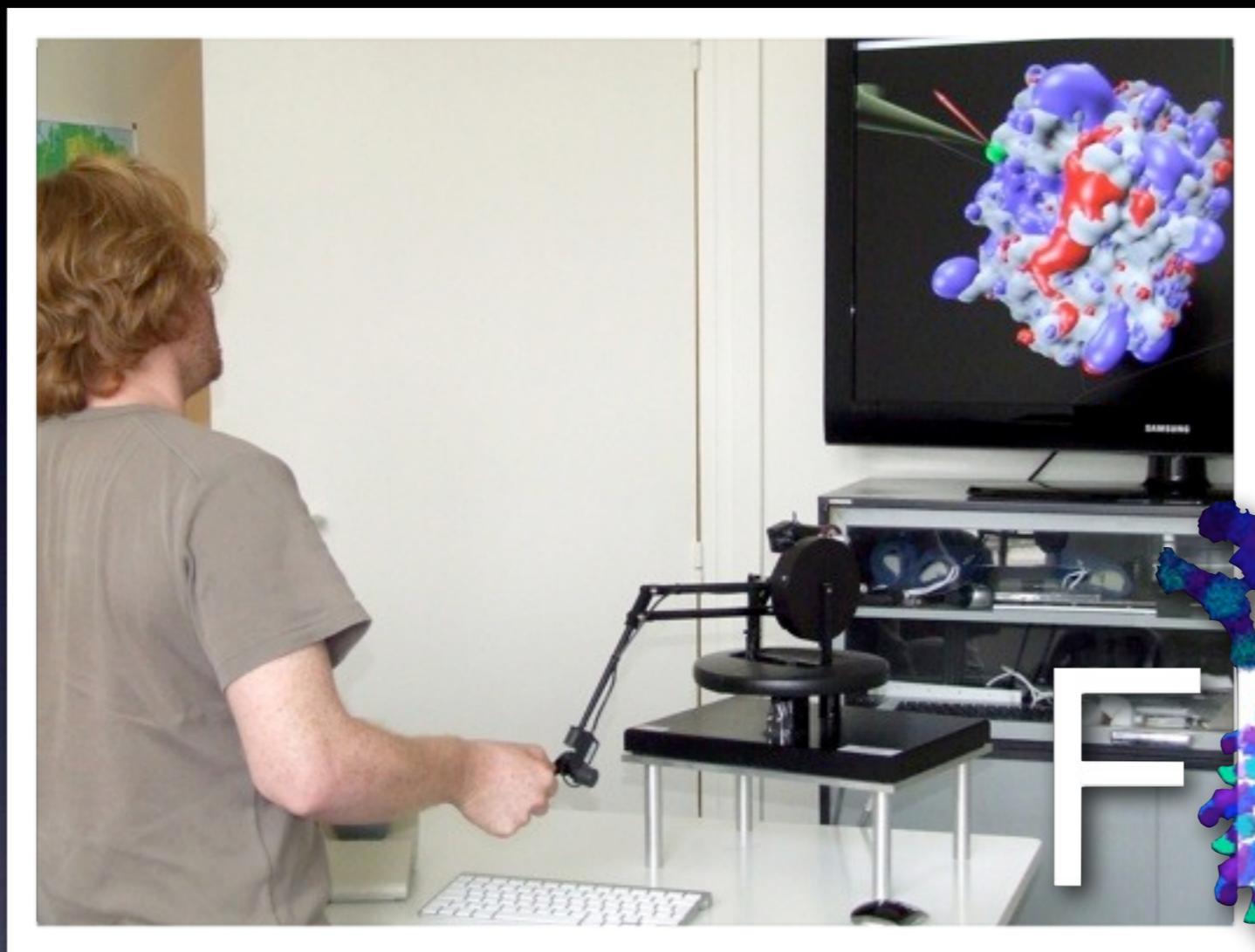


FLOWVR-NANO / ANR CIS7

Laboratoire virtuel de modélisation de systèmes moléculaires nanoscopiques



FLOWVR
NANO

AGENCE NATIONALE DE LA RECHERCHE
ANR
Grand Colloque STIC 2012



Partenaires

LBT (CNRS, Paris) Coordinateur : M Baaden
Calcul intensif et simulations moléculaires de systèmes biologiques complexes **1**

Moais (INRIA, Grenoble): B Raffin
Applications interactives haute performance, algorithmes parallèles adaptatifs **2**

LIFO (Université d'Orléans): S Robert
Parallélisme, Réalité Virtuelle et Visualisation Scientifique Interactive **3**

CEA (DIF/DSSI, Bruyères): J.-P. Nominé
Département Sciences de la Simulation et de l'Information. Grand centre de calcul - Calcul et visualisation parallèles **4**

Partenaires

CALCUL INTENSIF

M Sansom / Univ Oxford

MATÉRIAUX

JP Nominé / CEA

LBT (CNRS, Paris) Coordinateur : M Baaden
Calcul intensif et simulations moléculaires de systèmes biologiques complexes **1**

Moais (INRIA, Grenoble): B Raffin
Applications interactives haute performance, algorithmes parallèles adaptatifs **2**

LIFO (Université d'Orléans): S Robert
Parallélisme, Réalité Virtuelle et Visualisation Scientifique Interactive **3**

CEA (DIF/DSSI, Bruyères): J.-P. Nominé
Département Sciences de la Simulation et de l'Information. Grand centre de calcul - Calcul et visualisation parallèles **4**

VISUALISATION

*B Lévy / LORIA
T Ertl / VISUS*

Europe

Allemagne

UK

France

INFORMATIQUE

B Raffin / INRIA

S Besse / HOLO3

N Férey / LIMSI

S Robert / LIFO

Objectifs

- Elaborer FVNano, un '**laboratoire virtuel**' pour des simulations moléculaires interactives
- Hisser FVNano à l'échelle du **calcul intensif de pointe**
Parallélisme, Calculs sur GPU, Visualisation performante.
- Réaliser de **grands défis applicatifs** avec FVNano
- **Structurer une communauté interdisciplinaire** autour des simulations moléculaires interactives
biologie - chimie - matériaux - informatique

Laboratoire virtuel - objectifs

- Visualisation scientifique interactive
 - *haute performance*
 - *avec des modalités d'interaction adaptées*
- Architecture logicielle modulaire
 - *composants hétérogènes interchangeables*
 - *multi-plateforme (grappe de PC, multi-cœur, GPU...)*
- Environnement ouvert
- Composants logiciels réutilisables
- Applications adaptables à l'environnement d'exécution
- Favoriser la dissémination des techniques de simulations interactives
- Factoriser les efforts de développement logiciel

