. Cette analogie s'applique également au métaphore de navigation imitant la conduite de véhicule, ou le vol. A l'inverse, l'observation 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. Dans cet article, nous nous plaçons dans cette dernière catégorie et nous nous concentrerons plus particulièrement sur l'exploration de complexes moléculaires. En absence de toute contraintes liées à la nature des données scientifiques abstraites, la possibilité de se déplacer arbitrairement et librement comme proposé dans la plupart du cas constitue un problème. L'absence de points de repère naturels, d'orientation intrinsèque des objets explorés, leur complexité, sont autant de facteurs qui augmentent l'inconfort de l'utilisateur, perturbe son orientation spatiale, et diminue l'efficacité dans la réalisation d'une tâche. Quand à cela s'ajoute une totale liberté de mouvement qui est très éloignée de condition écologique, cela aboutit la plupart du temps au phénomène de cybersickness [3] perturbant totalement l'expérience immersive et réduisant significativement la réalisation des tâches en environnement virtuel. Ainsi, la mise en place de guides de navigation qui prennent leur sens dans le contenu de la scène virtuelle à explorer est un aspect critique pour une expérience 3D réussie en visualisation scientifique immersive, remarque également applicable à un contexte de bureau.

Cette nécessité a tout d'abord été soulignée par Hanson et al. [4] qui mettent en avant plusieurs familles de navigation sous contraintes améliorant de manière significatif l'expérience de l'utilisateur. En biologie structurale, la visualisation scientifique est une activité primordiale et indispensable dans la production du savoir à partir de données expérimentales. L'apport indéniable de l'immersion face à ces objets complexes a rapidement mené à de nombreux travaux pour porter ces outils de visualisation moléculaire dans des contextes plus immersifs. Joseph J. LaViola et al. [5] définissent la navigation dans le cadre de la visualisation scientifique comme pouvant être divisée en 3 catégories :

- L'exploration, navigation sans cible précise.
- La recherche, navigation à travers l'objet en direction d'une localisation particulière.
- La manœuvre, mouvements rapides et très précis visant à placer l'utilisateur dans une position et orientation optimales pour l'exécution d'une autre tâche.

* mikael.trellet@limsi.fr

En dépit de son importance pour la navigation, l'implémentation d'aides de navigation n'est étonnement pas ou peu effectuée dans les programmes de modélisation et/ou visualisation moléculaire. Ce constat est fait par Marc Christie et al. [1] dans une revue des différentes techniques de contrôle de caméra. Que nous nous placions en situation immersive ou non, la navigation contrainte et modulée par le contenu n'est que peu développée dans les programmes usuels de visualisation scientifiques.

Nous proposons dans cette étude un système de navigation modulée par le contenu pour l'observation de complexes moléculaires qui tentera de répondre aux 3 aspects de la navigation énumérés précédemment. Dans une première partie nous étudierons les principes fondamentaux de la visualisation moléculaire qui rendent importants le développement de guides de navigation en immersion à travers la nature géométrique intrinsèque des complexes moléculaires et les besoins spécifiques des experts du domaine. Une seconde partie fera état du modèle de caméra que nous avons développé à partir des informations géométriques présentées et des tâches spécifiques qu'un expert du domaine réalise fréquemment. Enfin, nous apporterons les éléments nécessaires à l'évaluation de ces paradigmes de navigation dans en utilisant un outil de visualisation moléculaire le plus communément utilisé. Cette démarche d'évaluation scientifique s'inscrit dans 3 contextes correspondant aux usages dans le domaine de la biologie structurale :

- Immersion totale et perceptive dans un système de type CAVE. L'utilisateur est plongé au cœur de la scène virtuelle, la navigation se fait via des dispositifs ou des techniques de navigation basée sur le tracking de dispositif d'interaction.
- Immersion partielle, perceptive et cognitive, à travers l'utilisation d'un dispositif mobile de type tablette constituant une fenêtre sur le monde virtuel. Le déplacement et l'orientation de la tablette dans l'espace dirigent l'orientation de la caméra virtuelle alors que des interactions tactiles contrôle la navigation.
- Espace de travail quotidien des experts du domaine sur ordinateur avec écran 2D. Navigation via la souris et le clavier.

