

Géométrie virtuelle pour la visualisation moléculaire

Arthur CAVALIER, Nicolas COURILLEAU
XLIM/ASALI/IG, UMR CNRS 7252 - Université de Poitiers

Vincent LARROQUE, Maxime MARIA
XLIM/ASALI/SIR, UMR CNRS 7252 - Université de Limoges

AG MIRES - 07 juillet 2025

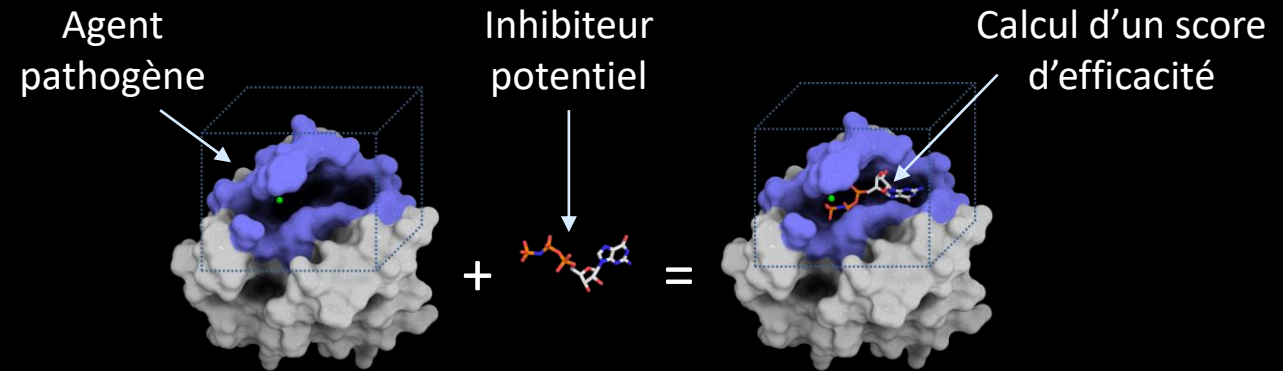
Contexte : visualisation moléculaire

Essentielle en biochimie (*e.g. drug-design*)

- Aide à la compréhension des bio-chimistes
- Applications nécessitant l'affichage et/ou la manipulation de complexes moléculaires

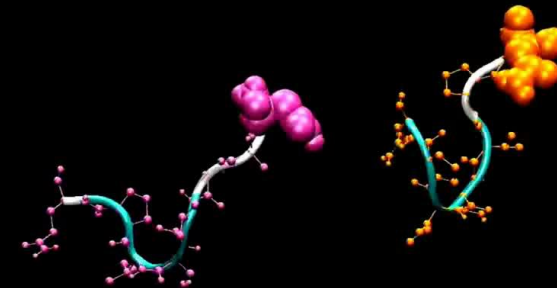
Docking

- Recherche d'inhibiteurs de pathogènes
- Moins de tests *in vivo* à effectuer



Dynamique moléculaire

- Analyse visuelle du comportement des molécules dans le temps
- Meilleure compréhension des interactions