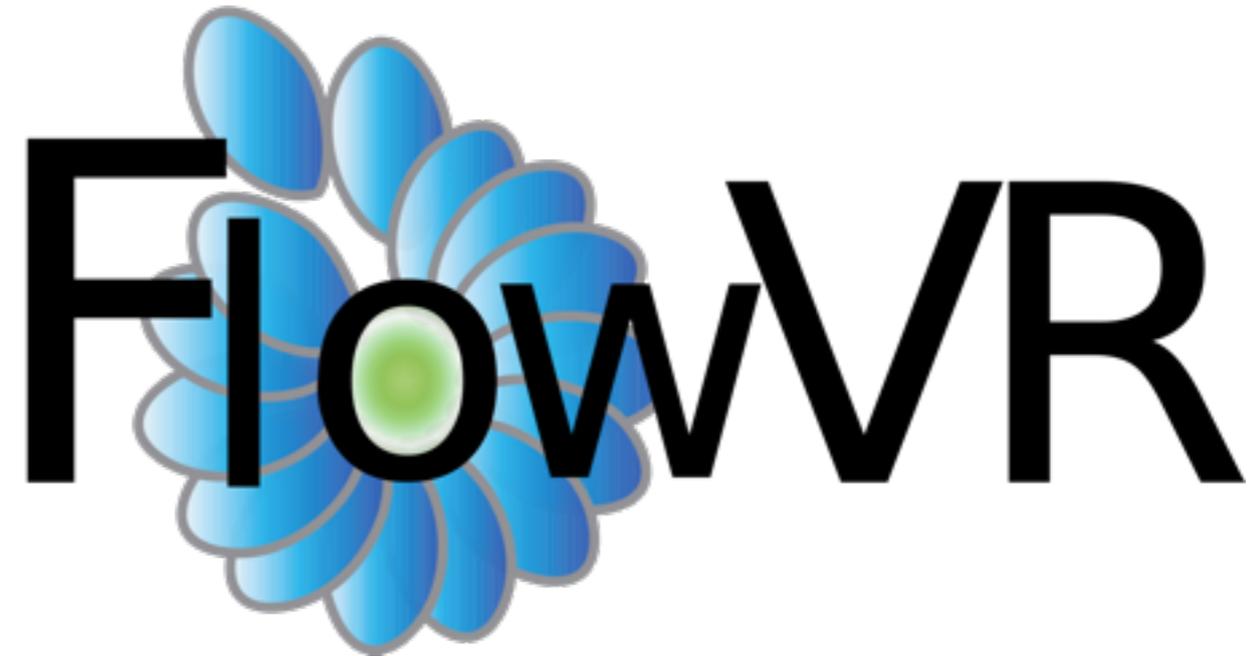
Une double approche



- Briques indépendantes
 - «légères»
 - *evtl. limitées en performance*

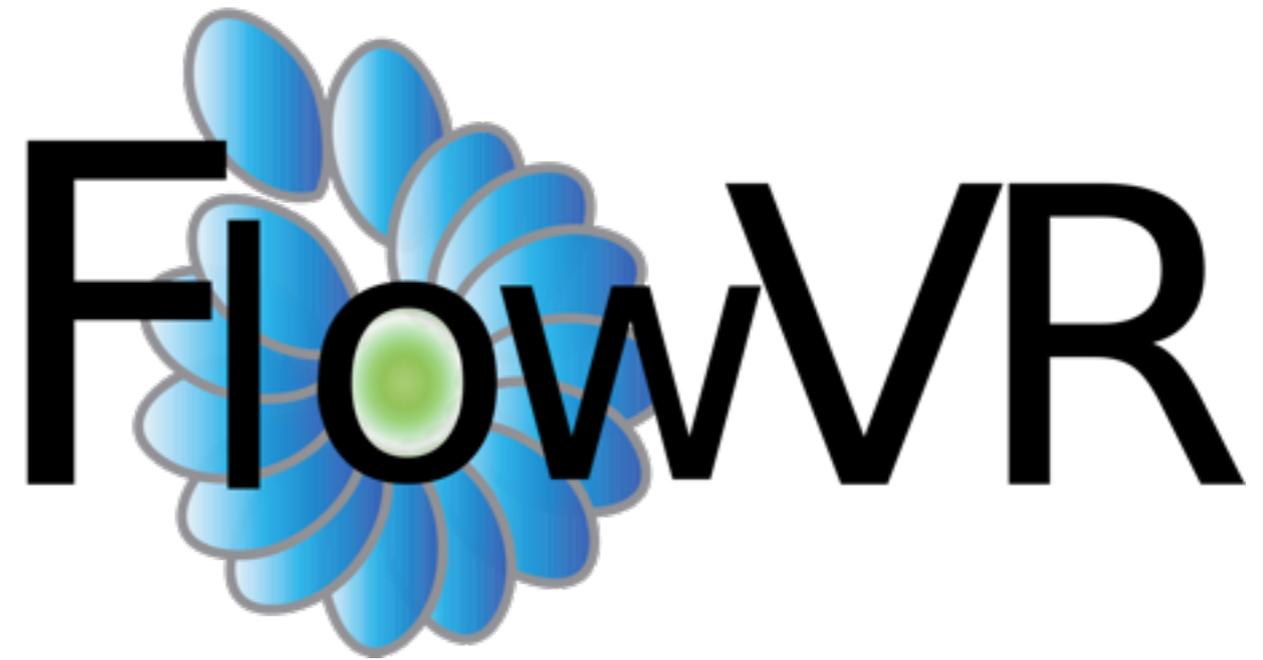


<http://mddriver.sourceforge.net>



- Applications intégrées haute performance
 - *gestion fine*
 - *optimisation*
 - *nouveaux concepts*

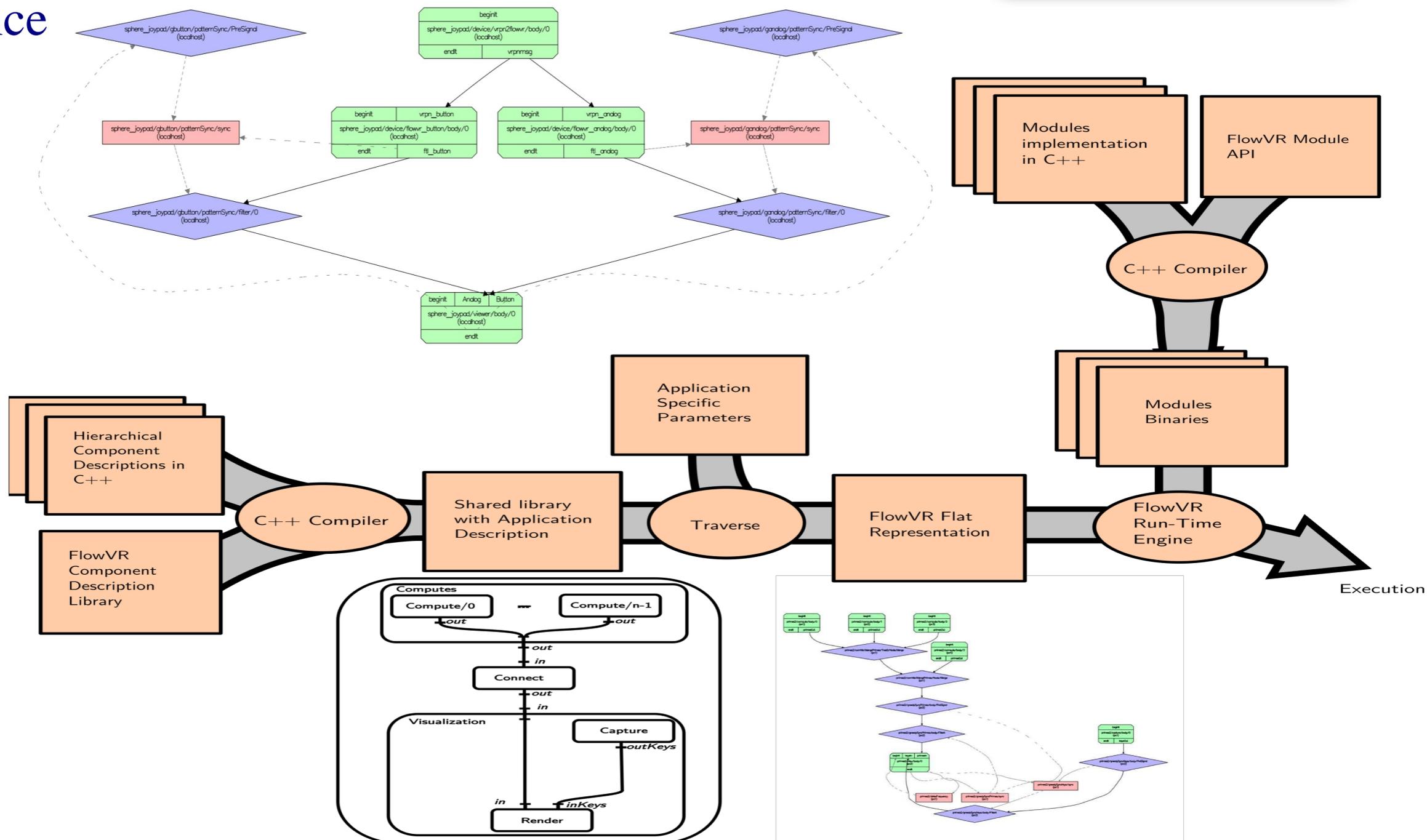
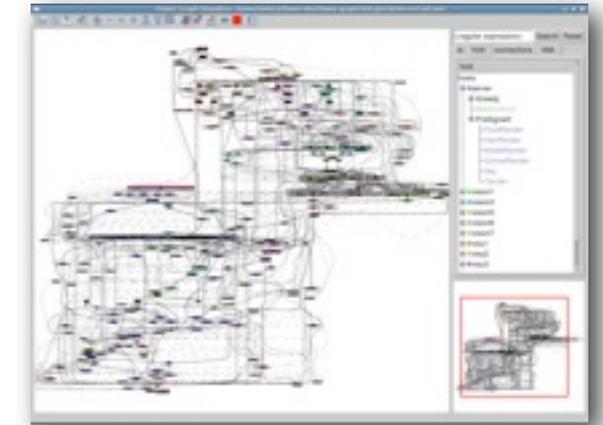
Latest release (12/11):
FlowVR 1.8



Latest release (12/11):
FlowVR 1.8

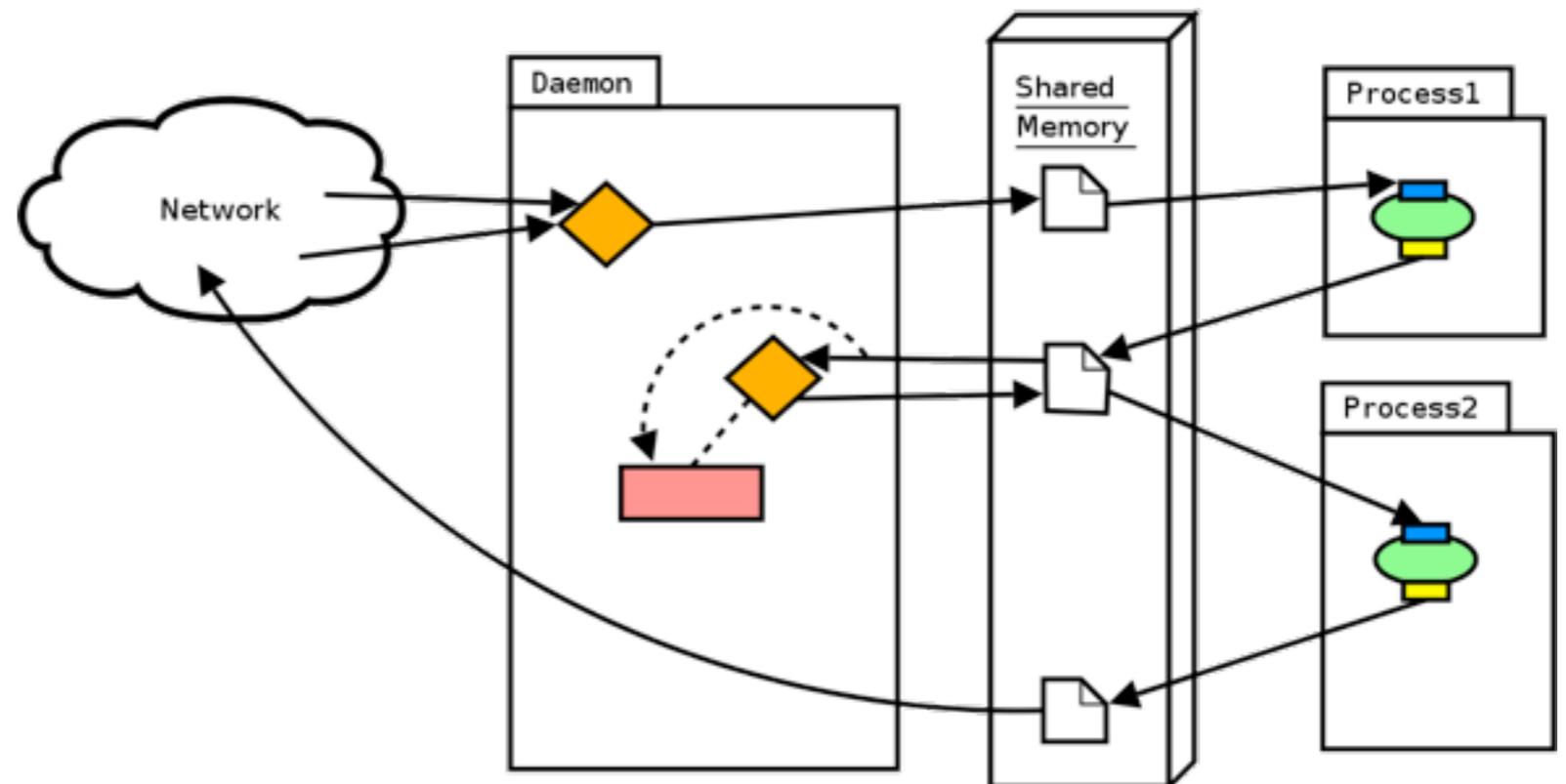
FlowVR - Modèle de programmation et Principes

