

Représentation intuitive et ergonomique en réalité virtuelle des structures de protéines et de leurs propriétés.

Les protéines et les acides nucléiques (ADN, ARN) sont des macromolécules biologiques qui jouent des rôles prépondérants dans le fonctionnement des organismes vivants. La biologie structurale est le domaine de recherche dont la finalité est d'interpréter les structures 3D de protéines pour comprendre leur fonctionnement et expliquer des phénomènes tels que la reconnaissance moléculaire ou la réactivité chimique. Généralement, les structures 3D de ces macromolécules sont adossées à des propriétés complémentaires, notamment de nature électrostatiques, simulées par calculs sur la base de la structure. L'analyse visuelle par un expert de ces structures de protéines et de leurs propriétés physiques est nécessaire pour en extraire des informations pertinentes, et contribue donc significativement au processus de déduction d'un chercheur en biologie structurale. De ce fait, la représentation tridimensionnelle de ces grandes molécules permet d'améliorer considérablement la perception que peuvent en avoir les chercheurs ; l'usage de lunettes « stéréo 3D » est donc de mise dans les laboratoires de biologie structurale. Cette technologie aujourd'hui en déclin est supplantée par les technologies immersives de réalité virtuelle qui permettent à l'utilisateur d'être totalement immergé dans un environnement 3D artificiel, et d'interagir « physiquement » avec les objets représentés dans l'environnement simulé grâce à des systèmes de reconnaissance de mouvements. Cette nouvelle perception des structures 3D peut conduire à un changement de paradigme dans l'étude des relations entre la structure et la fonction des macromolécules biologiques. L'originalité réside dans le couplage de la réalité virtuelle avec les méthodes d'analyse basées sur la densité électronique développées au CRM2.

Le chercheur postdoctoral aura pour mission de développer un prototype logiciel permettant l'exploration interactive, en réalité virtuelle, des structures 3D de protéines et de leurs propriétés électrostatiques. Ces propriétés seront basées sur les développements méthodologiques réalisés au CRM2, notamment par un étudiant doctorant avec lequel le chercheur postdoctoral travaillera en collaboration. L'interface de ce prototype logiciel et son ergonomie seront pensées en s'appuyant sur les concepts « d'interface intelligente » issus du domaine de l'ergonomie de l'interaction homme-machine. Le chercheur postdoctoral collaborera avec des spécialistes des domaines de l'ergonomie cognitive pour valider l'hypothèse selon laquelle la perception en réalité virtuelle de structures 3D de protéines, accompagnée de leurs propriétés électrostatiques, peut constituer une aide à l'interprétation et à la déduction en biologie structurale.

La durée de ce stage postdoctoral dans le groupe BioMod du laboratoire CRM2 (Nancy) est limitée à **un an**, non renouvelable. Le candidat jeune chercheur doit avoir soutenu sa thèse **après 2016** dans un domaine connexe à l'informatique graphique ou la modélisation informatique des macromolécules biologiques. Une excellente maîtrise du développement informatique (notamment C++) est requise, et une connaissance des approches de calcul parallèle sur GPU (CUDA) est un plus.

Remarque importante : ce postdoc est conditionné à l'obtention d'un co-financement par la Région Grand-Est dont la décision, suite à la crise du covid19, ne sera connue qu'en Novembre 2020. Si elle est favorable, le stage postdoctoral débutera au plus tôt dès lors que la décision sera connue.

Contact : Benoit Guillot (benoit.guillot@univ-lorraine.fr) et/ou Claude Didierjean (claudio.didierjean@univ-lorraine.fr) – Laboratoire CRM2 (groupe BioMod), UMR7036 CNRS Université de Lorraine (Nancy, France)

Intuitive and ergonomic virtual reality representation of protein structures and their properties.

Proteins and nucleic acids (DNA, RNA) are biological macromolecules which play major roles in living organisms. Structural biology is the field of research whose purpose is to interpret the 3D structures of proteins to understand their function and to explain for instance molecular recognition or chemical reactivity. Generally, the 3D structures of these macromolecules are backed by complementary properties, in particular of electrostatic nature, computed on the basis of the structure. Visual analysis by an expert of these protein structures and their physical properties is necessary to extract relevant information, and therefore contributes significantly to the deduction process of a structural biologist. Therefore, the three-dimensional representation of these large molecules can considerably improve the perception that researchers can have of them; the use of "stereo 3D" glasses is therefore required in structural biology laboratories. This technology now in decline is supplanted by immersive virtual reality technologies which allow the user to be totally immersed in an artificial 3D environment, and to interact "physically" with the objects represented in the simulated environment thanks to movement recognition systems. This new perception of 3D structures may lead to a paradigm shift in the study of the relationships between the structure and function of biological macromolecules. The originality lies in the coupling of virtual reality with the analysis methods based on electron density developed at CRM2.

The postdoctoral researcher will have for mission to develop a software prototype allowing the interactive exploration, in virtual reality, of the 3D structures of proteins and their electrostatic properties. These properties will be based on methodological developments carried out at CRM2, in particular by a PhD student with whom the postdoctoral researcher will work in collaboration. The interface of this software prototype and its ergonomic will be designed based on the concepts of "intelligent interface" from the field of ergonomics of human-machine interaction. The postdoctoral researcher will collaborate with specialists in the fields of cognitive ergonomics to validate the hypothesis according to which the virtual reality perception of 3D structures of proteins, accompanied by their electrostatic properties, can constitute an aid to interpretation and deduction in structural biology.

The duration of this postdoctoral fellowship in the BioMod group of the CRM2 laboratory (Nancy) is limited to **one year**, non-renewable. The young researcher candidate must have defended his thesis **after 2016** in a field related to computer graphics or computer modeling of biological macromolecules. Excellent skills in computer programming are required (notably C++), and knowledge of parallel GPU computing (CUDA) is a plus.

Important note: the funding for this postdoctoral internship depends on obtaining co-financing by the Grand-Est Region whose decision, because of the covid19 crisis, will not be known until November 2020. If favorable, the postdoctoral fellowship will begin as soon as the decision is known.

Contact : Benoit Guillot (benoit.guillot@univ-lorraine.fr) and/or Claude Didierjean (claudedidierjean@univ-lorraine.fr) –CRM2 laboratory (BioMod group), UMR7036 CNRS Université de Lorraine (Nancy, France)