Représentations moléculaires

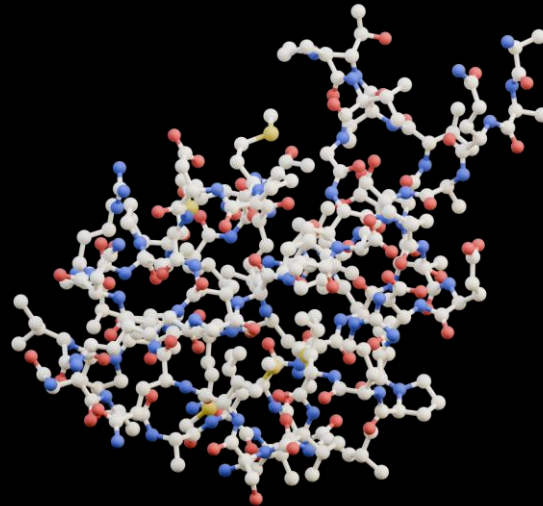
Différentes représentations

- En fonction des caractéristiques à étudier

van der Waals



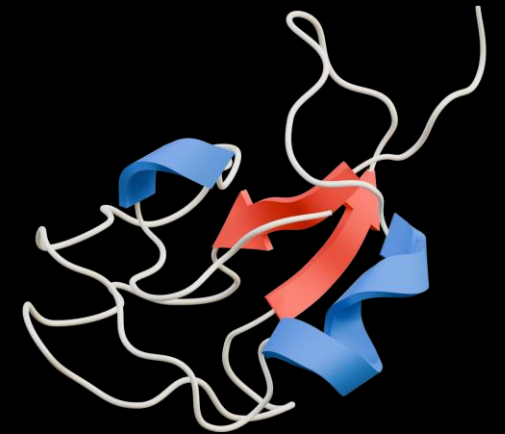
Ball & Stick



Surface Exclue au Solvent



Cartoon

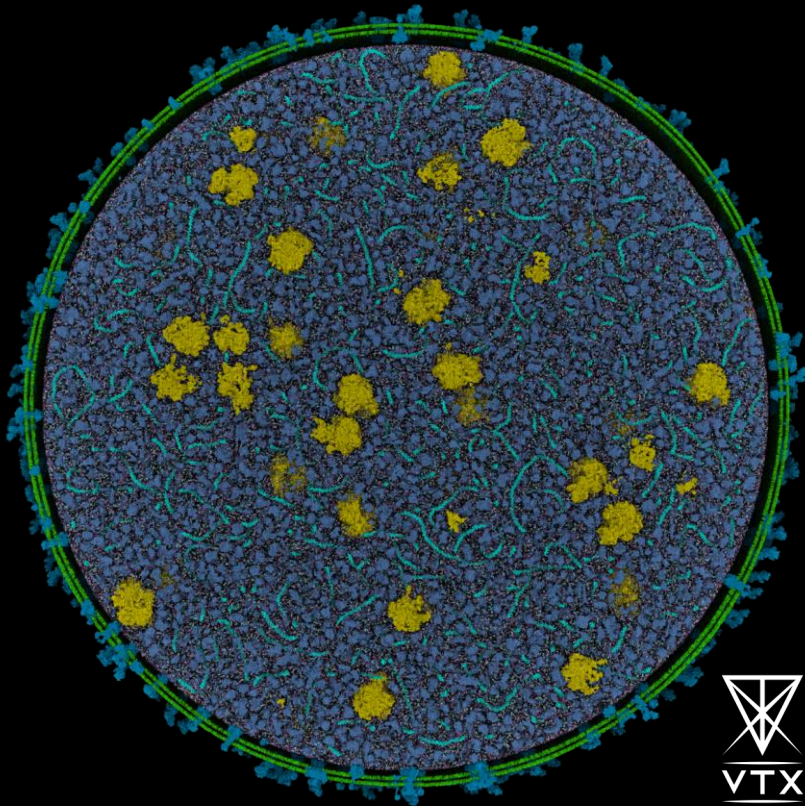


Différentes représentations d'une même petite protéine (9MSI)

