

# De la visualisation à la sonification : application à la représentation sonore de la surface de protéines

From visualization to sonification : auditory representation of protein surfaces

Tifanie Bouchara, Valère Raigneau et Matthieu Montès

**English Abstract**—The ERC VIDOCK project aims to develop new forms of visualization and analysis of protein structures and properties. This presentation concerns an ongoing work for extending pre-existing protein visualization methods with a new approach of immersive sonification in order to represent protein surfaces through sound. The protein surface is first discretized so each point of the surface is attached to a sound source spatialized in such a way the user is immersed in the center of the protein. We add a spherical filtering system, that the user can control to select the surface points that would be rendered, in order to reinforce the auditory interpretation of the 3D shape. This presentation is an opening from visualization to other modalities and will discuss several questions on how to transfer well established visualization methods to other modalities, especially the auditory one.



## 1 INTRODUCTION

Les travaux en cours présentés ici s’inscrivent dans le cadre du projet ERC VIDOCK dont les objectifs sont d’apporter de nouvelles méthodes de représentations de protéines et de créer un nouvel outil logiciel pour la visualisation et le docking moléculaire.

Les protéines sont des complexes moléculaires constitués de séquences d’acides aminés qui peuvent prendre différents agencements et donc des formes variées. L’étude de ces formes et de la surface des protéines permet ainsi d’en déterminer les fonctions et les comportements dans leur environnement naturel. Plusieurs procédés de visualisation [9] ont été proposés par le passé pour observer ces protéines et en comprendre la structure, mais la quantité d’informations à afficher reste extrêmement élevée. Pour soulager le canal visuel et rendre accessibles plus de données moléculaires simultanément, nous proposons de passer par un autre canal sensoriel : l’ouïe.

La sonification, ou représentation d’informations par du son non parlé [8], a déjà été exploitée par le passé pour représenter des données moléculaires [5]: notamment la structure primaire et secondaire de protéines (la séquence d’acides aminés et le repliement local) [1], [7], [10], ainsi que leur comportement lors de simulations interactives [11] ou de docking moléculaire [4].

Aucune de ces études ne proposaient de représenter la surface des protéines. Nous avons ainsi conçu et implémenté une nouvelle méthode, immersive et interactive, de sonification de la surface de protéines dans laquelle chaque point de la surface agit comme une source sonore spatialisée autour de l’utilisateur et dont les paramètres sonores indiquent l’éloignement par rapport à l’utilisateur. De plus, pour faciliter l’interprétation des données de surface perçues auditivement, un filtre sélectif, contrôlable par l’utilisateur, a été mis en place pour permettre à ce dernier d’explorer le rendu sonore en sélectionnant l’information qu’il souhaite afficher auditivement.

## 2 CONCEPTION D’UNE SONIFICATION IMMERSIVE DE LA SURFACE

Notre approche de sonification de la surface suit les étapes suivantes (Figure 1): la surface des objets est d’abord discrétisée de façon à être représentée par un ensemble de points, par exemple les sommets d’un maillage 3D de l’objet. Ce maillage est ensuite simplifié, par décimation de vertex, afin de diminuer le nombre de points à sonifier. Enfin, à chaque point de la surface est associée une source sonore, ici un son synthétique composé d’un ton pur et d’un son large bande de batôn de pluie. Les paramètres de la synthèse sonore sont obtenus par *mapping de paramètres* de sorte que la position du point par rapport au centre de l’objet soit reliée à plusieurs paramètres sonores. Ainsi plus le point sonifié est éloigné du centre de l’objet et plus la fréquence et l’effet de réverbération appliqués augmentent tandis que le volume sonore décroît. La sonification est immersive : chaque source sonore est

- Tifanie Bouchara : CEDRIC, EA4626, CNAM, HeSam Université  
E-mail : tifanie.bouchara@cnam.fr
- Valère Raigneau : CEDRIC, EA4626, CNAM, HeSam Université  
E-mail : valere.raigneau@gmail.com.
- Matthieu Montès : GBCM, EA7528, CNAM, HeSam Université  
E-mail : matthieu.montes@cnam.fr.

spatialisée comme si la tête de l'utilisateur, dont les rotations sont suivies, se trouvait au centre de l'objet. La sonification est ponctuelle et a lieu uniquement à la demande de l'utilisateur.

