
Sonification immersive de la surface de protéines

Tifanie Bouchara
Valère Raigneau
CEDRIC, EA4626
CNAM, HeSam Université
75003, Paris, France
tifanie.bouchara@cnam.fr
valere.raigneau@gmail.com

Matthieu Montès
GBA, EA4627
CNAM, HeSam Université
75003, Paris, France
matthieu.montes@cnam.fr

Résumé

Afin d'étendre les modes de visualisation de protéines déjà disponibles, nous présentons ici une nouvelle approche de sonification permettant de représenter la surface d'une protéine par du son. A chaque point de la surface discrétisée est associée une source sonore, dont les paramètres sonores sont liés à la protéine, spatialisée de sorte que l'utilisateur soit immergé au centre de la protéine. Un système de filtrage interactif, sous la forme d'une sphère de rayon réglable par l'utilisateur, permet de sélectionner les points de la surface qui seront lus afin d'améliorer l'interprétation auditive de la forme 3D. Plusieurs questions, pouvant bénéficier à la communauté IHM, sur la mise en place de filtres sonore et audiovisuel d'informations et sur l'optimisation des combinaisons multimodales issues de points de vue et écoute différents sont exposées.

Mots Clés

Sonification interactive; Audio 3D; Objets 3D; Surface de protéines

Abstract

To extend pre-existing protein visualisation methods, we present a new approach of immersive sonification 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 im-

mersed 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. Several questions, which can benefit the HCI community, are discussed both on audio and audiographical filtering consistency, and on multimodal integration of data coming from different point of view and point of listening.

Author Keywords

Interactive sonification ; 3D audio ; 3D objects ; Proteins surface

ACM Classification Keywords

H.5.2 [Information Interfaces and Presentation (e.g., HCI)]: Auditory feedback

Introduction

Les protéines sont des complexes moléculaires constitués de séquences d'acides aminés qui peuvent prendre différents agencements. Ces protéines adoptent ainsi des formes variées, descriptibles par leur surface, qu'il est nécessaire de mieux comprendre afin de déterminer les fonctions et les comportements de ces protéines dans leur environnement naturel. Plusieurs procédés de visualisation [14] 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 paramètres moléculaires simultanément, on propose de passer par un autre canal sensoriel : l'ouïe. La représentation sonore de la surface de protéines que nous proposons repose sur une nouvelle approche de sonification d'objets 3D où chaque point de la surface agit comme une source sonore spatialisée autour de l'utilisateur et dont les para-

mètres sonores indiquent l'éloignement par rapport à l'utilisateur.

Définition et avantages de la sonification

La sonification, ou représentation d'informations par du son non parlé [10], est utilisée dans diverses applications tels que le guidage pour les non-voyants, l'apprentissage du mouvement, ou encore l'analyse de données scientifiques. Les capacités auditives (fines résolutions temporelle et fréquentielle, perception de motifs, localisation et écoute spatialisée à 360°, écoute simultanées de plusieurs flux sonores) rendent en effet la sonification particulièrement adaptée pour représenter des données dépendantes du temps, spatiales autour de l'utilisateur, ou pour représenter simultanément plusieurs paramètres. La sonification est ainsi utilisée en complément ou en substitution de la modalité visuelle, lorsque trop d'informations doivent être affichées simultanément sur des espaces écran restreints ou encore que la modalité visuelle est déjà engagée dans d'autres tâches, voire inaccessible (utilisateurs aveugles, occlusion). Utilisée en combinaison de la visualisation, la sonification permet de jouer aussi sur la redondance et la complémentarité des données représentées et ainsi de bénéficier des avantages de la perception multisensorielle.

Précédents travaux en sonification de protéines et d'objets 3D

Plusieurs études passées ont proposé de représenter auditivement des protéines. Ces travaux sonifient la séquence d'acides aminés des protéines [3, 15], leur structure secondaire (lié au repliement local de morceaux de séquences qui se lient entre eux) [2, 8], leur comportement lors de simulations interactives [16], ou encore leur complémentarité avec d'autres protéines (sonification du docking) [6]. Cependant, à notre connaissance, aucune de ces études ne s'était intéressée à la représentation sonore de la surface de ces protéines. Or cela rejoint une autre problématique