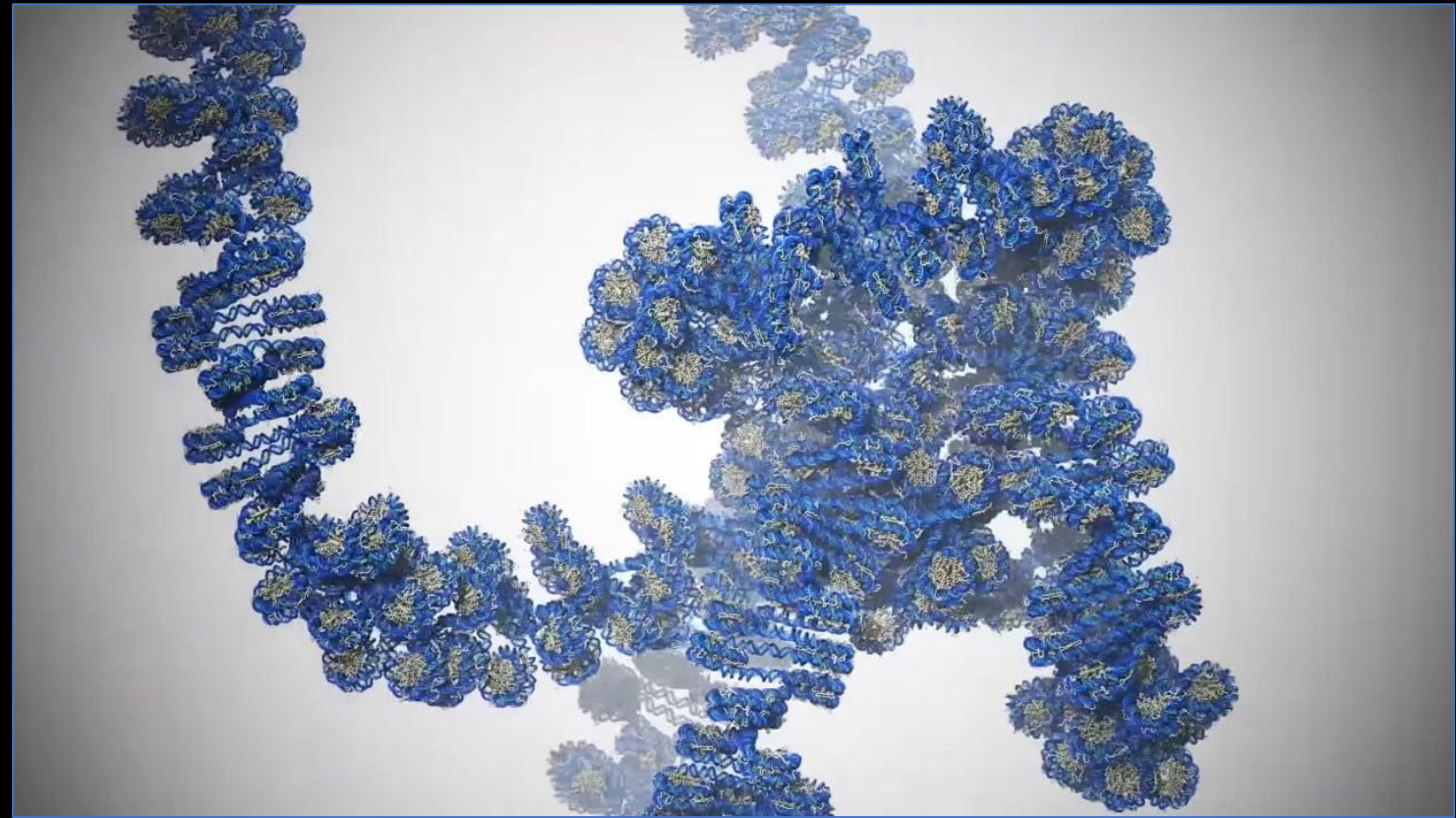
Problématique : taille des simulations

Simulations de plus en plus complexes

- Affichage temps-réel difficile, voire impossible 😞



Cellule d'un mycoplasme (> 100M atomes) ©GC Martini
Visualisation temps-réel avec VTX (Nvidia RTX 2080M)