- Programmation orientée flot de données
- Modèle de composants hiérarchiques
- Déploiement d'applications sur des architectures type grappes de PC, grilles etc...
- Conçu pour le calcul parallèle et distribué haute performance



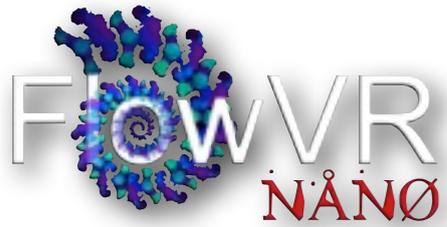
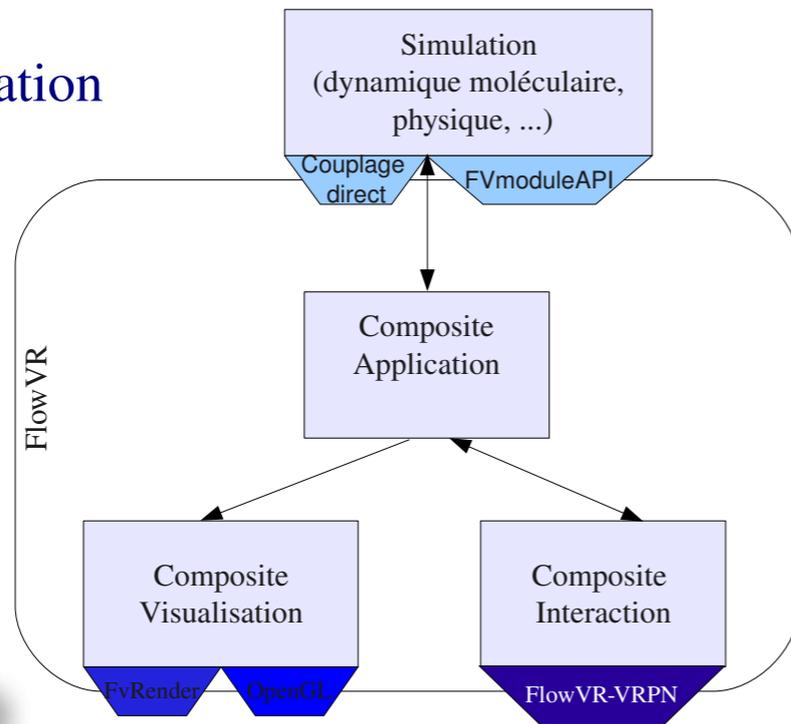
FlowVR - Runtime

- **Daemon** based
- **Modules**: external processes
- **Filters**: daemon plugins
- **Module/filters/daemon**: direct access to shared memory under the daemon orchestration



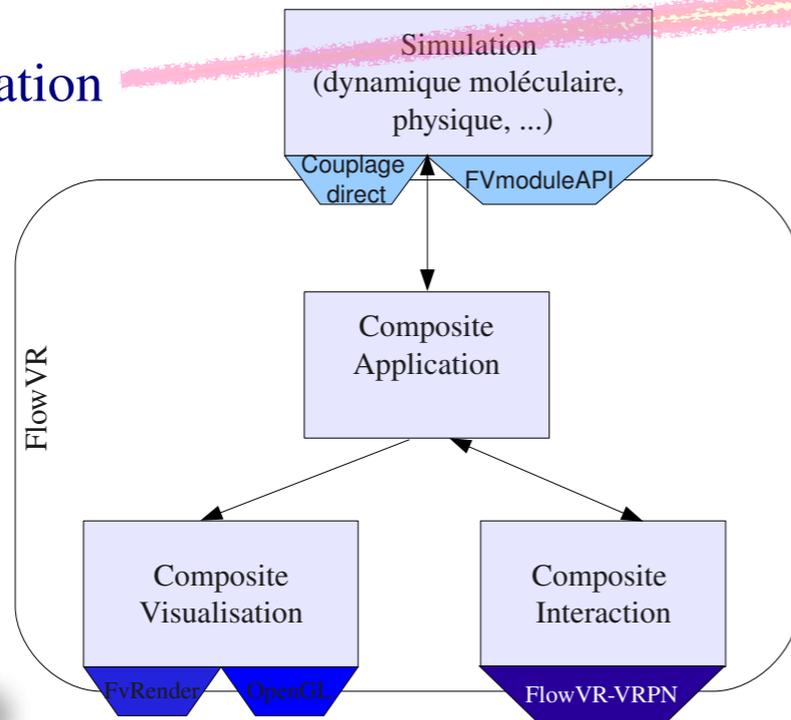
Composants FvNano

- Moteur de simulation
- Visualisation
- Interaction
- Application
 - gestion des forces
 - intégration des interactions



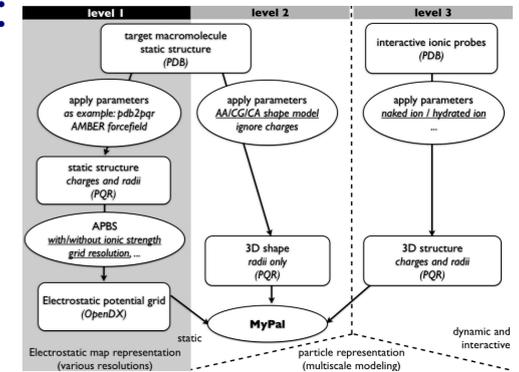
Composants FvNano

- Moteur de simulation
- Visualisation
- Interaction
- Application
 - gestion des forces
 - intégration des interactions



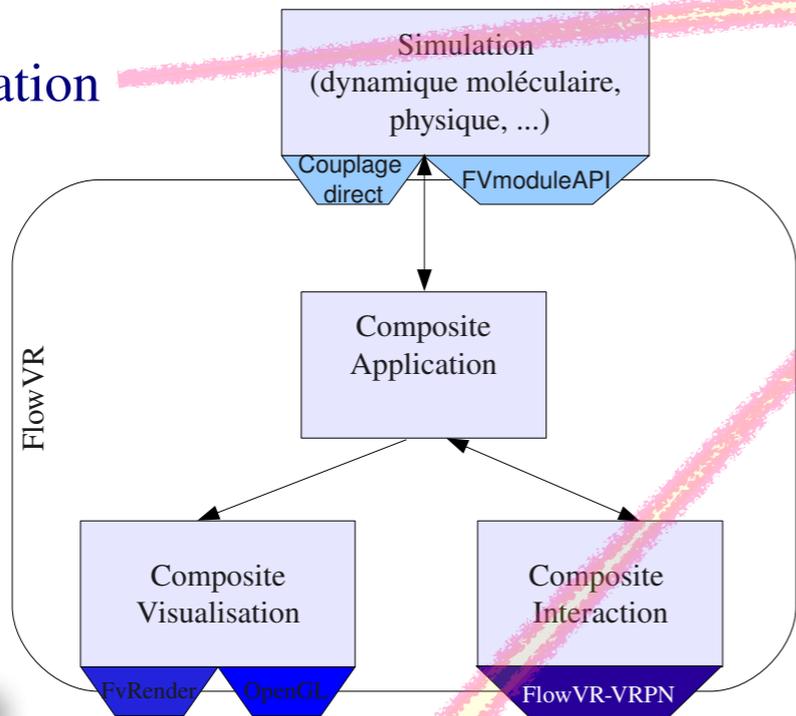
Moteurs de simulation Dynamique moléculaire

- Gromacs
 - version parallèle intégrée en tant que module FlowVR
 - tests sur des modèles de plus de 300000 atomes
- NAMD
 - couplage avec FlowVR
- Logiciels spécifiques FvNano :
 - BioSpring
 - MonPote
 - en cours de validation