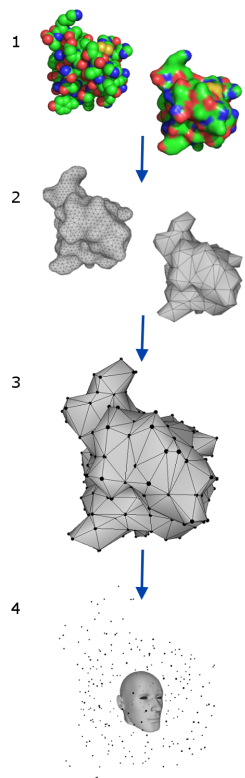


Figure 1: Les différentes étapes de notre sonification immersive par nuage de points : 1) Calcul dans PyMol de la surface moléculaire à partir des données de la PDB ; 2) Simplification du maillage 3D par décimation de vertex dans Meshlab ; 3) Association d'une source sonore, synthétisée par mapping de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

abordée en sonification : comment représenter un objet 3D par du son ? Les précédentes propositions de sonification d'objet 3D reposent sur deux principes : d'une part la sonification indirecte des paramètres de courbures liés au contour de l'objet [1, 7], d'autre part la sonification d'une image 2D, obtenue par projection ou par découpage en tranches successives de l'objet 3D. La sonification d'une image 2D reprend alors des concepts similaires à ceux développés pour les premiers systèmes de substitution sensorielle auditifs à destination des non-voyants [11] : l'image est découpée en pixels dont on encode la position verticale par la fréquence (plus le motif visuel est haut, plus le son est aigu), la position horizontale de manière temporelle (le balayage d'une image est réalisé en une seconde), et le niveau de gris par l'intensité du son. Enfin, une étude très récente sur la sonification par nuage de points [4], similaire à ce que nous présentons ici, propose comme nous d'associer une source sonore à chaque point de la surface puis de spatialiser ces sources. Leur approche varie cependant de la notre par le point d'écoute : ils placent auditivement la protéine en face de l'utilisateur ce qui restreint le champ sonore à un espace frontal. Nous proposons au contraire d'exploiter au maximum l'espace sonore tout autour de l'utilisateur, de façon à mieux séparer les sources sonores les unes des autres.

Mise en place d'une sonification immersive d'objets 3D

L'association de sons à la surface 3D suit les étapes suivantes (Figure 1) : la surface des objets est d'abord discrétisée de façon à être représentée par un ensemble de points. Ces points peuvent être obtenus automatiquement en passant par les sommets d'un maillage 3D de l'objet. Ce maillage est ensuite simplifié, par décimation de vertex, afin de diminuer le nombre points à sonifier. Enfin, à chaque point de la surface est associée une source sonore, ici un

son synthétique dont les paramètres varient en fonction de la position du point. Chaque source sonore est ensuite spatialisée comme si la tête de l'utilisateur se trouvait au centre de l'objet, d'où les termes de sonification immersive et de point d'écoute égocentré.

Synthèse sonore et mapping

Les paramètres sonores 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 référencés dans le Tableau 1. Chaque source sonore est ainsi constituée de deux sons simultanés : 1) un son de bâton de pluie (durée 3 s), choisi pour son aspect esthétique et pour son contenu spectral large bande qui améliore la perception spatiale et la localisation des sources, et 2) un son pur sinusoïdal (600 ms), dont la fréquence augmente entre 130 Hz et 1046 Hz proportionnellement à la distance (normée par rapport au point le plus éloigné du plus grand objet sonifié). La polarité inverse (moins d'aigu quand on s'éloigne) semblerait plus cohérente avec la propagation naturelle des sons mais notre choix de polarité s'appuie sur des études en correspondance audio-graphique : les sons aigus sont plus souvent associés aux objets petits [12], donc visuellement plus éloignés. Cela facilite ainsi la perception des excroissances : les parties de l'objet 3D les plus éloignées étant de plus en plus minces, on les représente par un son plus aigu. Les sources sonores subissent ensuite deux autres effets accentuant encore la perception de distance. Le premier est un effet de *delay* qui augmente avec la distance (pré-délai 500 ms, rapport son réverbéré/son direct = 100 %, feedback ou nombre de répétitions variant de 0 % au centre, à 50 % pour le point le plus éloigné). Le second effet appliqué est une atténuation linéaire du niveau sonore en fonction de la distance (-15 dB au maximum). La sonification est ponctuelle et a lieu uniquement à la demande de l'utilisateur.