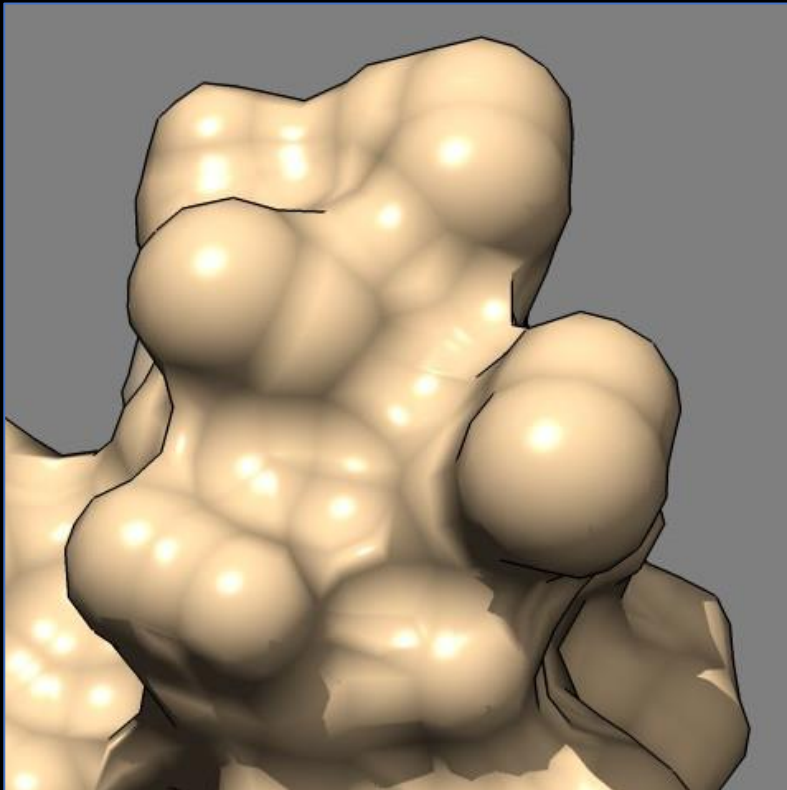


Un gène humain (> 1G atomes) ©Los Alamos National Laboratory
Trinity Supercomputer : 41,5 PFlops, 2 PB Ram, 174M \$ → 1 ns / jour...

Problématique : représentation géométrique

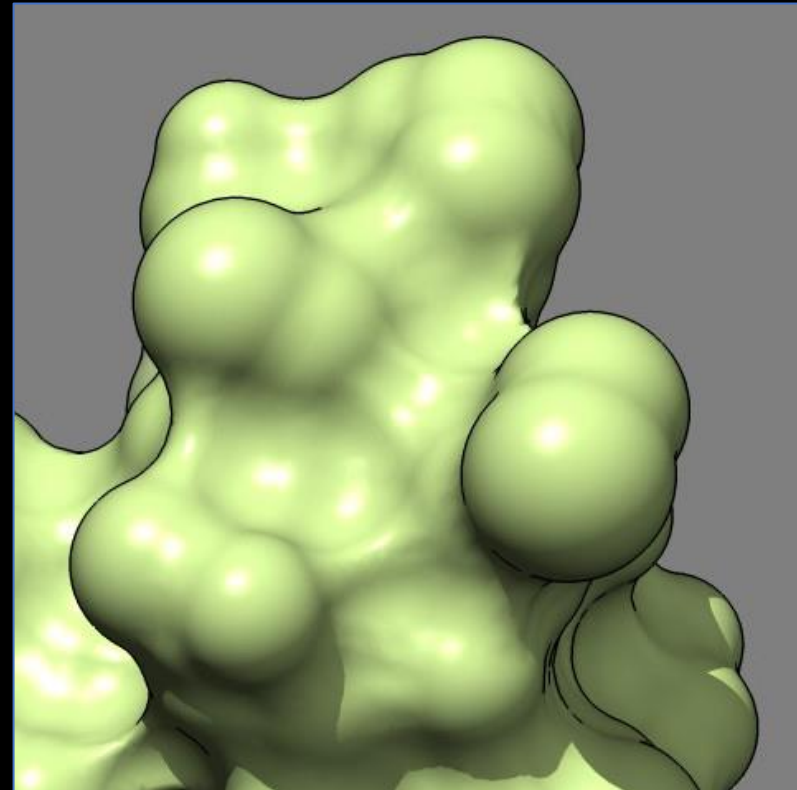
Maillages triangulaires

- Consommation mémoire excessive 😞
- Surface discrétisée 😞
- Performances limitées 😞