2 FORMALISATION DES CONTENUS EN BIOLOGIE STRUCTURALE

La mise en place d'un modèle de caméra découle à la fois des contraintes inhérentes à la visualisation en condition immersive ainsi que des possibilités de navigation extractibles de la géométrie particulière de plusieurs types de complexes moléculaires.

La notion de symétrie est primordiale en biologie moléculaire. De nombreuses symétries interviennent très souvent dès lors que le complexe moléculaire est composé de plusieurs chaînes identiques communément appelées monomères. Les monomères de complexes moléculaires adoptent de telles géométries afin d'optimiser d'un point de vue énergétique leur stabilité. De plus, il est largement acquis que la symétrie de ces complexes est directement liée à certaines de leurs fonctions et donc indispensable au bon fonctionnement d'une cellule biologique [6]. Plusieurs types de symétrie ont été identifiés et constituent les bases géométriques de ces complexes (Figure 1).

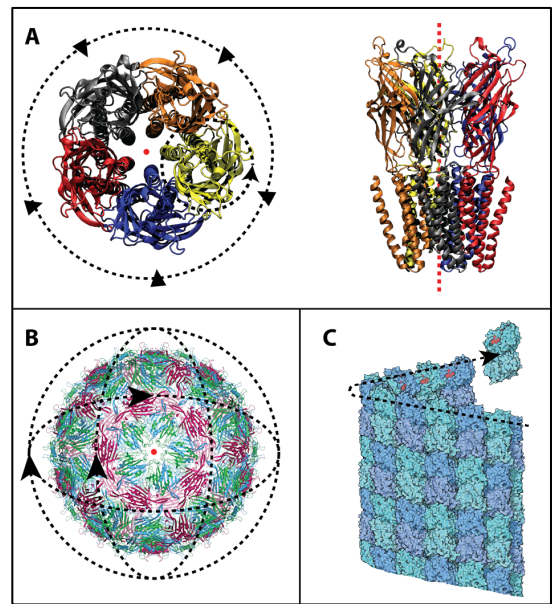


Figure 1: Différentes structures moléculaires présentant des symétries. (A) GLIC, protéine transmembranaire composée de 5 monomères présentant un axe de symétrie. À gauche la protéine est représentée en vue de dessus, à droite cette même protéine est vue de façon transversale. (B) Capside de virus avec 2 types de monomère présentant un centre de symétrie confondu avec le centre de gravité du virus. (C) Enchevêtrement de molécules de tubulines formant une microtubule.

Chaque symétrie peut servir de base pour un système de navigation. Un des cas les plus représentés parmi les complexes moléculaires est la symétrie axiale reliant les différents monomères d'un complexe plus ou moins cyclique (Figure 1A). Ces complexes présentent souvent des événements importants répétés sur chacun des monomères à des régions précises qu'il est souvent intéressant d'observer et de comparer.

Les virus présentent un nombre important de symétries, la plupart centrales mais dont les angles et distances de rotations sont très variables et amènent à une liste importante de possibilités de structures, la plus commune étant la répétition d'un ou deux monomères autour d'un centre de symétrie fixe (Figure 1B).

Les symétries dites « hélicoïdales » sont souvent adoptées par les complexes moléculaires avec un rôle structurel important (figure 1C). Nous pouvons prendre l'exemple des filaments de tubuline (microtubules) qui sont responsables, entre autres, de la mobilité cellulaire et des mouvements intracellulaires. Ces complexes voient leurs composants adopter une symétrie mettant en jeu à la fois une translation et une rotation de chaque monomère par rapport au suivant ou au précédent.

En dépit de leur importance dans les nombreuses fonctions des cellules que nous venons de citer de façon non exhaustive, peu d'algorithmes sont dédiés à l'identification des axes ou centres de symétrie au sein de complexes moléculaires. Parmi les algorithmes de détection de symétrie, à ce jour et à notre connaissance, seul SymD [7] est disponible en ligne et utilisable sur un complexe structural se présentant sous format PDB, format de fichier regroupant comme information principale les coordonnées en 3 dimensions de chaque atome composant un complexe. SymD qui s'appuie sur un algorithme d'alignement et

de permutation des monomères composant un complexe pour identifier les symétries et est accessible via un serveur web ou via un exécutable. Malgré sa relative efficacité, SymD ne peut traiter les structures de plus de 10 000 atomes et manque donc la plupart des larges complexes présentant les symétries les plus remarquables et dont dépendent les principales fonctions. De plus, il se cantonne aux symétries axiales simples. Ces symétries constituant le point de départ à la conception des guides de navigation qui seront décrits ensuite, la détection automatique de symétries variées (centrales, axiales ou hélicoïdale) dans des systèmes moléculaires complexes, est un élément central, mais non abordé dans cet article.

