

Illustration moléculaire en Chimie et Biologie : exemples, état de l'art et perspectives

◇ Marc Baaden

Depuis les travaux de Léonard de Vinci, l'illustration scientifique a beaucoup évolué : passant de simples dessins à des représentations de plus en plus sophistiquées et complexes au fur et à mesure que les connaissances avançaient. Le passage du niveau macroscopique au niveau microscopique se fait, dans la réalité, de façon continue, mais en pratique des disciplines comme l'illustration médicale et l'illustration moléculaire appartiennent encore à des mondes différents. Ceci peut s'expliquer par une grande variété des objets à représenter. Cependant on peut remarquer que certaines techniques employées dans ces deux domaines se ressemblent. De plus, il y a encore peu de temps, le monde des molécules nous était complètement invisible. Comme le disait Richard Feynman, à la fin des années 50, en parlant de ce nanomonde que l'on découvrait à peine : « Il y a plein de place en dessous » nous pourrions rajouter qu'il y a aussi plein de choses à voir ! Ici, nous parcourons cet univers au cœur de chacun pour voir comment les chercheurs tentent de le peindre. Dans le monde moléculaire, la représentation visuelle de la structure d'une molécule et de ses propriétés est primordiale : « Dis-moi ton agencement, je te dirai qui tu es ». Or ceci n'est possible que depuis relativement peu de temps : la modélisation moléculaire de macromolécules biologiques trouve ses origines au début des années 60 où Sir John Kendrew créait des modèles en fil de fer ou en pâte à modeler. Quelques années plus tard, Cyrus Levinthal et ses collègues

◇ Chercheur au CNRS à l'interface chimie-biologie-informatique

Marc Baaden est un chimiste théoricien au CNRS à Paris, étudiant les approches de modélisation moléculaire interactives de systèmes biologiques complexes. La visualisation moléculaire représente une part essentielle de ces travaux alliant le calcul intensif et la réalité virtuelle, avec des perspectives particulièrement stimulantes offertes par les dernières générations de cartes graphiques.

p.74

Molecular Illustration in Chemistry and Biology: examples, state-of-art and outlook

Since the works of Leonardo da Vinci, scientific illustration has made much progress: going from simple drawings towards more and more refined and complex representations as knowledge progressed. The transition from the macroscopic to the microscopic level is, in reality, a continuous one. In practice, disciplines such as medical and molecular illustration do still represent separate universes. This may be explained by the great diversity of the objects that are represented. Nevertheless many techniques employed in both domains are similar. Furthermore, until very recently, the molecular world was totally invisible to us. Quoting Richard Feynman describing the nanoworld that had just about been discovered at the end of the 50s: "there is plenty of room at the bottom". One may add that there are also plenty of things to see at the bottom! Here, we explore this universe at the heart of everyone to discover how scientists try to depict it. In the molecular world, the visual representation of the structure of a molecule and its properties is key: "tell me about your assembly, and I tell you who you are". Yet, this is only possible since a relatively short span of time: molecular modelling of biological macromolecules originated in the early 60s, when Sir John Kendrew created physical wire models or models in plastic rubber. Several years later, Cyrus Levinthal and his colleagues at MIT used an oscilloscope to visualize molecular models, also using a "wire frame" representation – described by simple lines. Since this era, technical progress

◇ Researcher at CNRS studying the chemistry-biology-computer science interface

Marc Baaden is a computational chemist at CNRS in Paris, focusing on interactive approaches to molecular modelling of complex biological systems. Molecular visualization is an essential part of this work combining high-performance computing and virtual reality, with particularly exciting perspectives offered by the latest graphics processors.

p.75

du MIT utilisèrent un oscilloscope pour visualiser des modèles moléculaires également « en fil de fer » - décrits par de simples lignes. Depuis cette époque, les progrès techniques ont considérablement amélioré la visualisation moléculaire et les illustrations de molécules dans les articles scientifiques abondent. Les modèles dessinés « à la main » ont évolué pas à pas vers les images de synthèses actuelles.

