

Une plateforme de dynamique moléculaire interactive

<http://www.baaden.ibpc.fr/projects/fvnano>

M. PIUZZI – A. TEK – M. BAADEN
IBPC 13, Rue Pierre et Marie Curie
75005 Paris

M. CHAVENT
CEA/DIF Bruyères-le-Châtel
91297 Arpajon

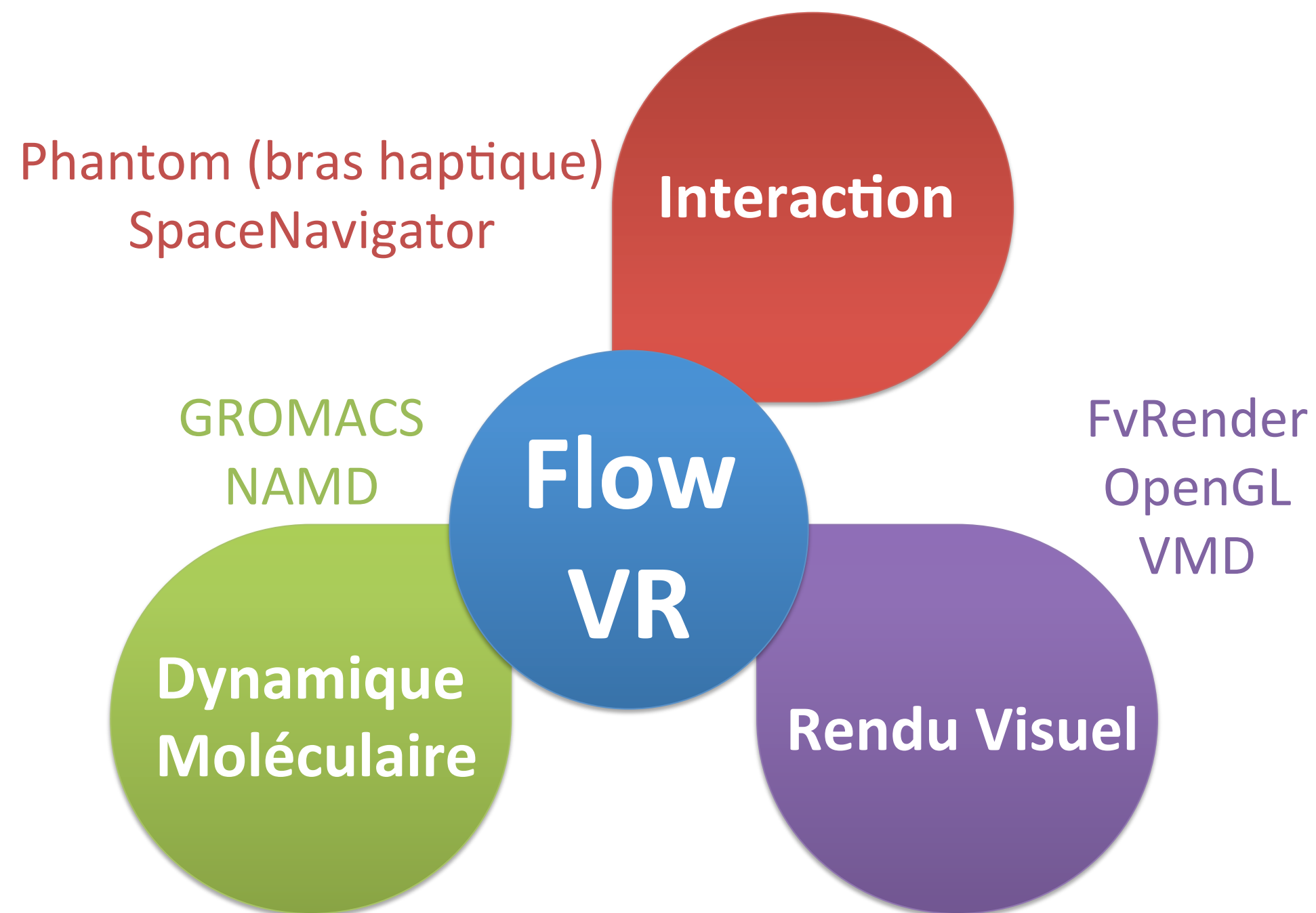
A. VANEL – B. RAFFIN
MOAIS, 51, av. Jean Kuntzmann
38330 Montbonnot Saint Martin