3 BESOINS UTILISATEURS POUR NAVIGATION EN BIOLOGIE STRUCTURALE

La visualisation de complexes moléculaires a été mise à la portée de tous grâce à de nombreux programmes dédiés à cette tâche comme PyMol [8] ou VMD [9] pour ne citer qu'eux. Afin d'appliquer et ainsi évaluer nos algorithmes de navigation, nous avons choisi de développer un plugin PyMol se basant sur le langage python et possible grâce à l'API disponible pour ce programme. Ce développement permet une première approche de la pertinence des algorithmes au sein d'un programme largement utilisé par la communauté scientifique.

3.1 Tâches de navigation

Il est relativement aisé de regrouper les tâches de navigation en fonction des symétries que les complexes moléculaires présentent. Comme évoqué précédemment, une navigation libre peut être problématique pour l'orientation des utilisateurs dans une scène virtuelle et induit une perte des repères dans l'espace préjudiciable pour les tâches d'interaction ou d'analyses normalement effectuées en visualisation moléculaire.

Il est par exemple très difficile de visualiser une région spécifique et répétée sur chaque monomère d'un complexe moléculaire. Une navigation libre et non contrainte rend très difficile l'observation de ces régions de façon rapide et uniforme concernant le point de vue de la caméra. Le déplacement pour rejoindre les différentes régions d'intérêt demandant des successions de mouvements à la fois pour se situer et pour se déplacer difficiles au sein de telles structures à plusieurs milliers d'éléments non orientés. En se basant sur les symétries identifiées dans la structure, une des fonctionnalités de navigation importante est de pouvoir naviguer séquentiellement sur chacune des régions. L'impression de « sauter » d'un monomère à l'autre de façon quasi instantanée est particulièrement recherchée dans la comparaison de site d'intérêt de taille limitée comme les poches de liaison de ligand ou les structures dynamiques impliquées dans la stabilité des complexes.

A la difficulté de parcourir des régions similaires de façon uniforme entre les différentes répétitions de monomères se rajoutent les problèmes d'occultation de points de vue qui peuvent perturber l'observation d'une région encastrée au sein du complexe moléculaire. Ceci constitue une tâche typique et régulière lors de la visualisation moléculaire et n'est pourtant que rarement prise en compte. Notre aide à la navigation se propose donc de trouver le meilleur point de vue pour une région donnée afin de minimiser les occultations entre la caméra et avec le point d'intérêt.

La présence d'un axe de symétrie peut impliquer dans certains complexes la présence d'un pore, en particulier chez les protéines transmembranaires, protéines qui constituent une porte de passage entre l'extérieur et l'intérieur d'une cellule. Ces pores sont

souvent le lieu de nombreuses interactions et d'enjeux majeurs pour la recherche. Dans cette optique, nous avons décidé de faciliter l'exploration de ces « couloirs » en imposant des chemins de navigation le long des axes de symétrie détectés.

Les premières étapes de la visualisation d'un complexe se font souvent à travers la découverte de la forme générale de la forme du complexe. Ces étapes nécessitent donc d'avoir une vue générale et donc éloignée du complexe tout en évitant toute perte de repères spatiaux pour l'utilisateur. Ceci peut se faire grâce à des contraintes d'orientation et de mouvements de la caméra.

Les protéines, constituant la majeure partie des complexes étudiés, sont agencées en structures tertiaires qui obéissent à certaines règles structurelles naturelles identifiées depuis plusieurs années (Figure 2B). Il est parfois intéressant de parcourir ces motifs géométriques précis pour apprécier l'agencement de complexes particuliers. La mise en place de chemins de navigation suivant ces motifs géométriques a été réalisée en suivant la métaphore des montagnes russes, minimisant les interactions nécessaires du côté utilisateur. Ce dernier ne contrôle que le chemin de navigation mais n'aurait que peu ou pas de pouvoir décisionnel sur l'orientation de la caméra conditionnée par la position de la caméra par rapport à la structure et à ses éléments de symétrie.