L'utilisateur peut également choisir la quantité de points qu'il souhaite sonifier grâce à un filtre sélectif, sphérique, centré sur l'objet 3D (Figure 2) : aucun des points compris à l'intérieur ou sur la sphère n'est lu, seuls les points qui lui sont strictement extérieurs sont sonifiés. Pour effectuer cette sélection, on laisse à l'utilisateur le contrôle de la taille de la sphère. Par exemple, il lui suffit de fixer le rayon du filtre à zéro pour sonifier entièrement la protéine.

Enfin, nous avons également proposé un mode de lecture où les sons se déclenchent successivement, d'abord ceux du centre puis ceux de plus en plus éloignés. La vitesse de parcours est réglable par l'utilisateur. Il est ainsi possible de lire simultanément tous les sons (vitesse nulle) mais il est préférable de parcourir l'objet 3D plus lentement avec l'augmentation du nombre de points sonifiés.

Similaire à des approches de sonification d'objet 3D par découpage en tranches longitudinales où l'on sonifie finalement des images 2D successives [3], notre proposition consiste en un découpage en tranches concentriques qui englobent l'utilisateur-auditeur. Cela permet de garder une représentation 3D à chaque instant et les informations venant de directions similaires sont plus facilement intégrées au cours du temps, ce qui renseigne sur la direction des excroissances de l'objet 3D. Finalement une interface de rendu audio-graphique d'objet 3D a été implémentée sous Max 7, Figure 2). L'interface présente une représentation graphique allocentrée de l'objet 3D que l'utilisateur peut ré-orienter par la souris, selon les 3 axes de rotation. Le rendu sonore égocentrique, spatialisé au casque, est modifié en conséquence. La représentation 3D d'une tête d'utilisateur est ajoutée pour faciliter le lien entre le point d'écoute et point de vue.

### 3 EVALUATIONS EN COURS ET À VENIR

Une expérimentation est en cours, pour évaluer notre approche de sonification immersive de la surface, sur des objets 3D simples avant de la tester sur des formes complexes de protéines. Cette expérimentation repose ainsi sur une tâche d'identification dans laquelle les participants doivent écouter et explorer la sonification d'un objet parmi une liste de 8 objets possibles et l'identifier dans cette liste. Nous avons repris l'ensemble de 8 objets courants (Théière, Cube, Parallélépipède rectangle, Cylindre, Cylindre plus long, Cône, Ellipsoïde, Icosaèdre, Sphere et Tore) utilisé dans l'évaluation d'une méthode de représentation sonore d'objets 3D par la sonification des rayons de courbures présentée dans [6].

Des expérimentations futures sont prévues pour évaluer le rôle de l'exploration active de l'utilisateur

via la sphère de filtrage. Nous comparerons ainsi l'interprétation de la sonification de protéines avec ou sans cet outil de filtrage.

## 4 CONCLUSION

Nous présentons ici un travail en cours sur la sonification immersive de la surface de protéines pour combiner un rendu sonore aux méthodes de visualisation moléculaire déjà disponibles. Bien que ce travail ait été récemment présenté à la communauté française d'interaction homme-machine [2], nous pensons qu'il est d'intérêt également pour la communauté en visualisation car il s'agit de transférer les techniques courantes de visualisation à la modalité sonore, à la fois pour représenter les données, mais aussi pour les explorer. De plus, alors que la communauté en visualisation s'intéresse particulièrement à la multimodalité pour la conception de nouvelles techniques d'interaction en entrée, nous sommes convaincus qu'une réflexion plus poussée est nécessaire sur la façon dont les représentations graphiques de données, et les méthodes de d'exploration de ces représentations, peuvent être combinées à d'autres modalités sensorielles en sortie. Cela élargit les questions habituellement traitées sur l'intégration multimodales de données représentées sous différentes formes graphiques en englobant d'autres modalités sensorielles.