Point de la Surface	Son associé
Orientation :	Orientation :
Azimut $[-90^\circ, 90^\circ]$	Azimut $[-90^\circ, 90^\circ]$
Élévation $[-180^\circ, 180^\circ]$	Élévation $[-180^\circ, 180^\circ]$
Distance	Fréquence $[100 \text{ Hz}, 1046 \text{ Hz}]$ Delay, <i>feedback</i> $[0 \%, 50 \%]$ Niveau sonore $[0 \text{ dB}, -15 \text{ dB}]$
Distance	Instant d'émission $[0, 5 \text{ s}]$ Muet si $Distance < rayon_{filtrage}$

Tableau 1: Résumé du mapping de paramètres

Sphère de filtrage

On permet à l'utilisateur de choisir la quantité de points qu'il souhaite sonifier. Pour cela, nous mettons à sa disposition une sphère de filtrage basée sur le modèle de [16]. Centrée sur l'objet 3D, cette sphère agit à la manière d'un filtre : 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 son rayon à zéro pour sonifier entièrement la protéine.

Vitesse de parcours

Inspirés par la lecture automatisée "tranche par tranche" des travaux de [5], nous avons 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.

Contrairement à l'approche de découpage en tranches longitudinales où l'on sonifie finalement des images 2D successives [5], notre proposition permet de garder une représentation 3D à chaque instant, par des tranches concentriques qui englobent l'utilisateur-auditeur. Les informations venant de directions similaires sont alors plus facilement intégrées au cours du temps, ce qui renseigne sur la direction des excroissances de l'objet 3D.

Synthèse sur le rendu sonore obtenu

Le rendu sonore obtenu peut être résumé ainsi :

- les sources sonores associées à chaque point de la surface sont spatialisées tout autour de l'utilisateur, avec les mêmes azimut et élévation que leur position par rapport à l'utilisateur si celui-ci était situé au centre de l'objet.
- les sons déclenchés plus tardivement, de durée plus longue et plus aigus correspondent à des points plus éloignés.
- une excroissance de l'objet sera indiquée par plusieurs sons successifs déclenchés de plus en plus tardivement et provenant de la même direction.
- les sources sont lues du centre vers l'extérieur, le rendu sonore est donc plus grave au début puis de plus en plus aigu.
- un maillage de résolution polygonale supérieure conduit à un niveau sonore plus élevé car le nuage de point sonifié est plus dense.

Implémentation

Les informations sur les protéines (séquence et positions des acides aminés) sont issues de la Protein Data Bank (PDB). Le calcul de la surface est ensuite réalisé par un algorithme dédié, intégré dans le logiciel de visualisation PyMol, puis sauvegardé au format .obj. La résolution polygonale du maillage 3D est ensuite réduite par décimation de vertex dans le logiciel MeshLab. L'outil de sonification,

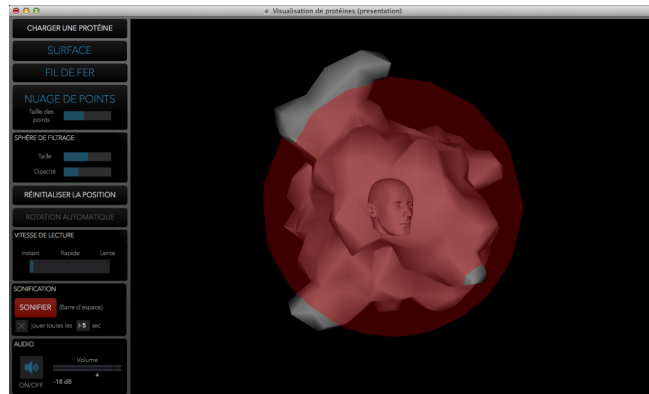


Figure 2: Interface de contrôle développée sous Max 7. La sphère rouge est appelée sphère de filtrage : seule la partie de l'objet située à l'extérieur de cette sphère est sonifiée.

que nous avons développé sous Max 7, se présente sous la forme d'une interface de contrôle présentée Figure 2). L'interface présente une représentation graphique de l'objet 3D dont l'utilisateur peut modifier l'orientation par la souris, selon les 3 axes de rotation. Le rendu sonore spatialisé est modifié en conséquence. La représentation 3D d'une tête d'utilisateur est ajoutée pour faciliter le lien entre les points d'écoute et les points de vue. Les autres paramètres contrôlables par l'utilisateur, à gauche de l'interface, sont le rayon de la sphère de filtrage (permettant de ne sonifier que les points situés à l'extérieur de cette sphère) et la vitesse de parcours de la protéine du centre vers l'extérieur (durée totale de lecture).

La spatialisation du rendu sonore suit un procédé d'ambisonique virtuel [13], avec un encodage ambisonique d'ordre 3 et un décodage en binaural pour une restitution sur casque. Le rendu ambisonique est effectué avec la librairie HOA du CICM [17].