3.1.1 Tâches expertes de haut-niveau

La visualisation est le support de plusieurs tâches expertes que les scientifiques effectuent pour obtenir davantage d'informations sur le complexe moléculaire étudié. Nous référençons plusieurs des tâches régulières que sont amenées à réaliser les utilisateurs.

La sélection de régions similaires et répétées entre les monomères d'un complexe permet l'extraction d'atomes comme objets graphiques utilisés ensuite pour des analyses géométriques standards telles que le Root Mean Square Deviation (RMSD) qui permet de quantifier la différence de conformation entre deux régions de même composition. Plusieurs autres comparaisons comme le nombre de liaisons formées au sein d'une région ou la taille d'éventuelles poches accessibles pour des liaisons externes sont également des éléments de comparaison utilisés régulièrement pour étudier un complexe.

Le calcul de la distance entre deux atomes ou groupes d'atomes est très usitée et peut se complexifier de façon importante pendant la navigation. Une des raisons de la complexité de ces analyses est la présence de nombreux atomes dans un complexe et la difficulté d'identifier et de sélectionner le ou les élément(s) d'intérêt.

Beaucoup de protéines transmembranaires possèdent un pore (passage entre l'intérieur et l'extérieur de la cellule) au sein de leur structure. Ce pore est retrouvé dans deux états structuraux majoritaires, un état dit « ouvert » et un état dit « fermé ». Ces pores sont le lieu de passages obligatoires de nombreuses molécules de taille réduite, comme l'eau, transitant entre les parties extra- et intra-cellulaires. Le volume et le rayon du pore est donc une information primordiale pour identifier leur capacité à laisser passer telle ou telle molécule et les différentes étapes de ce passage.

4 MODELE DE CAMERA

Notre modèle de caméra répond aux différents besoins utilisateurs identifiés précédemment à travers des modes de navigation distincts mais pouvant potentiellement être couplés.

4.1 Grille de navigation

Suite à l'obtention manuelle ou automatique des axes/centres de symétrie ainsi qu'aux angles de rotations autour de ces axes qui permettent d'obtenir toutes les transformations entre chaque monomère, notre première étape est de plonger le complexe moléculaire dans une grille 3D régulière que nous considérons comme une grille de guide de la navigation. La taille de la grille est directement corrélée à la taille du complexe moléculaire observé et doit permettre une observation du complexe à la fois lointaine et rapprochée. Ses dimensions suivent la formule suivante pour chacun des axes x , y et z :

$$\text{dim}_x = (\max(x_{\text{coords}}) - \min(x_{\text{coords}})) * \text{extension} \quad (1)$$

dim_x représente les dimensions selon l'axe x , x_{coords} sont l'ensemble des coordonnées de la structure pour l'axe x et extension est un facteur multiplicatif rendant compte de combien de fois la grille sera plus grande que la boîte englobante de la structure moléculaire.

Chaque cellule de la grille contient les informations d'orientation de la caméra sous forme de vecteurs orthogonaux correspondant aux *forward*, *right* and *up* de la caméra. De plus, suivant la position de la cellule par rapport au complexe observé et les transformations de symétrie détectées, chaque cellule possède nombre réduit (2 à 3) d'orientations préférentielles proposées à l'utilisateur en cours de navigation.

La grille impose donc des limites de positionnement de la caméra dans un espace restreint mais suffisant pour explorer le complexe dans son intégralité.

4.2 Modes de navigation

Quand un centre de symétrie est détecté, la caméra est orientée de façon à toujours faire face au centre de symétrie. Les déplacements en haut, en bas, à droite et à gauche sont effectués de façon identique et le *up* de la caméra est paramétré via un modèle de vecteur global défini par Azam Khan et al. [10].