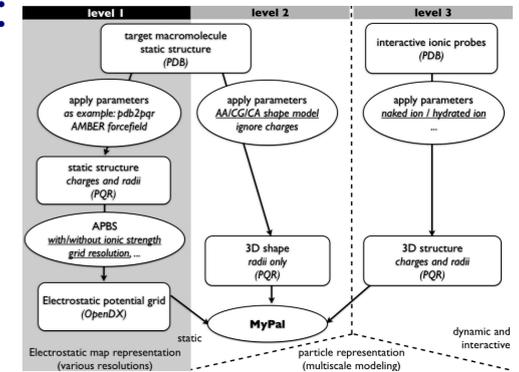
Composants FvNano

- Moteur de simulation
- Visualisation
- Interaction
- Application
 - gestion des forces
 - intégration des interactions



Moteurs de simulation Dynamique moléculaire

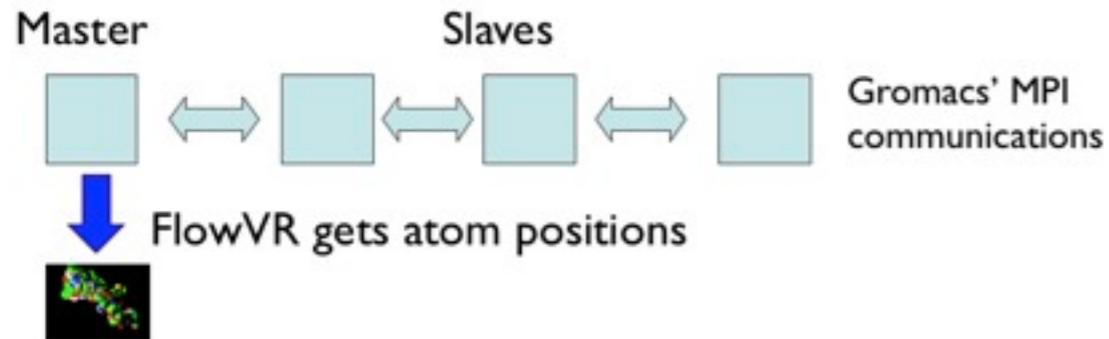
- Gromacs
 - version parallèle intégrée en tant que module FlowVR
 - tests sur des modèles de plus de 300000 atomes
- NAMD
 - couplage avec FlowVR
- Logiciels spécifiques FvNano :
 - BioSpring
 - MonPote
 - en cours de validation



Gromacs Coupling

Gromacs: MPI based parallel molecular dynamics simulation

Coupling: rely on gromacs process to write results on disk

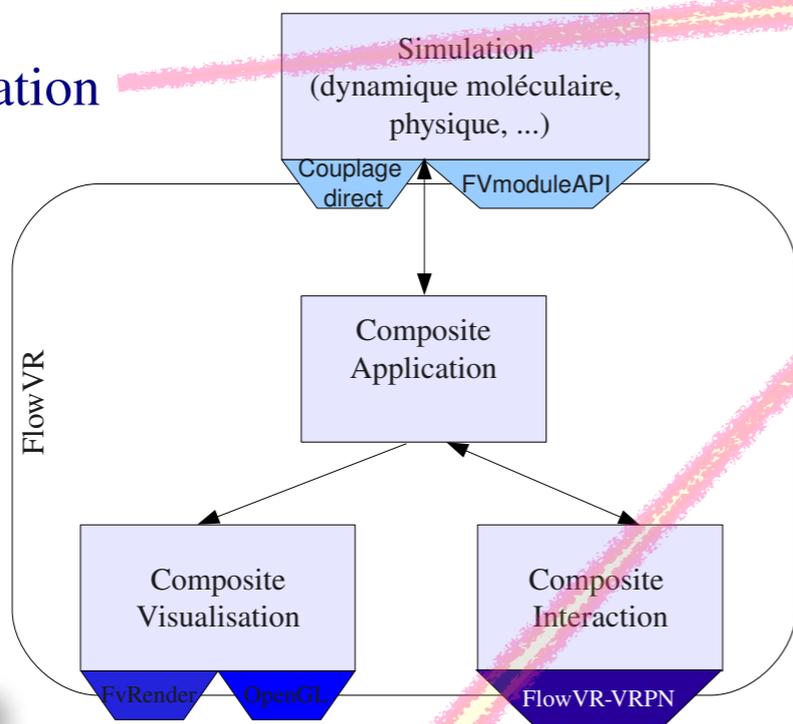


Performance: 609 000 atoms, GPU: GTX580

Processors	Gromacs (it/s)	Rendering (it/s)
33	2,4	52
81	3,2	51

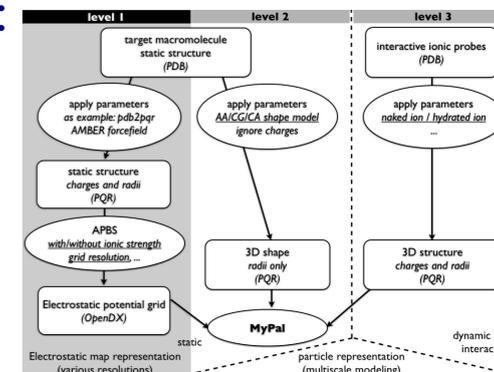
Composants FvNano

- Moteur de simulation
- Visualisation
- Interaction
- Application
 - gestion des forces
 - intégration des interactions



Moteurs de simulation Dynamique moléculaire

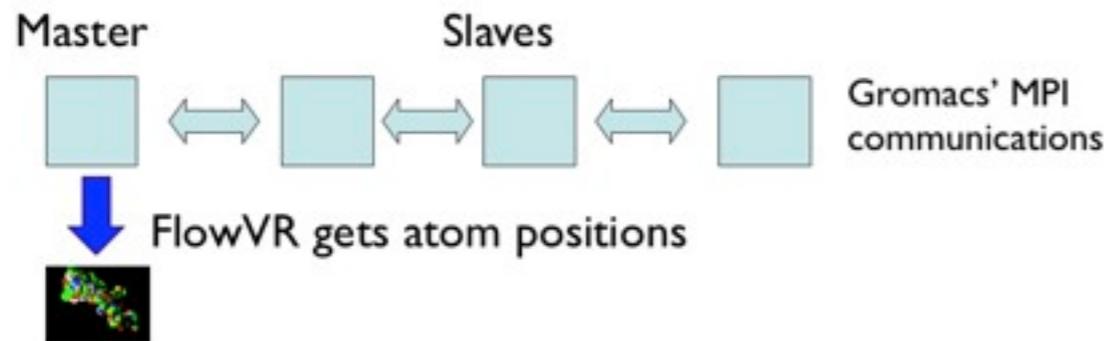
- Gromacs
 - version parallèle intégrée en tant que module FlowVR
 - tests sur des modèles de plus de 300000 atomes
- NAMD
 - couplage avec FlowVR
- Logiciels spécifiques FvNano :
 - BioSpring
 - MonPote
 - en cours de validation