Ces dernières années semblent marquer un tournant dans les possibilités de visualisation scientifique notamment sur le plan du réalisme et de la performance. Il est possible de visualiser de manière interactive des édifices moléculaires de taille croissante. Il faut souvent combiner différents types de représentations et de données pour mieux comprendre ces systèmes moléculaires. En ce qui concerne la performance, les moyens informatiques à notre disposition n'ont cessé d'évoluer, ce qui a grandement aidé les chercheurs à mieux appréhender leurs sujets d'étude. Un autre point important est d'essayer de ramener cet *invisible* à des notions compréhensibles. Pour cela, l'analogie avec des objets macroscopiques est très utile. C'est pourquoi il est important d'utiliser différentes techniques d'éclairage pour bien « mettre en lumière » les molécules et leurs formes complexes. Les avancées techniques ont permis de repenser le monde moléculaire.

Du fait des avancées technologiques et scientifiques, les données ne sont plus seulement statiques, mais dynamiques : grâce aux simulations numériques de la modélisation moléculaire, il est possible de générer de véritables films illustrant l'évolution des systèmes moléculaires. Ces simulations vont générer des quantités importantes de données qu'il sera nécessaire de traiter et de simplifier afin de les analyser. Cette analyse des données est vitale pour faire la différence entre les mouvements oscillatoires aléatoires et les mécanismes moléculaires importants. La simplification des données peut passer par le biais de l'abstraction pour ne représenter que certains éléments utiles aux recherches. Il est également possible d'utiliser des outils ordinairement dédiés à d'autres domaines comme l'industrie des jeux vidéo ou du cinéma afin de renforcer le caractère réaliste d'une animation. Les masses de données issues des simulations numériques requièrent des approches artistiques et pédagogiques afin de les rendre compréhensibles. Parfois, entre science et art, il n'y a qu'un petit pas. Les illustrations de systèmes moléculaires font souvent la une des journaux spécialisés où le caractère artistique est alors pris en compte. Les systèmes moléculaires ont souvent des



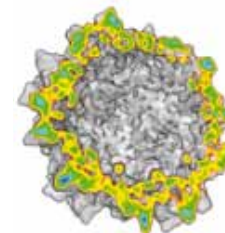
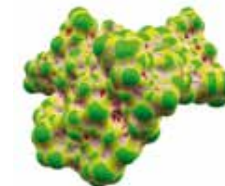
considerably improved molecular visualisation. Illustrations of molecules in scientific articles became commonplace. A transition from hand-drawn models to the current computer generated images occurred.

Recent years have shown a turn in the possibilities offered for scientific visualization, in particular concerning the realism of the representations and performance. It is possible to interactively visualise molecular assemblies of increasing size. Often, this requires combining different types of representations and of data to better understand such molecular systems. Concerning performance, the computing power at our disposal has continually grown and has greatly helped researchers to better approach the objects of their studies. Another important point is to try and render the *invisible* with easily comprehensible metaphors. In this context, analogies with macroscopic objects are very useful. This is why it is important to employ different lighting techniques to properly “highlight” molecules and their complex shapes. Technical progress enabled us to re-think the molecular world.

Given the technological and scientific progress, data is no longer purely static, but dynamic: thanks to computer simulations and molecular modelling it is possible to generate actual movies depicting the evolution of molecular systems. Such simulations generate huge amounts of data that have to be treated and simplified in order to analyse them. The analysis of this data is vital to separate random oscillatory motions from important molecular mechanisms. The simplification of such data may be achieved by abstraction, only representing the elements that are of immediate concern for the study to be carried out. It is also possible to use tools that are traditionally dedicated to other fields such as the video game industry or the film industry, in order to enhance the realism of such animations. Huge amounts of data obtained by computer simulations require artistic and educational approaches in order to render them comprehensible.

Sometimes there is only a little step from science to art. Illustrations of molecular systems often decorate the covers of specialized journals where an artistic character is also considered. Molecules may comprise intriguing shapes that provide a source of inspiration for artists. Some researchers even generated illustrations for their research that ended up in museums or galleries.

The evolution of scientific illustration of molecular systems in chemistry and biology opens up perspectives that would benefit from the expertise of scientific illustrators.



formes pouvant être source d'inspiration pour les artistes. Certains chercheurs ont même réalisé des illustrations pour des articles scientifiques qui finirent par se retrouver dans les musées ou les galeries.

L'évolution de la visualisation scientifique des systèmes moléculaires en chimie et en biologie ouvre à de possibles perspectives qui bénéficieraient du concours d'illustrateurs scientifiques.



a.

Une série de représentations moléculaires allant de modèles physiques à des modèles virtuels de plus en plus sophistiqués

A series of molecular representations going from physical models to more and more refined virtual models



b.

BPTI
(bovine pancreatic trypsin inhibitor), Matthieu Chavent & Marc Baaden, 2011