A. TURKI – S. LIMET – S. ROBERT
LIFO 6, rue Léonard de Vinci
45067 Orléans

N. FÉREY
LIMSI Université Paris-Sud
91403 Orsay

PRÉSENTATION

Une architecture modulaire pour le calcul haute performance

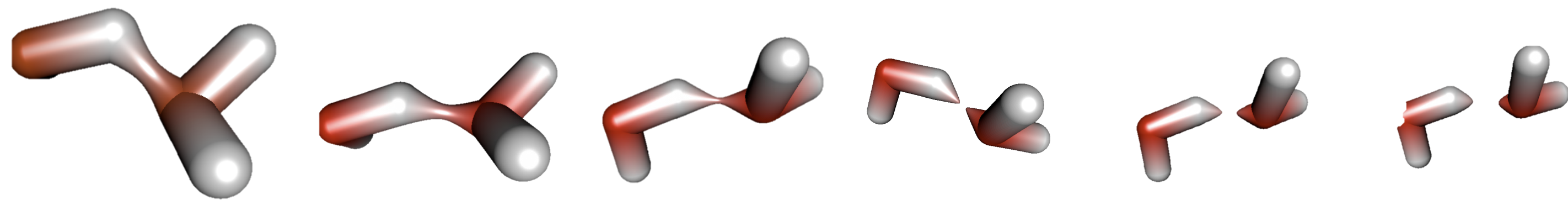


La plateforme **FvNano** est basée sur **FlowVR**, un intergiciel conçu pour aider au développement de logiciels interactifs sur des plateformes haute performance. FlowVR se présente comme une suite de bibliothèques qui permettent, entre autres, de gérer l’affichage, les périphériques d’interaction et les échanges de données. La figure à gauche schématise les origines des différents flux de données utilisés dans le cadre du projet FvNano.