## REFERENCES

- [1] H. Ballweg, A. K. Bronowska, and P. Vickers. Interactive sonification for structural biology and structure-based drug design. In *5ème Interactive Sonification Workshop (ISon2016)*, number 5, 2016.
- [2] T. Bouchara, V. Raigneau, and M. Montès. Sonification immersive de la surface de protéines. In *30ème Conférence francophone d'Interaction Homme-Machine, IHM'18*, pages 149–155, 2018.
- [3] T. V. Evreinova, G. Evreinov, and R. Raisamo. An exploration of volumetric data in auditory space. *Journal of the Audio Engineering Society*, 62(3):172–187, 2014.
- [4] N. Ferey et al. *Advances in human-protein interaction - interactive and immersive molecular simulations dans Protein-Protein Interactions - Computational and Experimental Tools, InTech*, 27–65. 2012.
- [5] M. A. Garcia-Ruiz and J. R. Gutierrez-Pulido. An overview of auditory display to assist comprehension of molecular information. *Interacting with Computers*, 18(4):853 – 868, 2006.
- [6] T. Gholamalizadeh, H. Pourghaemi, A. Mhaish, and D. J. Duff. Sonification of 3d object shape for sensory substitution : An empirical exploration. In *10ème conférence Advances in Computer-Human Interactions (ACHI2017)*, number c, pages 18–24, 2017.
- [7] F. Grond and F. D. Antonia. Sumo a sonification utility for molecules. In *14ème conférence en Auditory Display (ICAD 2008)*, pages 1–7, 2008.
- [8] T. Hermann, A. Andy Hunt, and J. Neuhoff. *The Sonification Handbook*. Logos Verlag Berlin, 2011.
- [9] S. O' Donoghue, D. S Goodsell, A. S Frangakis, F. Jossinet, R. Laskowski, M. Nilges, H. R Saibil, A. Schafferhans, R. C Wade, E. Westhof, and A. J Olson. Visualization of macromolecular structures. *Nature methods*, 7:S42–S55, 2010.
- [10] L. Picalini, C. Chrysostomou, and H. Seker. The sound of proteins. In *IEEE-EMBS International Conference on Biomedical and Health Informatics (BHI2012)*, pages 612–615, 2012.
- [11] B. Rau, F. Frieb, M. Krone, C. Muller, and T. Ertl. Enhancing visualization of molecular simulations using sonification. In *1er workshop international Virtual and Augmented Reality for Molecular Science (VARMS@IEEEVR)*, pages 25–30, 2015.

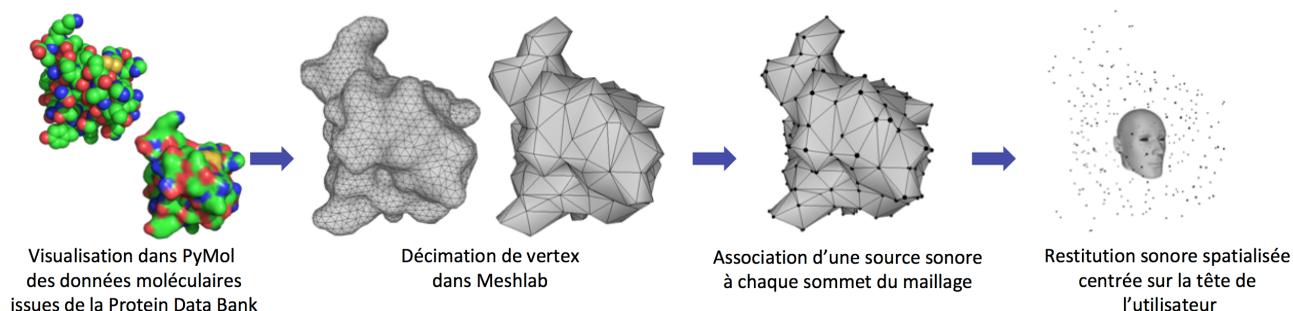


Fig. 1. Les différentes étapes de notre sonification immersive par nuage de points: 1) Calcul dans PyMol de la surface moléculaire à partir des données de la PDB; 2) Simplification du maillage 3D par décimation de vertex dans Meshlab; 3) Association d'une source sonore, synthétisée par mapping de paramètres, à chaque sommet du maillage; 4) Spatialisation des sources sonores centrée sur la tête de l'utilisateur.