Gromacs Coupling

Gromacs: MPI based parallel molecular dynamics simulation

Coupling: rely on gromacs process to write results on disk

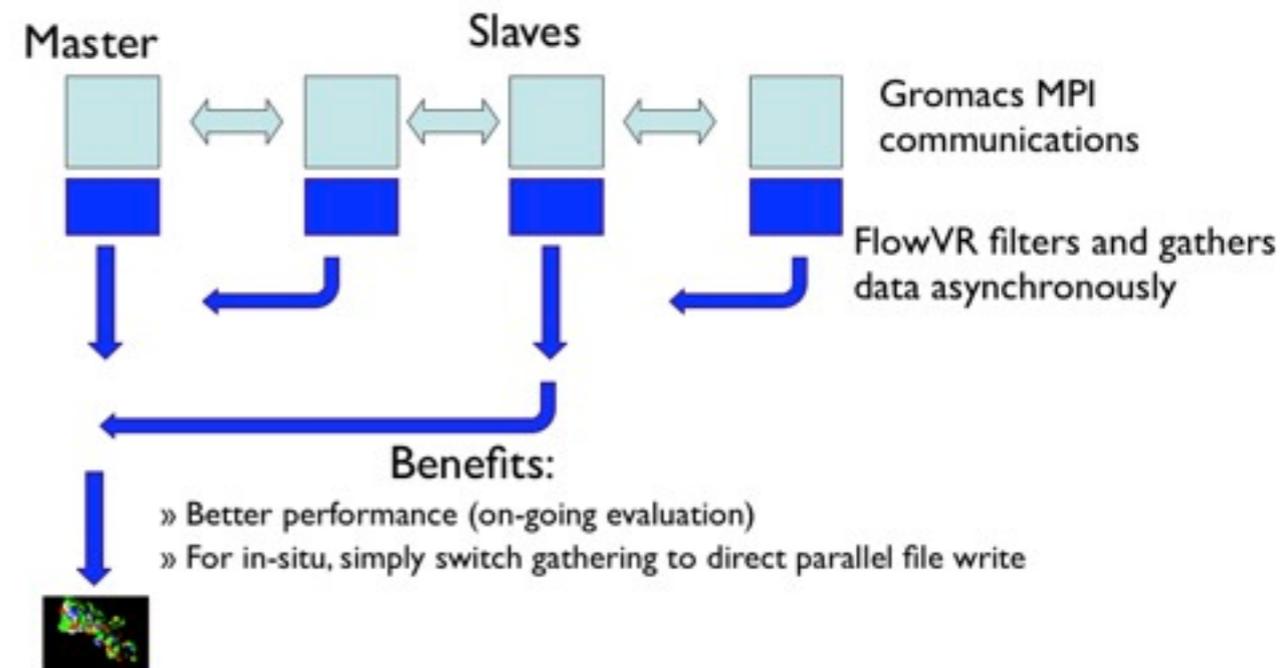


Performance: 609 000 atoms, GPU: GTX580

Processors	Gromacs (it/s)	Rendering (it/s)
33	2,4	52
81	3,2	51

Gromacs Coupling: Towards an In-Situ Mode

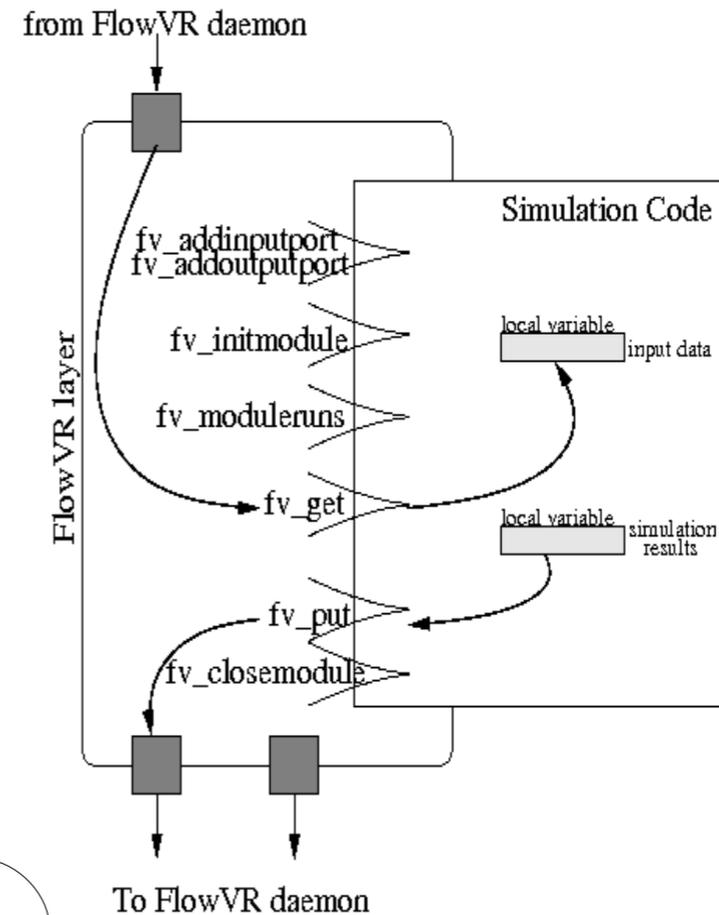
Bypass Gromacs data gathering mechanism to filter and gather data asynchronously



Couplage généralisé

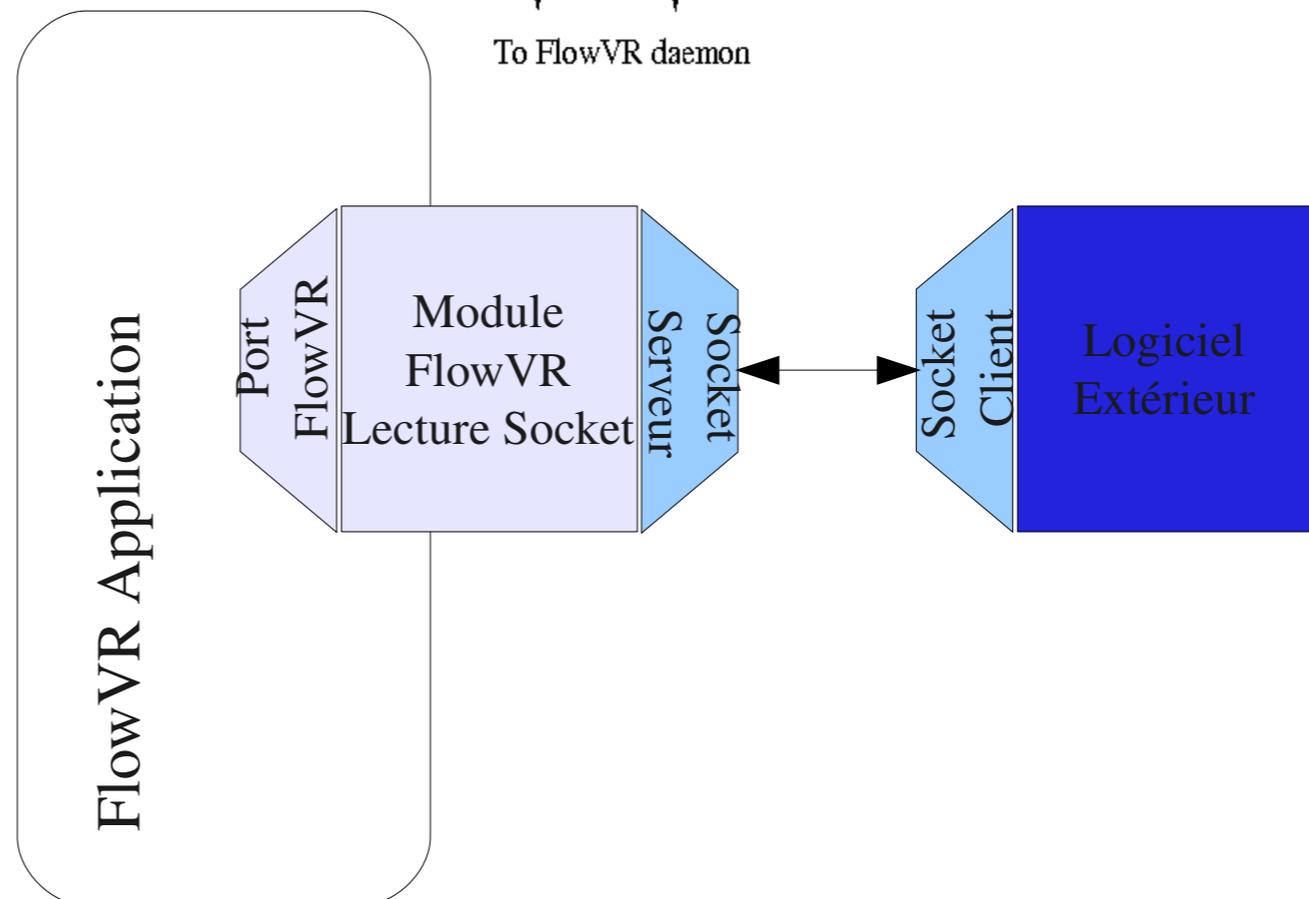
□ FvModuleAPI

- compatible C/C++, Fortran
- transforme simplement un code en module FlowVR
- Tests: Gromacs, VMD, Amber (en cours)