Dans le cas où un axe de symétrie est détecté nous orientons la grille de façon à ce que l'axe de symétrie constitue l'axe $\{0.0 ; 1.0 ; 0.0\}$ du repère $\{x, y, z\}$ de la grille. Dans le cadre d'une exploration « simple » de la structure, un premier mode de navigation donne le *up* de la caméra comme parallèle à l'axe de symétrie quand la caméra est au niveau de la structure (Figure 2, zone B). Dans les zones externes de la structure (Figure 2, zones A) le *up* suit le modèle de vecteur global lorsque la hauteur de la caméra est en dehors des limites en y de la structure. De même, la caméra a un *forward* pointant vers l'axe de symétrie et donc orthogonal à son *up* quand la caméra est dans la zone de la structure (Figure 2, position 1). Dans cette zone (B), les translations de caméra à 6 degrés de liberté se font suivant les 3 axes $\{x,y,z\}$. Le long du *forward* pour un effet de « zoom-in » / « zoom-out » de façon orthogonale à l'axe de symétrie, le long des vecteurs *right* successifs afin de tourner autour de la structure et enfin suivant le *up* pour monter et descendre le long d'un axe parallèle à l'axe de symétrie de la structure. L'aspect discret de la grille pré calculée est rendu continu par une interpolation de reconstruction tri-linéaire (Figure 2). Cette interpolation d'orientation en fonction de la position de la caméra garantit une

continuité à la fois à l'intérieur des cellules mais également entre les cellules. De manière générale, il est nécessaire de passer d'un point de vue à un autre. Les techniques classiques de type SLERP, sont inadaptées car elles ne permettent pas de respecter les orientations et les chemins préférentiels de la caméra imposés à partir du contenu. Ces chemins et orientations préférentiels (voir section précédente) pré calculés en fonction du contenu sont donc utilisés pour passer d'un point de vue à l'autre.

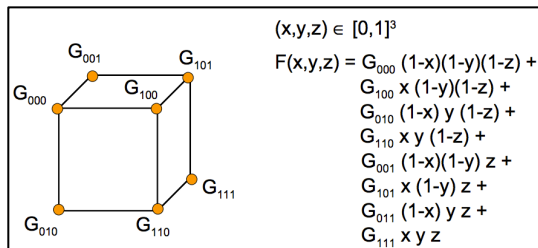


Figure 2: Méthode d'interpolation par reconstruction tri-linéaire

En dehors de la zone B, la caméra pointera vers l'extrémité de la structure dont elle est la plus proche (Figure 2, position 2) jusqu'à ce que le *forward* soit confondu avec l'axe de symétrie (Figure 2, position 3).

Ce positionnement de la caméra sur l'axe de symétrie rend possible un mode de navigation le long de l'axe de symétrie pour traverser le complexe (Figure 2, position 4). Quand la caméra est à l'intérieur du complexe, un nouveau mode de navigation est possible pour l'exploration du pore en lui-même (Figure 2, position 5). Dans ce mode, le *forward* de la caméra peut être tourné sur 360 degrés alors que le *up* est fixé par la direction de l'axe. Le mouvement pourrait donc s'apparenter à celui d'un ascenseur avec vue panoramique, permettant d'observer la structure de l'intérieur.

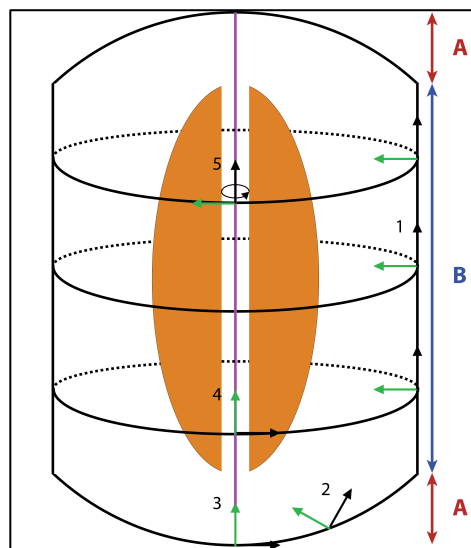


Figure 3: Vue schématique des chemins de navigation et des orientations pour la caméra lorsqu'un axe de symétrie a été détecté. Le complexe moléculaire est représenté en orange, les zones A sont des zones hors structures alors que la zone B englobe l'ensemble de la structure le long de l'axe y . Chaque 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.

De manière complémentaire, et pour répondre aux besoins métiers des experts du domaine, la possibilité de cibler une région particulière d'un monomère de la structure, et de ce déplacer sur la région analogue du monomère suivant, se découpe en 4 étapes successives :

1. Une navigation contrainte comme celle illustrée en Figure 3 ou navigation libre de l'utilisateur pour faire face à la région d'intérêt
2. Désignation de la zone d'intérêt
3. Mémorisation de la région afin d'enregistrer les informations de point de vue dans le référentiel d'un monomère
4. Passage au monomère suivant grâce aux informations de symétrie (axe, angle,...) détectées de façon automatique ou manuelle.