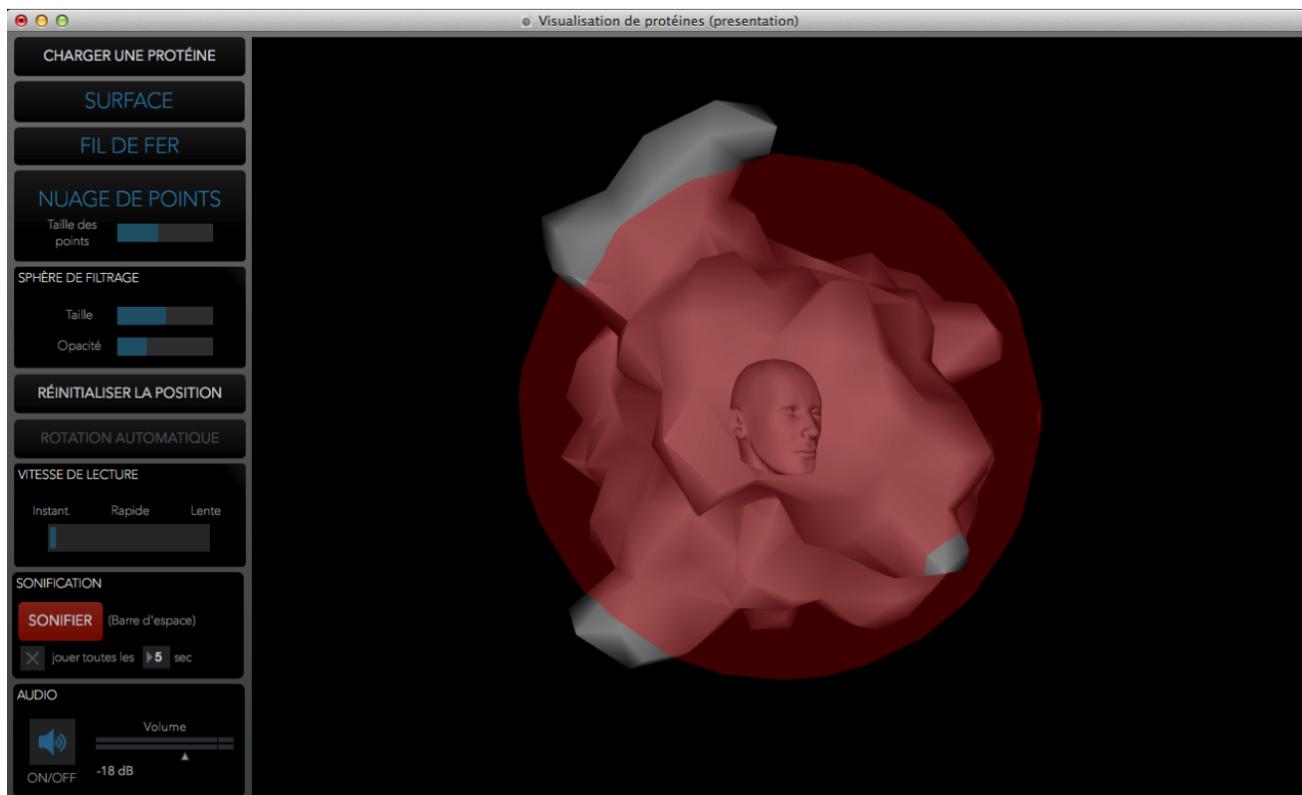


Fig. 2. Interface de contrôle développée sous Max 7. La sphère rouge est appelée sphère de filtrage : seule la partie de l'objet située à l'extérieur de cette sphère est sonifiée.