□ Bridge-Component

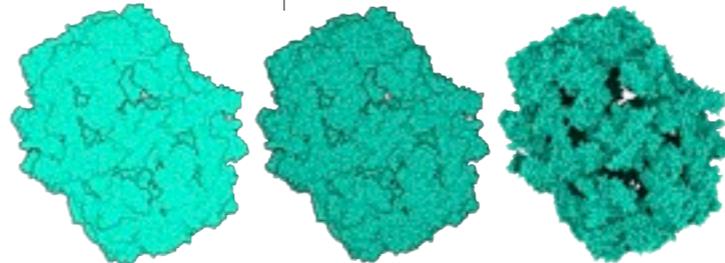
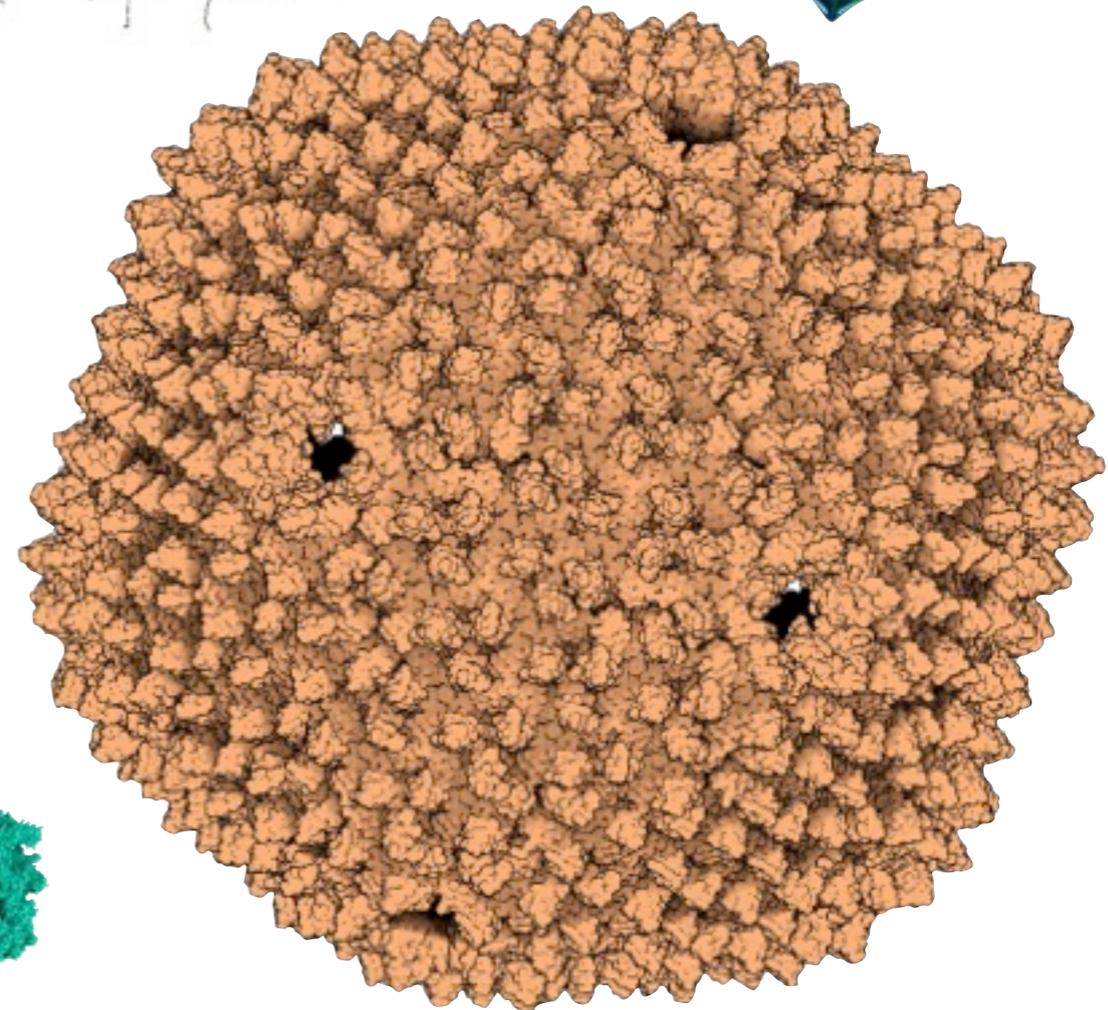
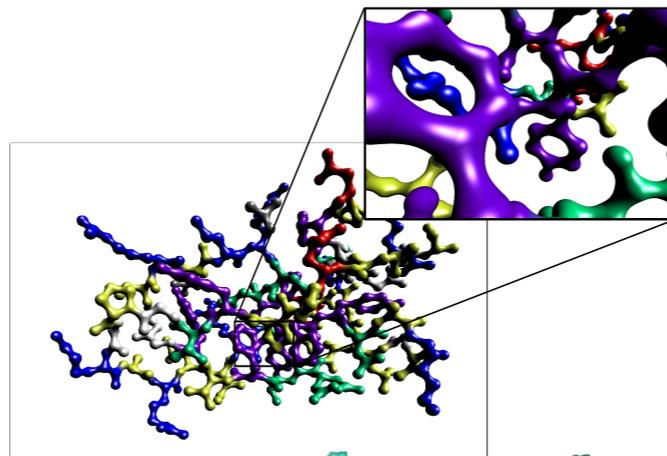
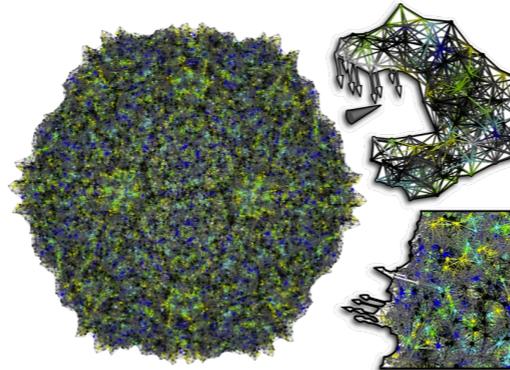
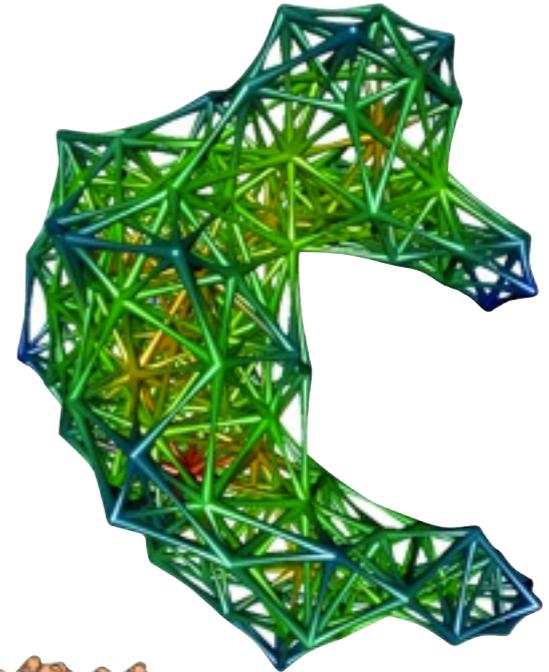
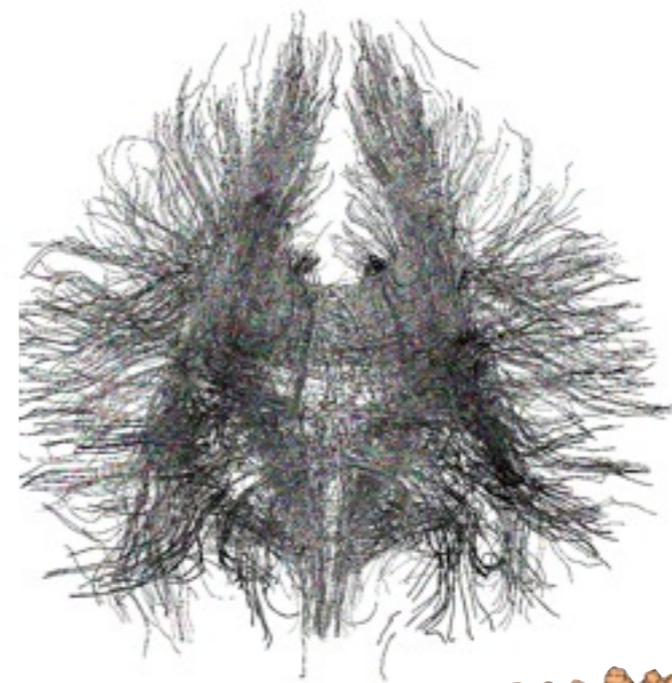
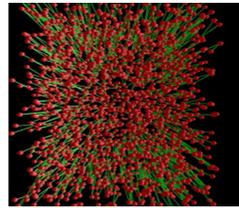
- sockets
- fichiers
- mémoire partagée



Composants de Visualisation

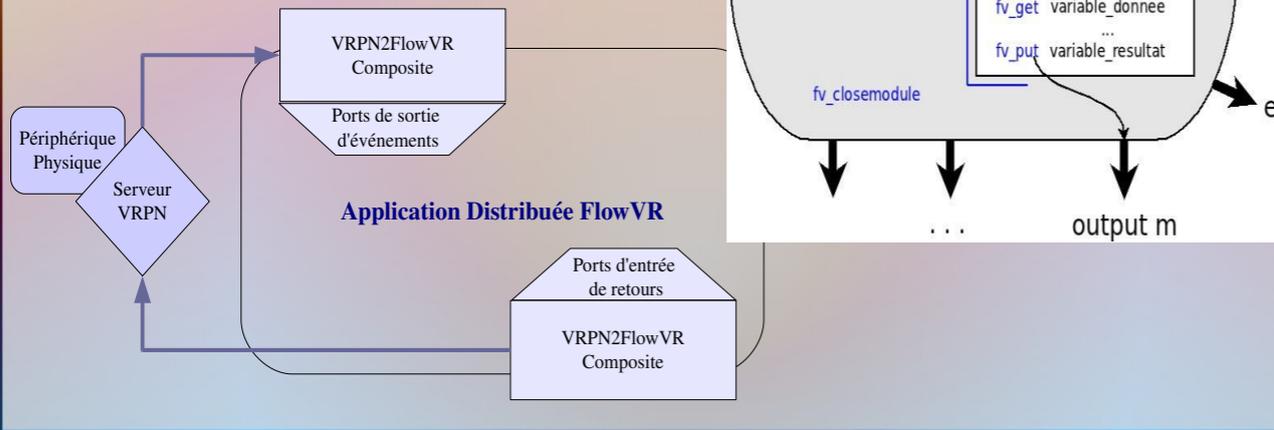


- Prototype OpenGL
 - navigation, interaction
- Prototype VTK
 - évaluation sprite, shaders
- FlowVR-Render
 - rendus VdW, 'Ball And Stick' et Licorice
 - 100% GPU



La visualisation scientifique interactive et FlowVR

- ✓ FlowVR-VRPN
- ✓ FVModuleAPI
- ✓ Couplage *ad hoc* (VMD, BioSpring)

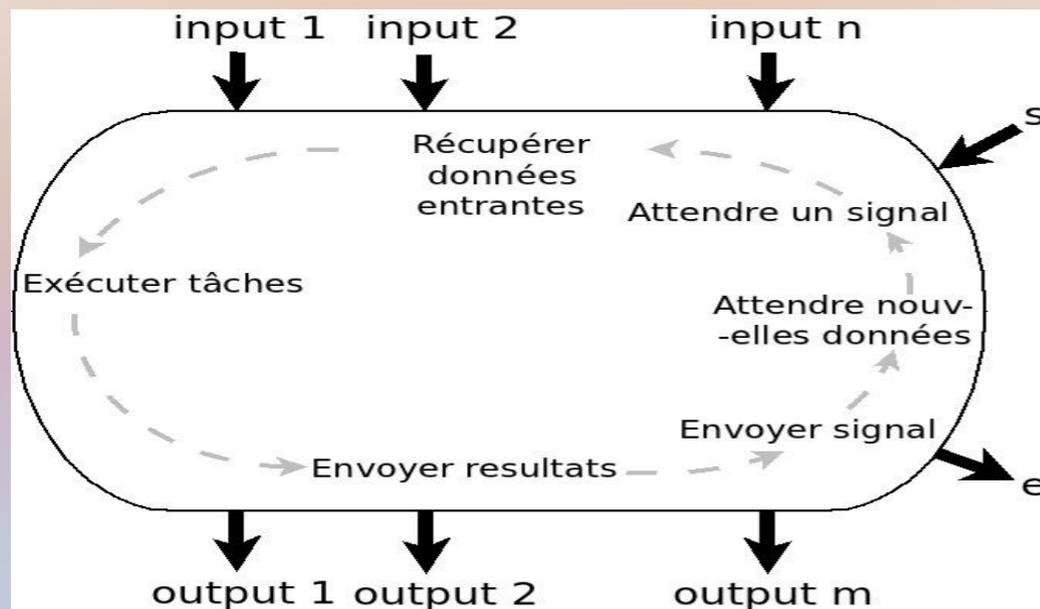


Un modèle de composants pour la visualisation scientifique interactive

- Offrir un modèle de composants et de composition pour gérer
 - La construction *automatique* d'une application performante (frame rate, it/s)
 - La cohérence des données manipulées
 - La cohérence stricte (égalité des numéros des itérations)
 - Une cohérence souple (un delta entre les numéros des itérations)