4.3 Grille d'accessibilité

Le mode de navigation précédent se couple à la recherche d'un point de vue optimal par rapport à une zone d'intérêt indiquée par l'utilisateur. Une grille de d'accessibilité discrétisant le volume occupé par les atomes est construite à priori autour du complexe.

L'algorithme de proposition du meilleur point de vue fonctionne de la façon suivante. En fonction d'une cible désignée par l'utilisateur, une sphère est créée autour de ce point, avec un rayon qui correspond à une distance paramétrable entre la caméra et la cible. La surface de cette sphère est discrétisée en coordonnées cylindriques pour plus de commodité. Depuis chaque élément de surface de la sphère est lancé un rayon vers la cible. Si un rayon croise une cellule pleine de la grille d'accessibilité, cet élément est noté comme étant occulté. A la fin de cette passe, on parcourt le tableau 2D, chaque case correspondant à un élément de la surface discrétisée de la sphère, et on extrait les zones ayant les plus grandes aires. Le milieu de ces aires, une fois transformé en position 3D, constitue les points d'observation qui présentent le moins d'occultation pour observer ces cibles. Ces points de vue sont alors proposés à l'utilisateur en modifiant la position et l'orientation de la caméra pour correspondre à ce point de vue. Comme plusieurs point de vue optimaux sont possibles, et qu'il est fréquent que le point de vue optimale ne soit pas celui désiré par l'utilisateur, celui-ci peut passer au point de vue suivant, présentant un peu plus d'occultation, mais plus adapté à sa tâche.

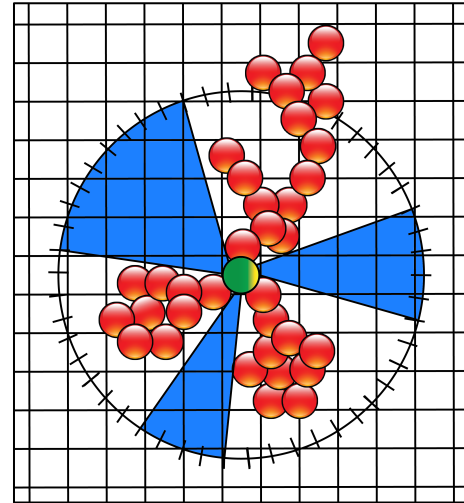


Figure 4: Grille d'accessibilité autour d'une région d'intérêt (en vert) permettant la découverte d'aires d'observation optimales (en bleues) comportant un minimum d'élément d'occultation (en rouge)

La grille d'accessibilité est aussi utilisée pour suivre des surfaces protéiques (voir Figure 5) ou de membrane. Le *up* de la caméra est aligné sur la normale de la surface s'effectue comme sur un terrain en contraignant les contrôles de navigation aux mouvements avant, arrière, droite et gauche, auxquels s'ajoute le contrôle d'un degré de liberté en rotation pour tourner autour de l'axe *up* de la caméra normale à la surface.

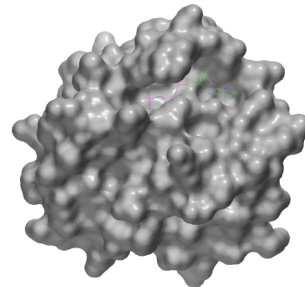


Figure 5: Représentation de la surface d'une protéine

5 DISCUSSION ET PERSPECTIVES

L'immersion pour la visualisation moléculaire apporte une dimension importante pour l'étude de phénomènes biologiques. Cependant, sans technique de navigation adaptée, elle souffre d'un manque de repères spatiaux inhérent à la nature des objets observés, ceux-ci étant abstraits et pour la plupart non orientés. La mise en place de guides de navigation permet de forcer une orientation lors de l'exploration et donc de réduire significativement les pertes de repères des utilisateurs. Pertes de repères pouvant entraîner une gêne trop importante pour l'exécution d'une tâche métier. Ces guides de navigation vont plus loin puisqu'ils facilitent également l'exécution de tâches expertes et habituelles.