Evaluation

Présentement, nous n'avons pas encore pu évaluer formellement la capacité de notre méthode de sonification interactive à transmettre la forme 3D d'un objet ou d'une protéine. Des expérimentations contrôlées, avec des participants extérieurs, sont prévues prochainement pour évaluer le retour sonore. Afin de comparer notre approche de sonification avec les méthodes déjà établies, nous nous appuyons sur les protocoles utilisés dans les études passées.

Ainsi, la première expérimentation prévue s'appuie sur la tâche d'identification d'objets 3D décrite dans [7]. Les participants devront écouter la sonification d'un objet parmi une liste de 8 objets possibles et l'identifier dans cette liste. Nous reprendrons le même ensemble de 8 objets courants que dans l'étude d'origine (Théière, Cube, Parallépipède rectangle, Cylindre, Cylindre plus long, Cône, Ellipsoïde, Icosaèdre, Sphere et Tore). Il est à noter que l'icosaèdre (12 sommets, 20 faces) et la sphère représentent finalement le même objet sphérique mais à des résolutions polygonales différentes. Nous proposons d'étudier l'influence de la taille relative de l'objet (équivalent à la distance dans notre cas) et de l'orientation de l'objet sur la perception de la forme d'objets 3D par du son. Cinq orientations et cinq échelles de représentations seront ainsi testées. Enfin, les objets 3D pouvant être décrits avec des maillages de résolution différentes, nous proposons également de tester cinq résolutions pour chacune des formes.

Une seconde expérimentation est basée sur la tâche de discrimination décrite dans [15]. L'idée est de vérifier que les utilisateurs seront capables de s'appuyer sur le rendu sonore pour distinguer des protéines issues de classes de protéines différentes. Comme des protéines de classes ou sous-classes proches ont des formes 3D similaires, nous formulons l'hypothèse que la représentation sonore d'une protéine sera d'autant plus difficile à distinguer d'une autre que les classes sont proches. De plus, puisque chaque

protéine peut adopter des conformations différentes, nous testerons également la ressemblance de sonifications issues de plusieurs conformations d'une même protéine. De manière générale, nous formulons l'hypothèse que le rendu sonore de protéines très différentes en surface suffira à discriminer auditivement ces protéines.

Perspectives

Après avoir validé expérimentalement ce premier prototype, nous souhaitons améliorer encore la sonification. D'une part pour renforcer la perception de la forme de l'objet 3D, nous souhaitons vérifier si l'ajout d'informations supplémentaires plus locales, par exemple la convexité, permettent d'affiner le schéma mental que se fait l'utilisateur de l'objet. D'autre part, en vue d'intégrer notre sonification dans un outil de docking moléculaire, nous souhaitons compléter les informations de surface disponibles auditivement et donc sonifier aussi la charge électrostatique à la surface de la protéine.

Ensuite, nous proposons de revisiter la notion de filtrage sonore. Actuellement, on sonifie uniquement les points de la surface situés à l'extérieur de la sphère qui filtre alors les points à l'intérieur. Cependant, il est nécessaire de vérifier si l'inverse, que l'on pourrait appelé sphère de sélection (sélection des points intérieurs, filtrage des points extérieurs) ne serait pas plus appropriée pour l'interprétation des objets 3D. Nous souhaitons aussi permettre à l'utilisateur de déplacer cette sphère de sélection pour en faire une torche sonore comme dans [9] ou [16]. La sonification d'une partie seulement de la protéine devrait aider l'utilisateur à se focaliser sur des informations plus locales.

Enfin, l'étude de Commère et al. [4], présentée il y a quelques mois seulement, confirme la pertinence de notre approche de sonification d'objets 3D par nuage de points. Leur proposition diffère de la notre principalement par le point d'écoute

choisi. Nous souhaitons donc comparer, par une autre expérimentation, notre mode de rendu audio-graphique avec le leur. Cette question introduit une problématique ouverte pour la communauté IHM sur l'optimisation de la combinaison audio-graphique lorsque les deux modalités représentent des données différentes. Nous pouvons en effet utiliser simultanément l'audio pour représenter la surface de la protéine et le visuel pour en représenter la structure interne. Les deux points de vue et d'écoute doivent-ils alors être coincidents ou simplement cohérents ? De la même manière, on peut se demander si l'interprétation des données serait plus facile si les informations sonores de la surface étaient combinées à certains modes particuliers de visualisation de protéines, par exemple représentation atomique ou en ruban [14].