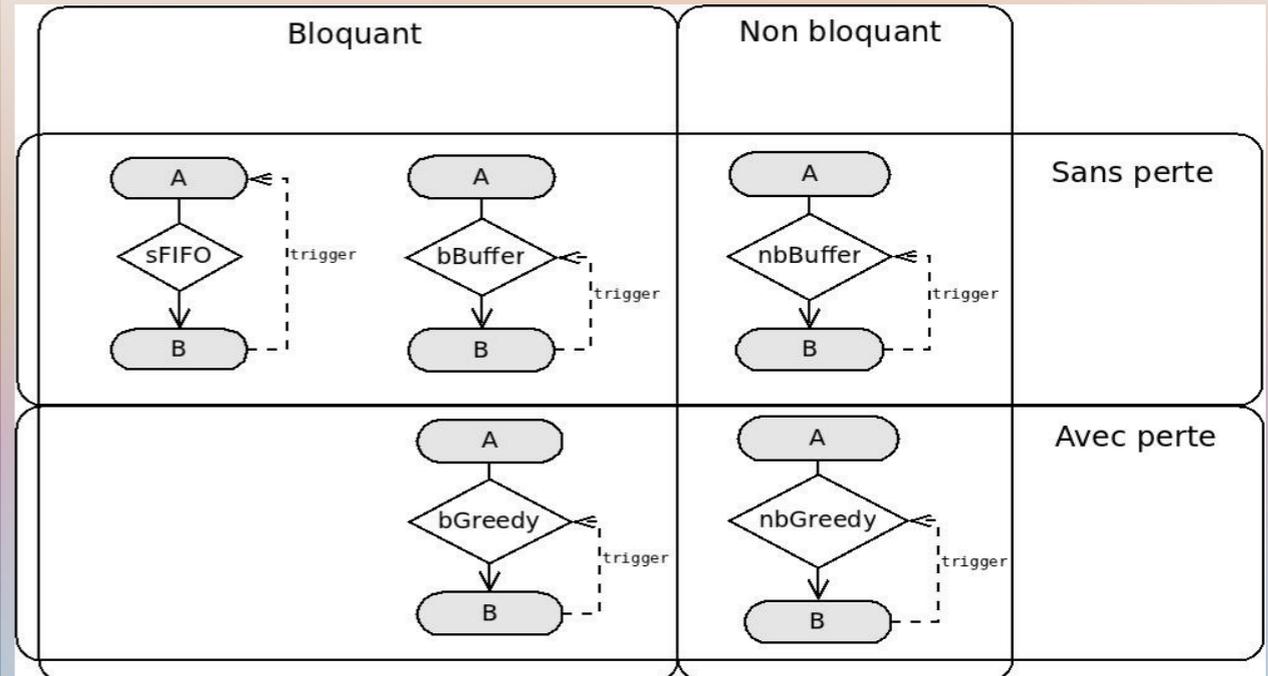
Modèle de composants (1/2)

- Un composant



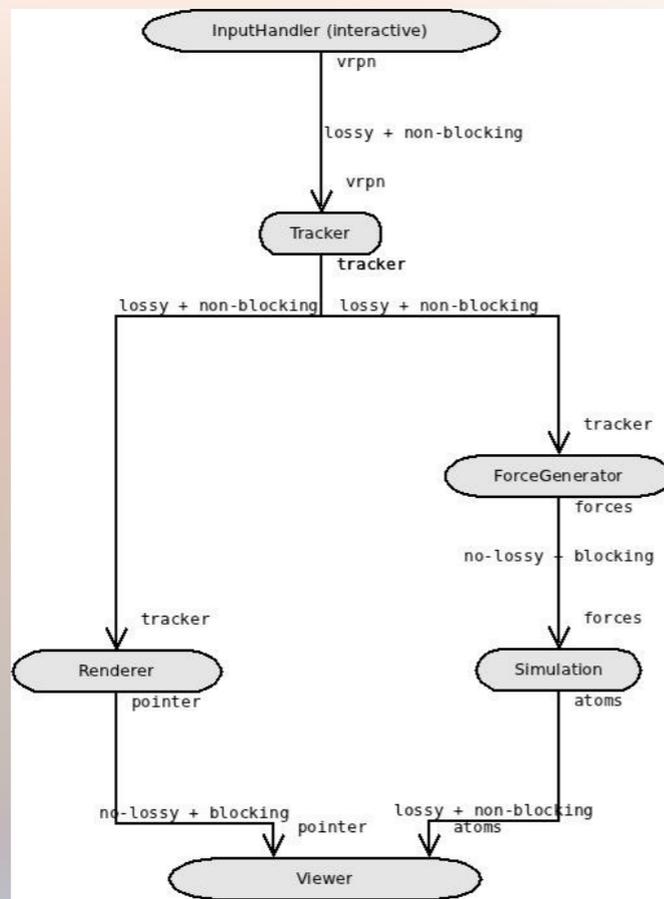
Modèle de composants (2/2)

- Des connecteurs



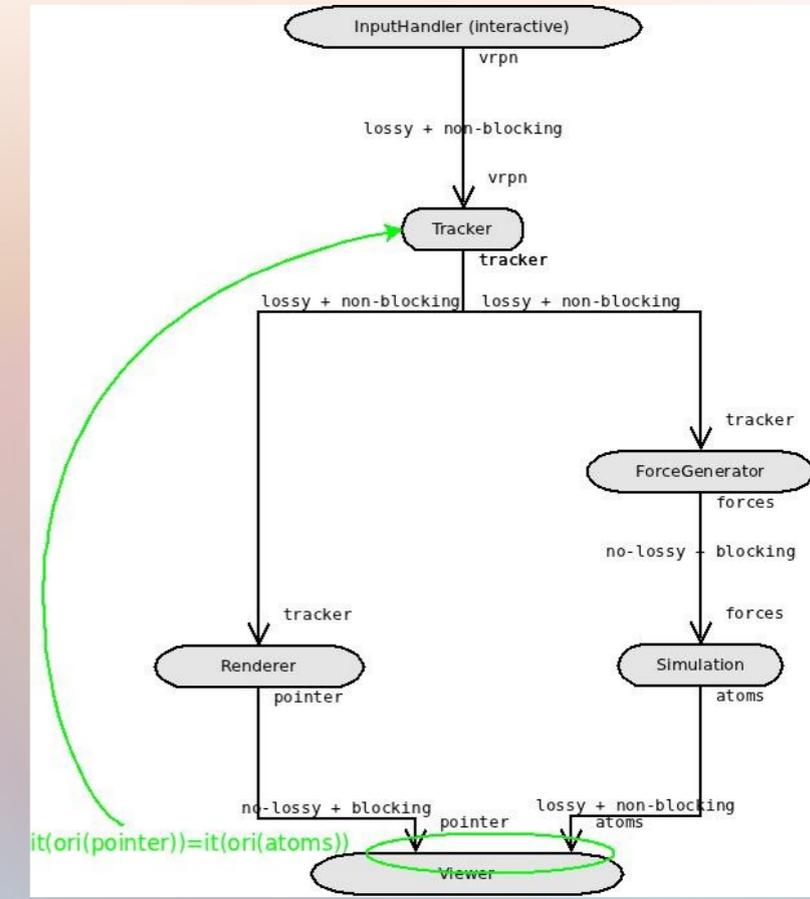
Modèle de composition (1/3)