Surfaces implicites

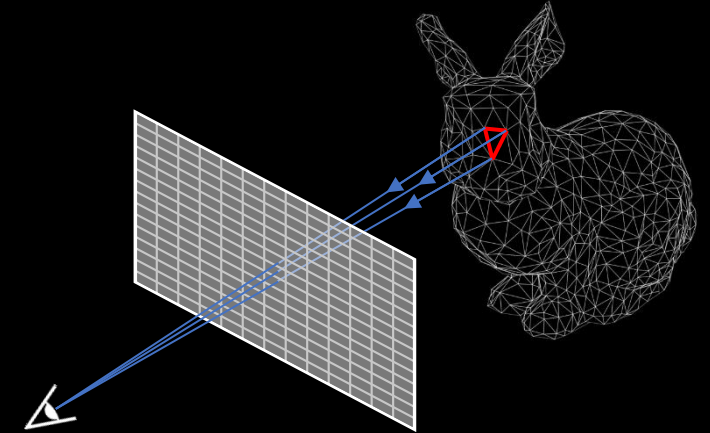
- Réduction considérable de la mémoire nécessaire 😊
- Surface lisse (au pixel près) 😊
- Affichage plus complexe 😞



Rastérisation logicielle

Rastérisation :

- Projection de la géométrie (3D) sur l'espace écran (2D, discret)
- Approche traditionnelle des pipelines graphiques temps-réel
- Entièrement câblée sur les cartes graphiques (triangles)



Rastérisation logicielle :

- Projection entièrement algorithmique
- Beaucoup d'attention récemment (*e.g.* Nanite, Unreal Engine 5)
- Performances jusqu'à 3 fois plus élevées (triangles)



Notre projet MIREs

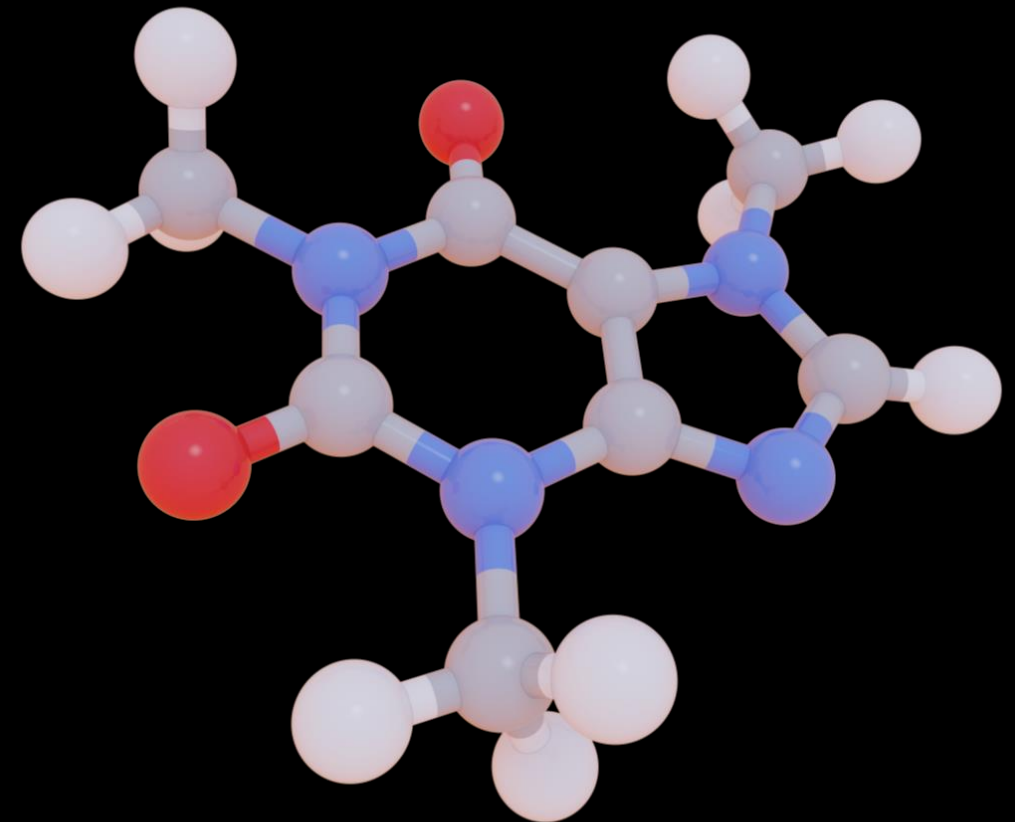
Rastérisation logicielle spécifiquement adaptée aux primitives géométriques des molécules