Conclusion

Ce papier présente le premier prototype d'un travail en cours dont le but est de représenter des objets 3D par une sonification immersive où chaque point de la surface agit comme une source sonore spatialisée en 3D. Des évaluations plus approfondies sont prévues afin de déterminer dans quelles mesures cette sonification renseigne l'utilisateur sur la forme représentée. Ce projet soulève également des questions sur les outils d'exploration sonores 3D et sur l'optimisation des combinaisons multimodales issues de points de vue et d'écoute différents. Enfin, cette nouvelle approche de sonification s'inscrit dans un projet plus large sur la représentation de protéines mais pourrait être utilisée à d'autres fins, notamment comme dispositif de substitution sensorielle pour des utilisateurs aveugles.

Remerciements

Ces travaux sont financés par l'ERC ViDOCK n°640283 de l'European Research Council Executive Agency.

Bibliographie

- [1] Miguel A. Alonso-Arevalo, Simon Shelley, Dik Hermes, Jacqueline Hollowood, Michael Pettitt, Sarah Sharples, and Armin Kohlrausch. 2012. Curve shape and curvature perception through interactive sonification. *ACM Transactions on Applied Perception* 9, 4 (2012), 1–19.
- [2] Holger Ballweg, Agnieszka K Bronowska, and Paul Vickers. 2016. Interactive sonification for structural biology and structure-based drug design. In *Actes du 5ème Interactive Sonification Workshop (ISon2016)*.
- [3] Robert P. Bywater and Jonathan N. Middleton. 2016. Melody discrimination and protein fold classification. (2016).
- [4] Louis Commère, Grond Florian, François Côté, and Jean Rouat. 2018. Sonification of 3D point clouds for substitution of vision by audition for blind users. In *24ème conférence internationale Auditory Display (ICAD 2018)*. Michigan Technological University, USA.
- [5] Tatiana V. Evreinova, Grigori Evreinov, and Roope Raisamo. 2014. An exploration of volumetric data in auditory space. *Journal of the Audio Engineering Society* 62, 3 (2014), 172–187.
- [6] Nicolas Ferey et al. 2012. *Advances in human-protein interaction - interactive and immersive molecular simulations dans Protein-Protein Interactions - Computational and Experimental Tools, InTech, 27–65*.
- [7] Torkan Gholamalizadeh, Hossein Pourghaemi, Ahmad Mhaish, and Damien Jade Duff. 2017. Sonification of 3D Object Shape for Sensory Substitution : An Empirical Exploration. In *10ème conférence Advances in Computer-Human Interactions (ACHI2017)*. 18–24.
- [8] Florian Grond and Fabio Dall Antonia. 2008. Sumo a sonification utility for molecules, In Actes de la 14ème conférence en Auditory Display (ICAD 2008). *Interacting with Computers* (2008), 1–7.
- [9] Sebastian Heise, Michael Hlatky, and Jorn Loviscach. 2008. SoundTorch : quick browsing in large audio collections. In *125ème Convention de l’AES*.
- [10] T. Hermann, A. Andy Hunt, and J. Neuhoff. 2011. *The Sonification Handbook*. Logos Verlag Berlin.
- [11] Peter Meijer. 1992. An experimental system for auditory image representations. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering* 39, 2 (1992), 112 – 121.
- [12] Catherine J. Mondloch and Daphne Maurer. 2004. Do small white balls squeak ? Pitch-object correspondences in young children. *Cognitive, Affective, & Behavioral Neuroscience* 4, 2 (2004), 133–136.
- [13] M. Noisternig, T. Musil, A. Sontacchi, and R. Holdrich. 2003. 3D binaural sound reproduction using a virtual ambisonic approach. In *IEEE Symposium International en Virtual Environments, Human-Computer Interfaces and Measurement Systems (VECIMS '03)*. 174–178.
- [14] Sean O’ Donoghue, David S Goodsell, Achilleas S Frangakis, Fabrice Jossinet, Roman Laskowski, Michael Nilges, Helen R Saibil, Andrea Schafferhans, Rebecca C Wade, Eric Westhof, and Arthur J Olson. 2010. Visualization of Macromolecular Structures. *Nature methods* 7 (2010), S42–S55.
- [15] Lorenzo Picinali, Charalambos Chrysostomou, and Huseyin Seker. 2012. The Sound of Proteins. In *IEEE-EMBS International Conference on Biomedical and Health Informatics (BHI2012)*. 612–615.
- [16] Benjamin Rau, Florian Frieb, Michael Krone, Christoph Muller, and Thomas Ertl. 2015. Enhancing visualization of molecular simulations using sonification. In *1er workshop internationale Virtual and Augmented Reality for Molecular Science (VARMS@IEEEVR)*. 25–30.
- [17] Anne Sèdes, Pierre Guillot, and Elliott Paris. 2014. The HOA library, review and prospects. In *Conférence Internationale Computer Music (ICM-SMC 2014)*. Athen, Greece, 855–860.