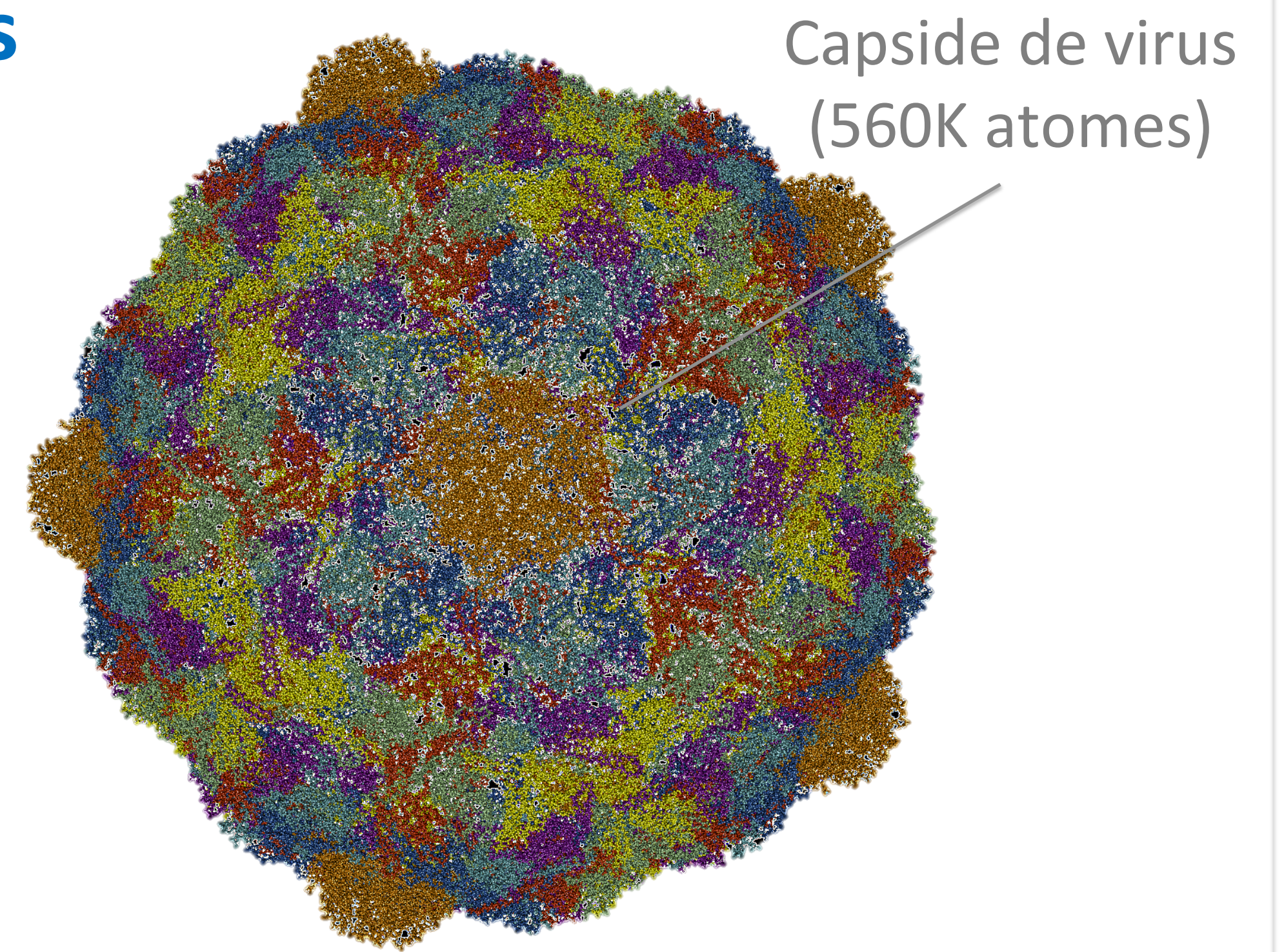
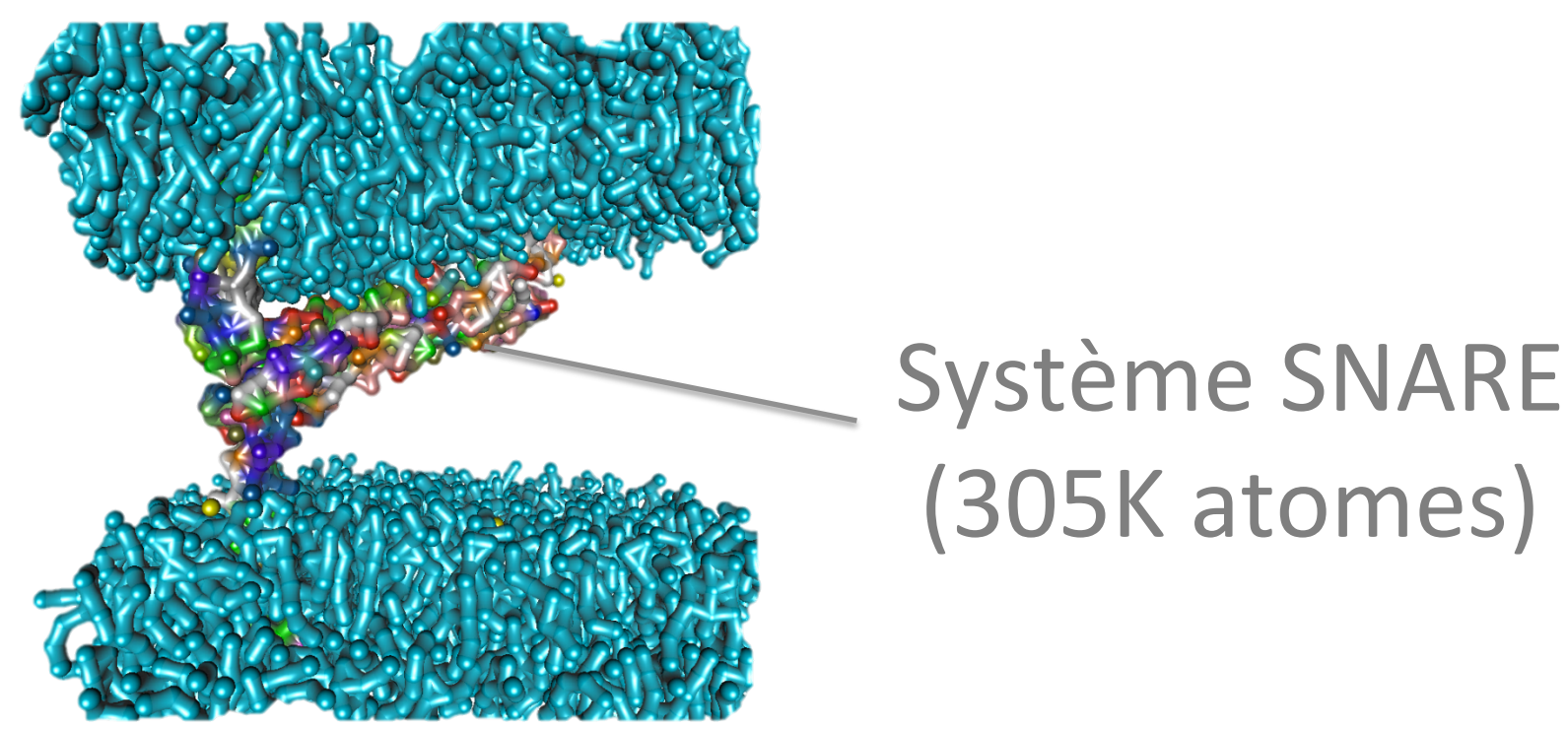
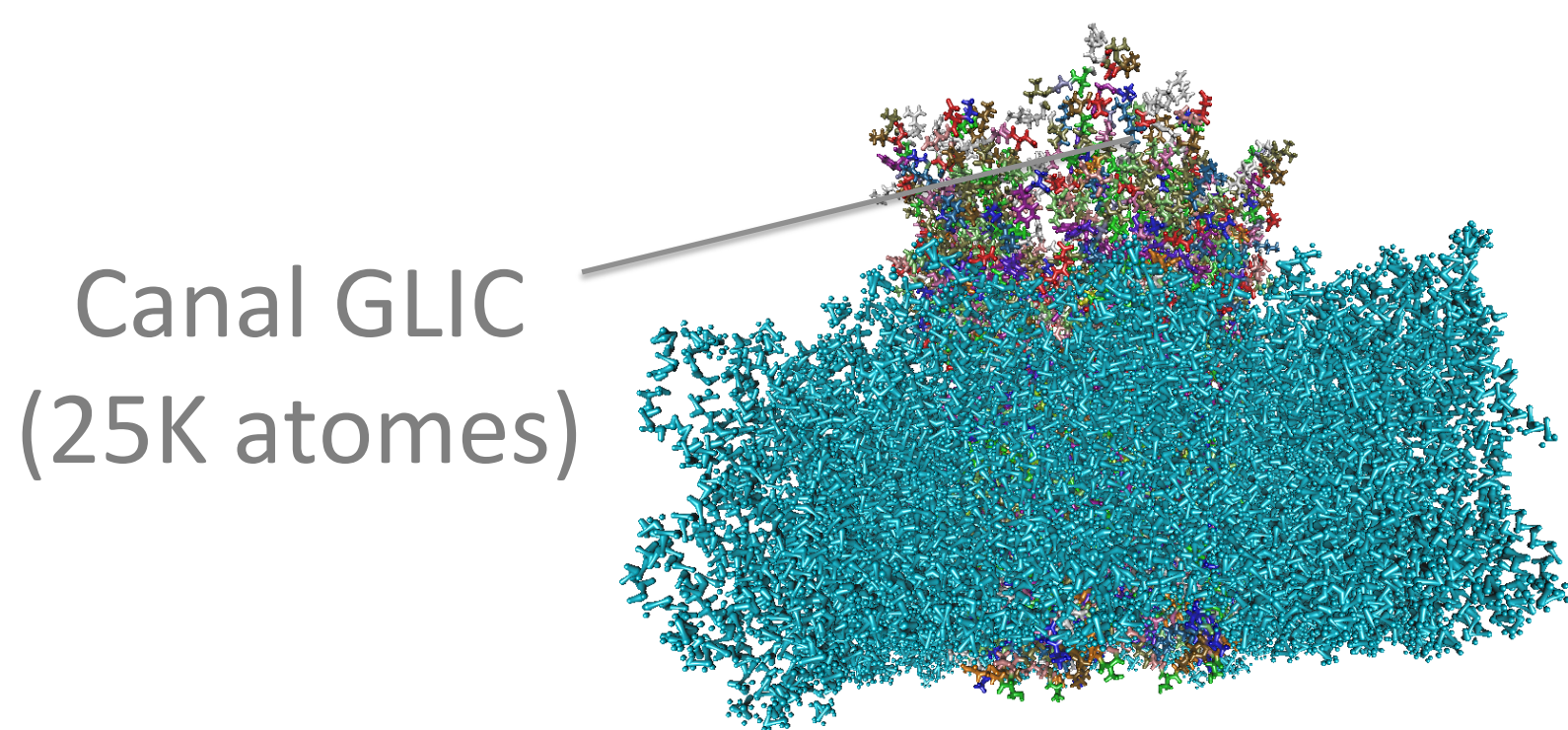
L’intérêt de ce type d’architecture est **la possibilité d’ajouter simplement de nouvelles fonctionnalités par l’intégration de nouveaux modules**. Ceci permet d’éviter de modifier le code déjà en place et facilite donc le développement pour les utilisateurs.