Objectifs

- Rastérisation efficace des quadriques (sphères, cylindres)
- Développement du système de rendu
- Ouverture sur les géométries plus complexes

Un stagiaire de 4^{ème} année (4 mois de février à juin)

- Sebastián MIRA PACHECO, Universidad de Chile
- Accueilli à XLIM Limoges



Résultats

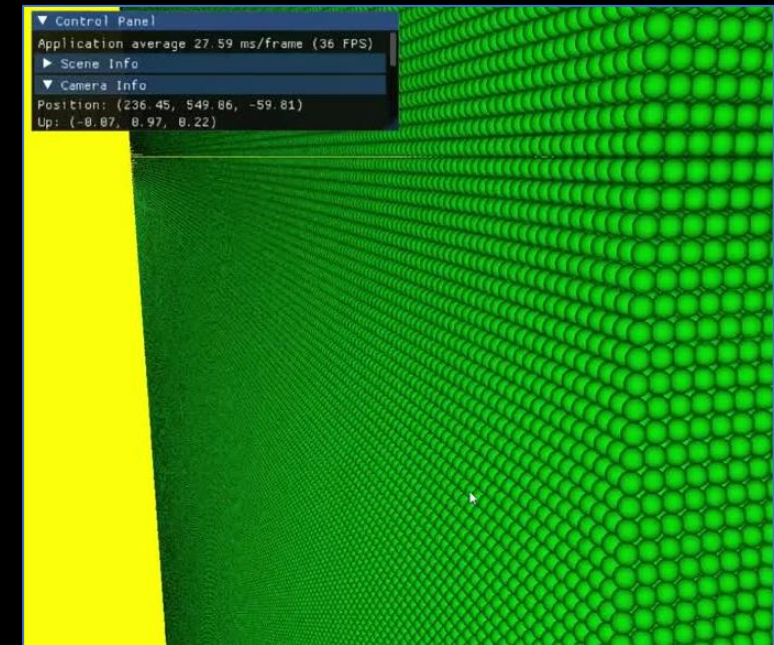
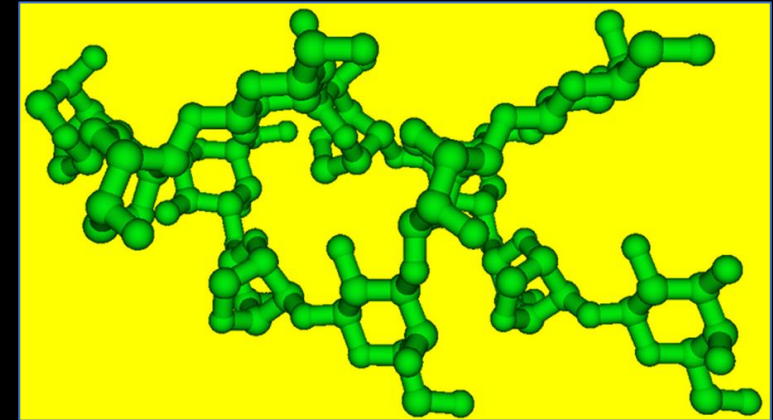
Ça fonctionne ! 😊

Premiers résultats encourageants

- Performances similaires voire meilleures
- Il reste des benchmarks plus sérieux à faire

Reste à faire...