La navigation au sein des 3 dispositifs que constituent les systèmes d'immersion totale (système CAVE par exemple), les systèmes d'immersion partielle (utilisation de dispositif mobile orienté dans l'espace constituant une fenêtre orientable vers la scène virtuelle) et enfin les systèmes classiques d'ordinateur de bureau doit être évaluée. La navigation en condition immersive a été l'objet de plusieurs études et un consensus s'est dégagé quant à son évaluation par rapport aux méthodes de navigation classiques. Bowmann et al. [11] met en évidence plusieurs critères d'évaluation indispensables pour une comparaison complète et pertinente : La vitesse d'exécution d'une tâche, la précision de cette exécution, la sensibilité spatiale de l'utilisateur dans la scène virtuelle pendant et après la navigation, la facilité d'apprentissage de la technique de navigation pour un novice, la facilité d'utilisation, la capacité d'un utilisateur à collecter des informations dans l'environnement virtuel, la sensation d'immersion de l'utilisateur dans la scène virtuelle et enfin le confort de l'utilisateur pendant la navigation. Ces différents critères seront utilisés pour évaluer des paradigmes de navigation considérés comme standards à nos nouveaux paradigmes s'adaptant au contenu et à la tâche.

Il nous semble important de noter que les guides de navigation mises en évidence dans cet article peuvent être dissociés des dispositifs ou techniques de navigation utilisés. En effet les paradigmes de navigation peuvent s'adapter à des dispositifs de navigation variés, de la simple utilisation du couple clavier/souris, manette de jeu ou joystick, à des dispositifs immersifs de type souris3D, flystick ou navigation basée sur le tracking de l'utilisateur [12][13]. Nous soulignons ici qu'un paradigme de navigation devrait intégrer deux niveaux de conception. La définition des contraintes liée aux contenus des scènes à explorer, et les modalités de contrôle de la navigation respectant ces contraintes. De ce fait, un contrôle de navigation peut facilement se substituer à un autre, en assurant une unité de comportement de caméra défini en fonction du contenu de la scène virtuelle.

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] Usoh, M., Arthur, K., Whitton, M. C., Bastos, R., Steed, A., Slater, M., & Brooks Jr, F. P. (1999, July). Walking > walking-in-place > flying, in virtual environments. In *Siggraph* (Vol. 99, pp. 359-364).
- [3] LaViola Jr, J. J. (2000). A discussion of cybersickness in virtual environments. *ACM SIGCHI Bulletin*, 32(1), 47-56.
- [4] Hanson, A. J., Wernert, E. A., & Hughes, S. B. (1997, June). Constrained navigation environments. In *IEEE Scientific Visualization Conference, 1997* (pp. 95-95).
- [5] 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.
- [6] Goodsell, D. S., & Olson, A. J. (2000). Structural symmetry and protein function. *Annual review of biophysics and biomolecular structure*, 29(1), pp. 105-153.
- [7] Kim, C., Basner, J., & Lee, B. (2010). Detecting internally symmetric protein structures. *BMC bioinformatics*, 11(1), 303.
- [8] DeLano, W. L. (2002). The PyMOL molecular graphics system.
- [9] Humphrey, W., Dalke, A., & Schulten, K. (1996). VMD: visual molecular dynamics. *Journal of molecular graphics*, 14(1), 33-38.
- [10] Khan, A., Komalo, B., Stam, J., Fitzmaurice, G., & Kurtenbach, G. (2005, April). HoverCam: interactive 3D navigation for proximal object inspection. In *Proceedings of the ACM 2005 symposium on Interactive 3D graphics and games* (pp. 73-80).
- [11] Bowman, D. A., Koller, D., & Hodges, L. F. (1997, March). Travel in immersive virtual environments: An evaluation of viewpoint motion control techniques. In *Proceedings of IEEE Virtual Reality, 1997* (pp. 45-52).
- [12] Chen W., Plancoulaine A., Férey N., Touraine D., Nelson J. & Bourdot P. (2013, October). 6DoF navigation in virtual worlds : comparison of joystick-based and head-controlled paradigms. *VRST 2013 (in press)*.
- [13] Bourdot, P., & Touraine, D. (2002). Polyvalent display framework to control virtual navigations by 6DOF tracking. In *Proceedings of IEEE Virtual Reality, 2002*. (pp. 277-278).