Le deuxième avantage de l’utilisation de FlowVR est la possibilité de **lancer le programme sur des grappes de calcul sans avoir à modifier l’application**, FlowVR permettant de gérer facilement la construction et le déploiement de l’application dans ce type d’environnement.

Pour la visualisation et la manipulation de systèmes complexes



L’utilisation de la représentation par «HyperBalls» (cf. Poster de M. Chavent) permet de visualiser facilement des liaisons non covalentes, comme ici avec deux molécules d’eau.



APPLICATIONS ET PERFORMANCE

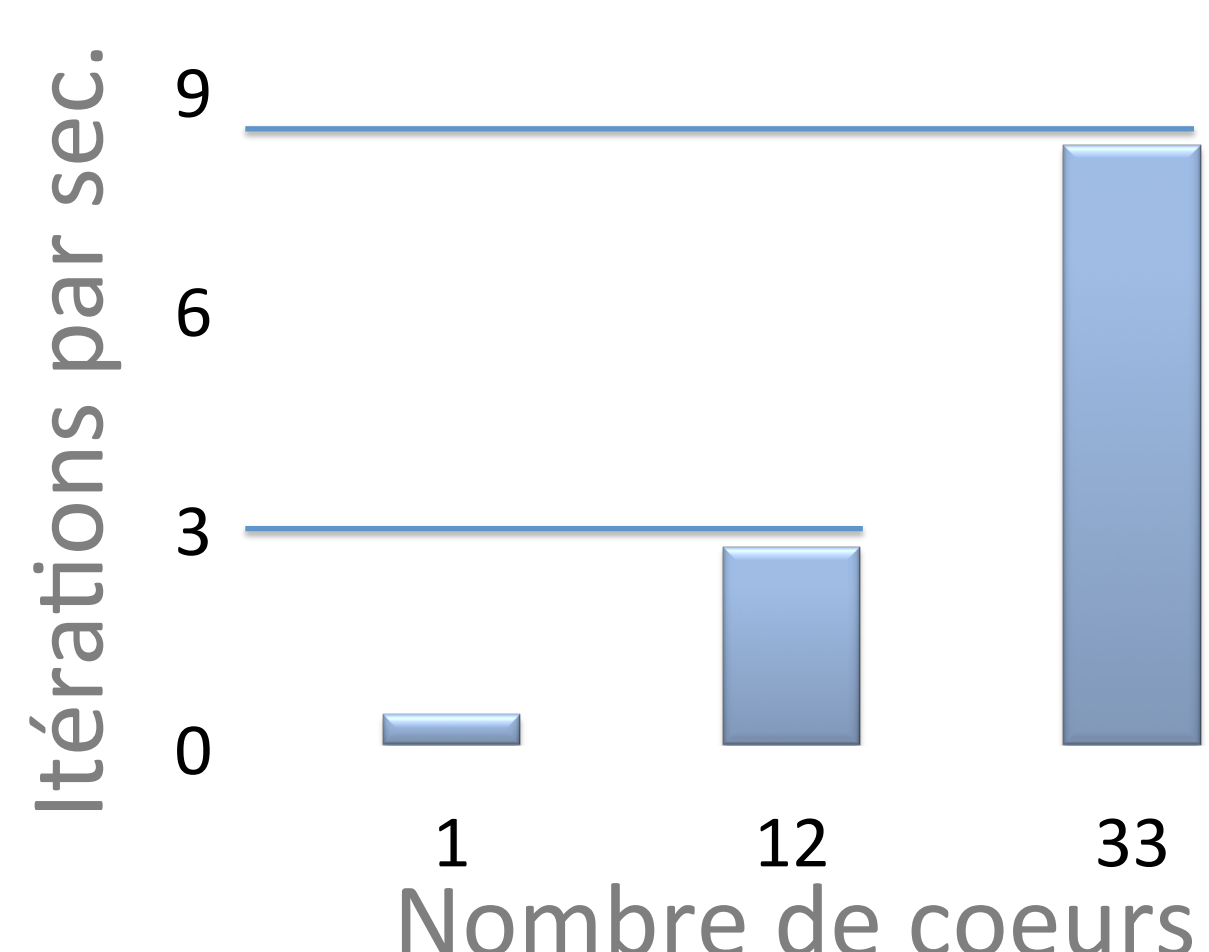
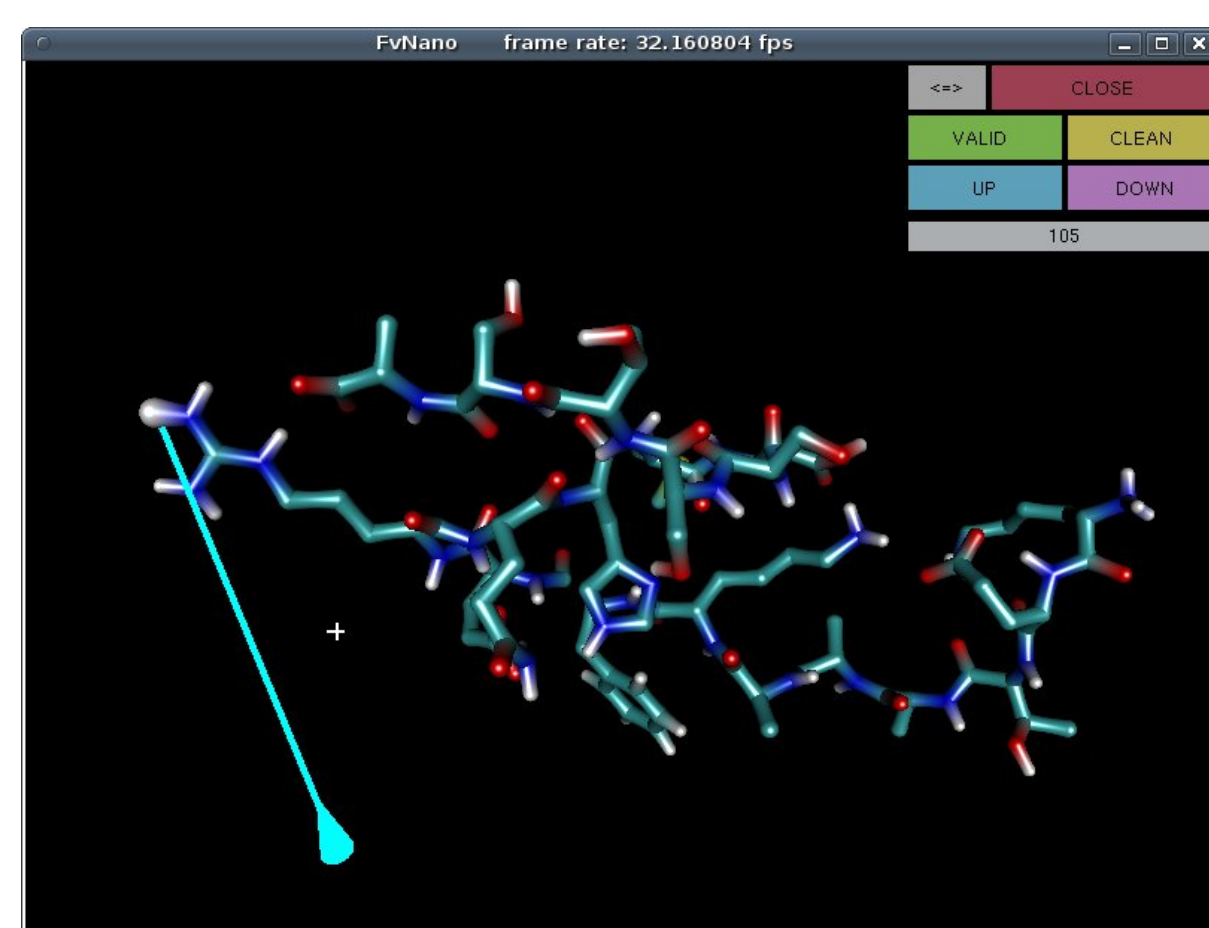
Dynamique Moléculaire Interactive