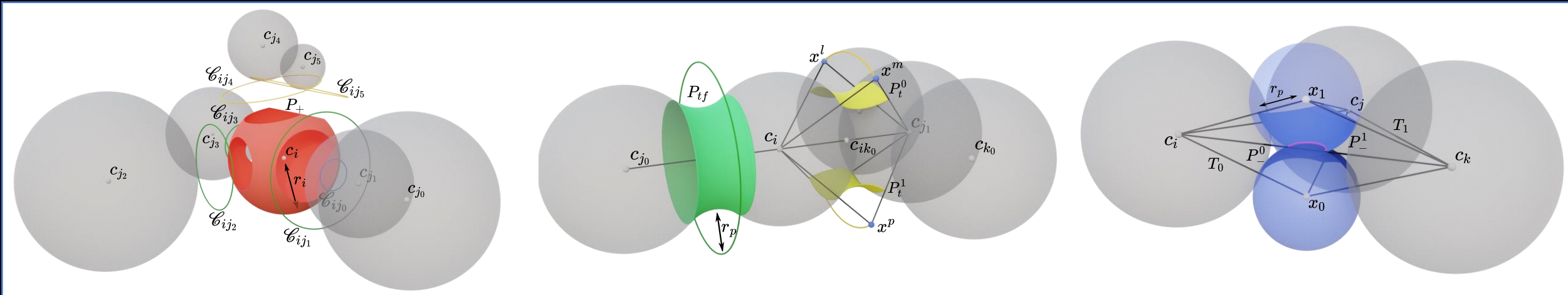
- Des « vrais » benchmarks
- Encore des optimisations
- Un article ?
- Nous continuons à travailler ensemble



100M sphères : entre 35 et 90 FPS (Nvidia RTX 2070M)

Ensuite : représentations surfaciques

Trois types de patches, définis par des fonctions distance signée [CMMM24]



Convex patches (P_+)

Toroidal patches (P_t, P_{tf})

Concave patches (P_-)

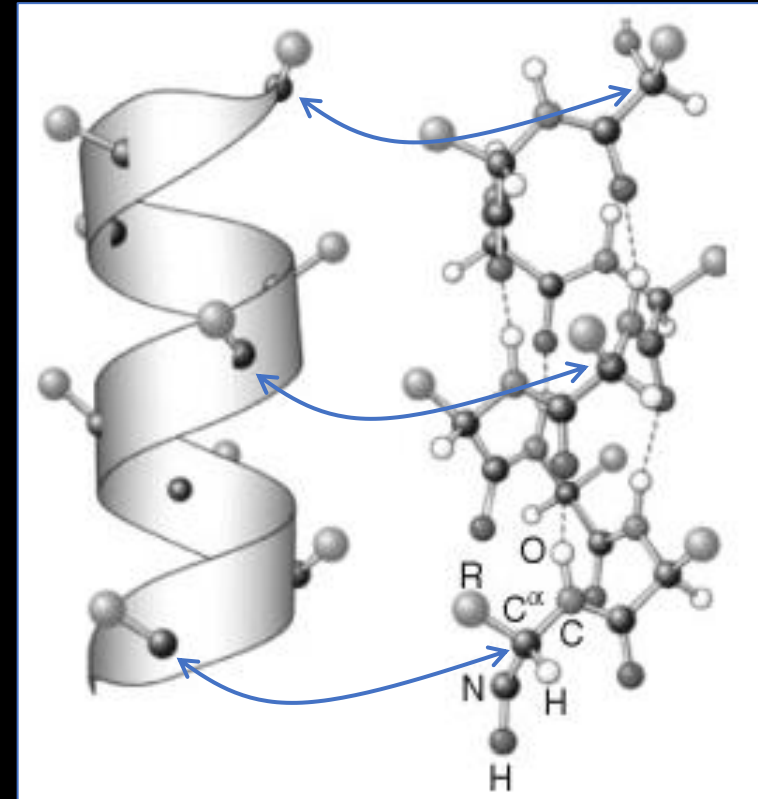


[CMMM24] Plateau--Holleville C., Maria M., Montes M., Merillou S. – Efficient GPU computation of large Solvent-Excluded Surface – IEEE TVCG – 2024

Ensuite : structures secondaires

Patches, de surfaces paramétriques (*e.g. Bézier, B-Splines*)