L’application de dynamique interactive permet de coupler le rendu graphique et l’interaction utilisateur avec un moteur de dynamique moléculaire lancé en parallèle. L’utilisateur peut ainsi observer l’impact de son action sur la structure de la molécule étudiée en «temps réel».

A l’heure actuelle, les périphériques supportés pour l’interaction sont la souris et le **SpaceNavigator** pour la navigation dans la scène et le **Phantom** pour la sélection et le déplacement des atomes, avec un retour de force proportionnel à la perturbation appliquée.

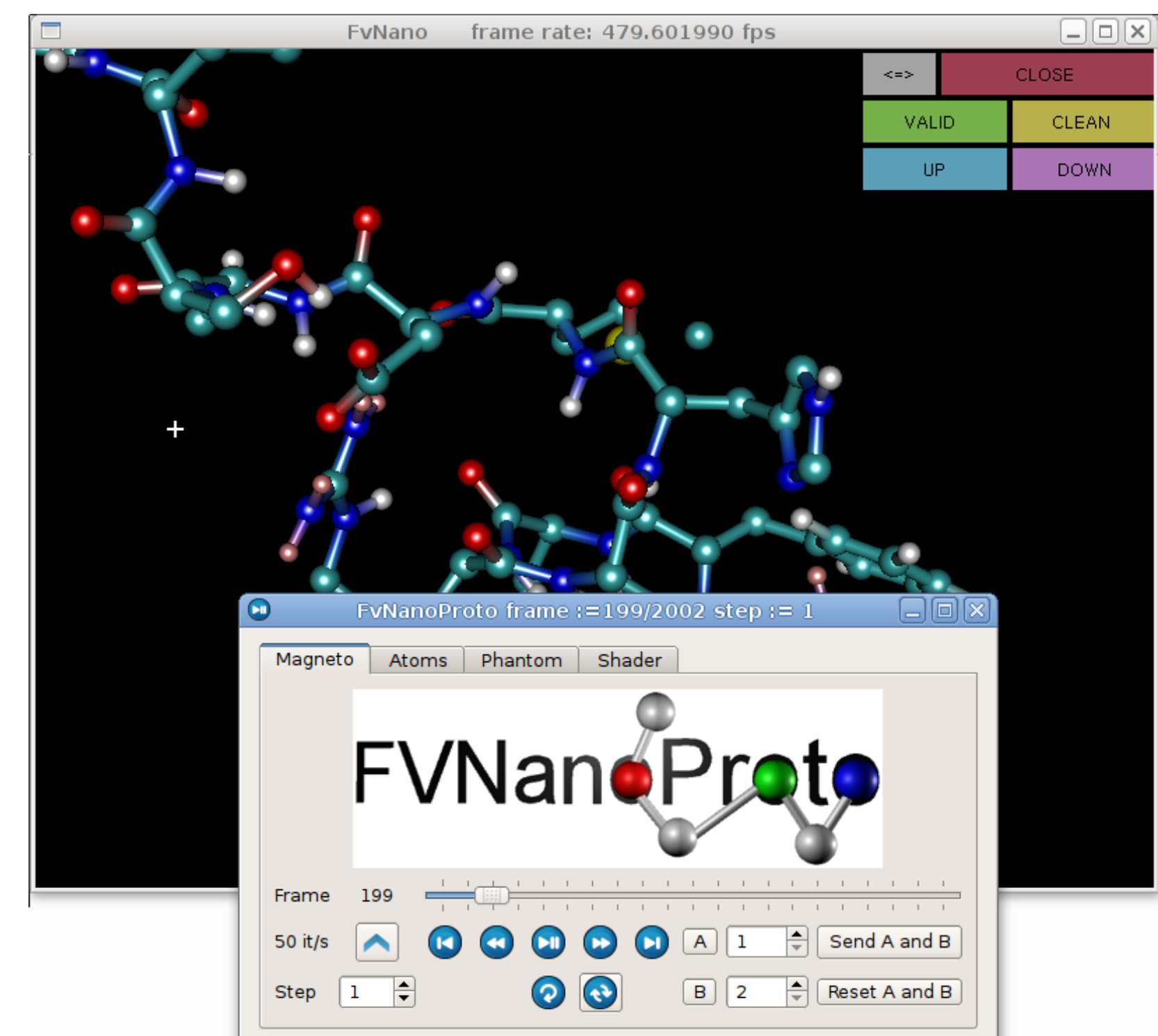
Capture d’écran de l’application de dynamique interactive. Le cône représente la position du pointeur et le trait cyan lie celui-ci à l’atome en cours de déplacement.



L’application de dynamique moléculaire interactive a été lancée sur des grappes de différente taille et les résultats obtenus pour un système de 305 000 atomes sont présentés dans la figure de droite. Des tests avec des grappes de taille plus importante sont en cours.

Lecteur de trajectoires

Avec le lecteur de trajectoires, il est possible de visualiser une trajectoire de dynamique moléculaire précédemment calculée à l’aide de logiciels courants tel que GROMACS. Cette application permet de naviguer aisément dans des dynamiques de systèmes biologiques, quelles que soient leur taille. L’interface est similaire à un lecteur de vidéo et propose les mêmes fonctionnalités (pause, navigation, vitesse de lecture ...).



Capture d’écran de l’application TrajViewer avec une fenêtre de rendu et une fenêtre regroupant les contrôles. Une fonction permettant d’afficher des distances entre deux sélections sera bientôt ajoutée.