➤ Définis en fonctions des chaînes carbonées



Conclusion

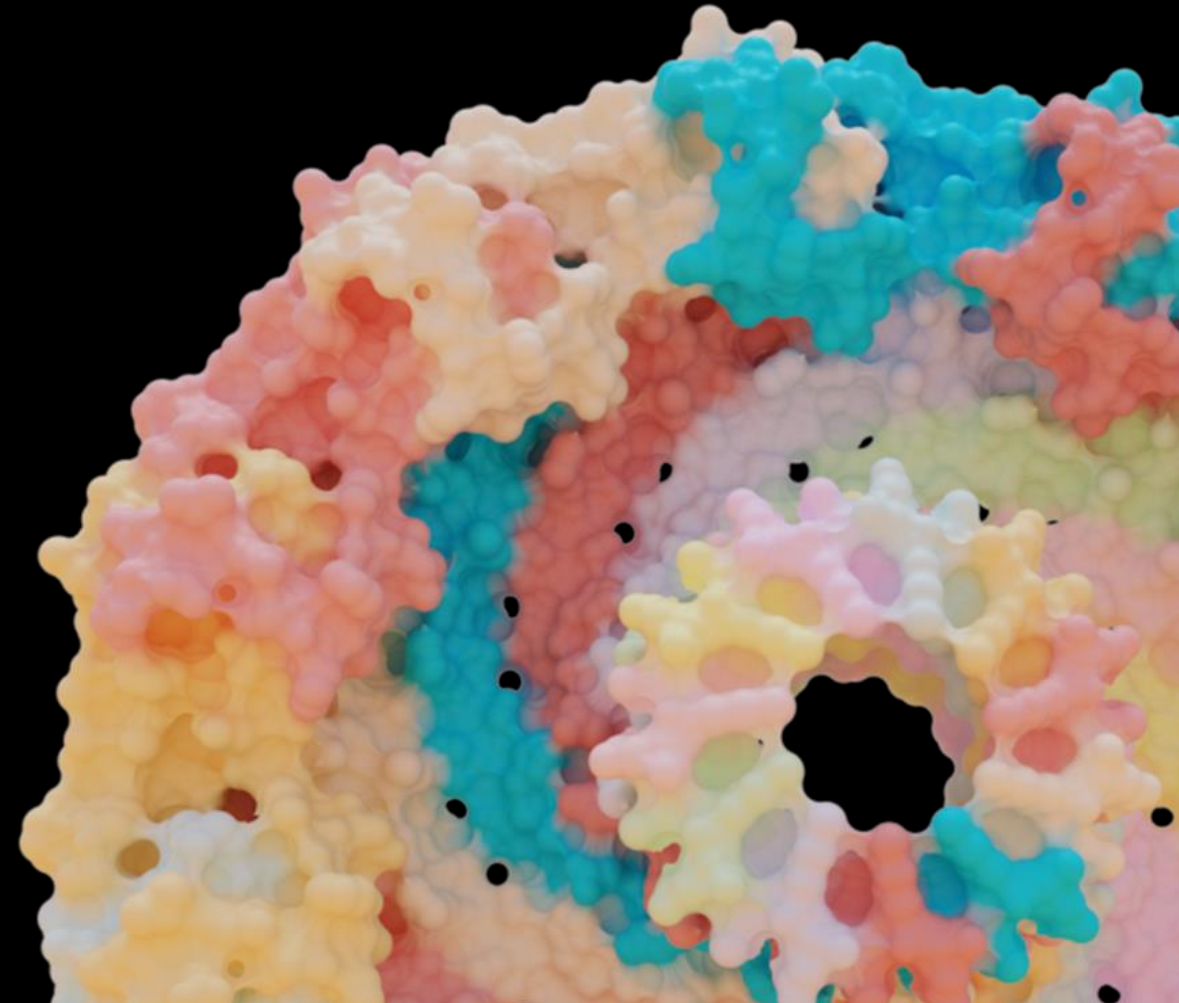
Rastérisation logicielle adaptée aux scènes moléculaires

Stage MIREs :

- Premiers pas, représentation via quadriques
- Résultats encourageants, à peaufiner

Suite :

- Représentations surfaciques
- Cartoon
- Projet INRIA PIQ



Merci de votre attention !
Des questions ?