- Un graphe de spécification



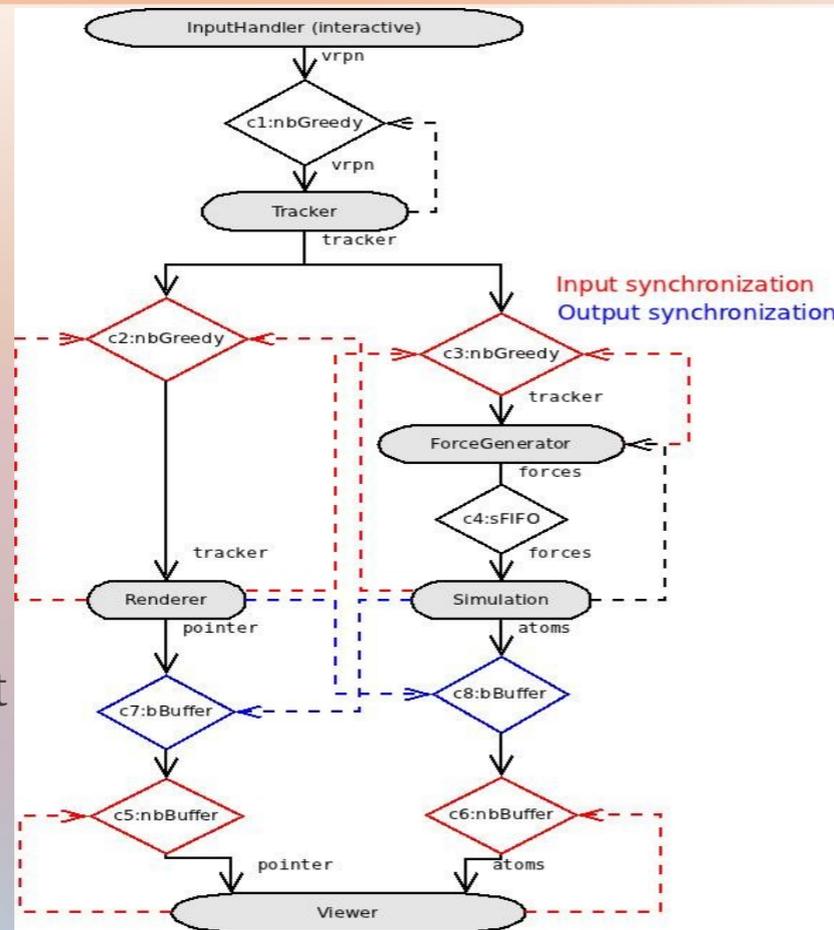
Modèle de composition (2/3)

- Des contraintes de cohérence



Modèle de composition (3/3)

- Un graphe d'application construit automatiquement

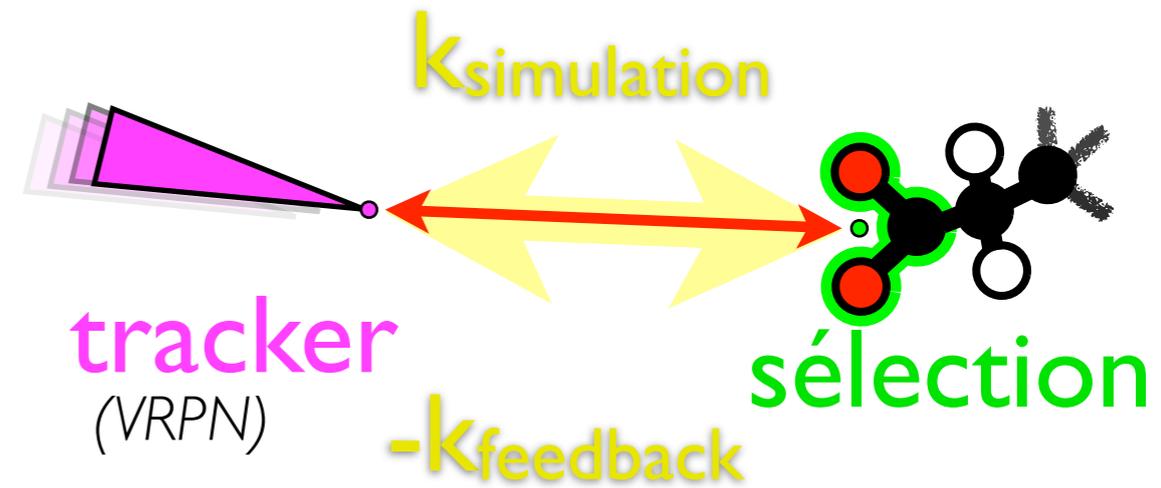
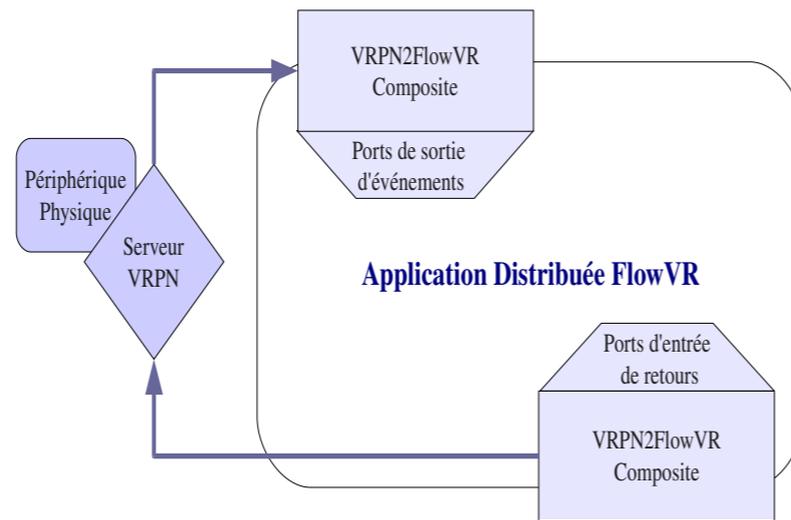


- FlowVR-VRPN et FVModuleAPI disponibles dans les releases de flowvr-suite
- Un modèle de composants spécialement dédié aux applications visées par FvNano
 - ✓ Implémenté avec l'intergiciel FlowVR
- Démonstrateurs fvtrajviewer et fvnano
 - ✓ Gestion des interactions (Réseau FlowVR, Interfaces graphiques, menu OpenGL, Gestion des périphériques)
 - ✓ Shaders en OpenGL

Composants pour l'Interaction

Basée sur VRPN

- FlowVR-VRPN

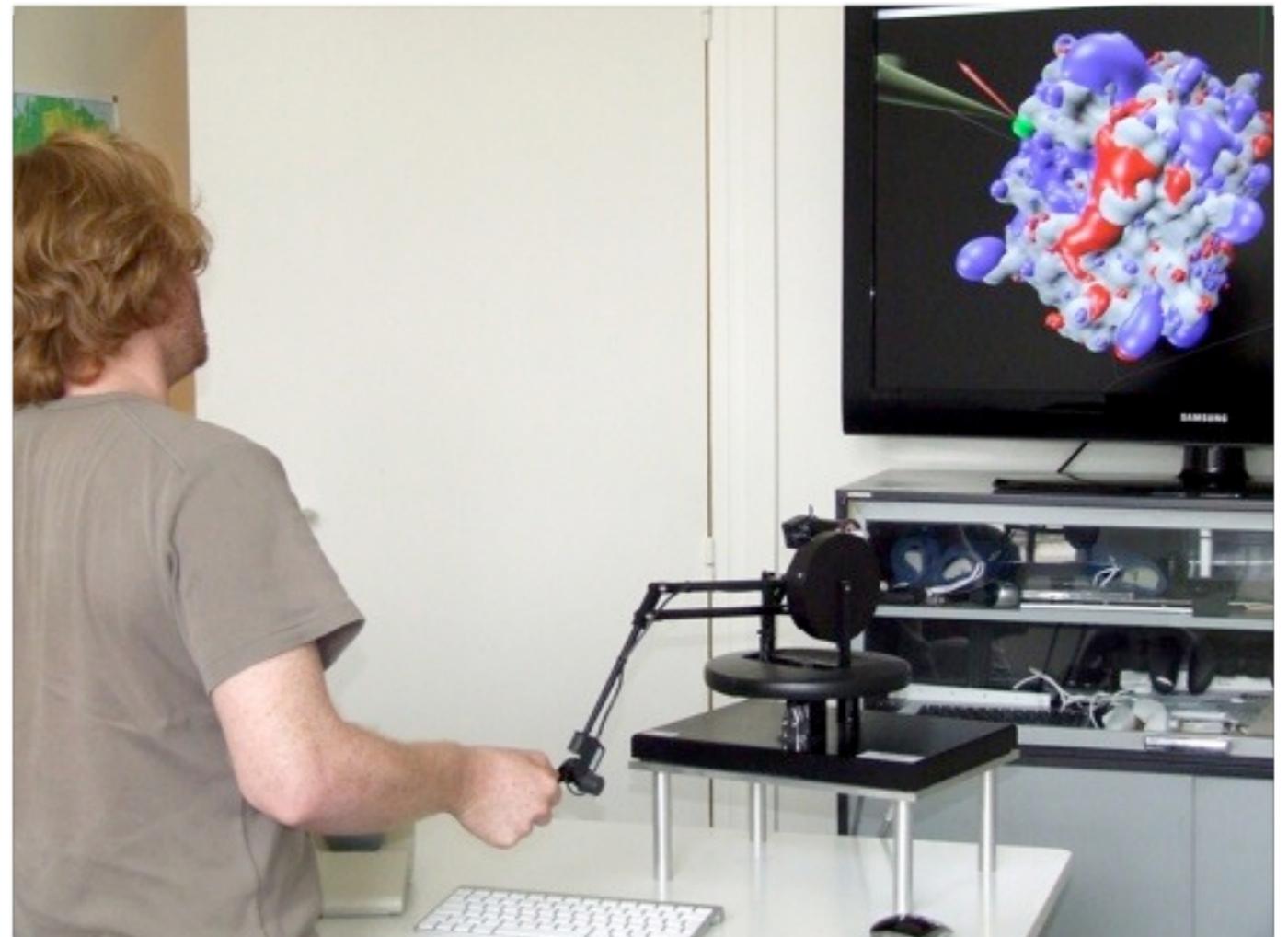


Fonctionnalités

- Exploration de données
- Rendu haptique
- Injection de forces
- Navigation

Périphériques

- Joypad
- Bras haptique
- Wiimote
- SpaceBall
- SpaceNavigator





- CEA Bruyères

- LBT/CNRS Paris

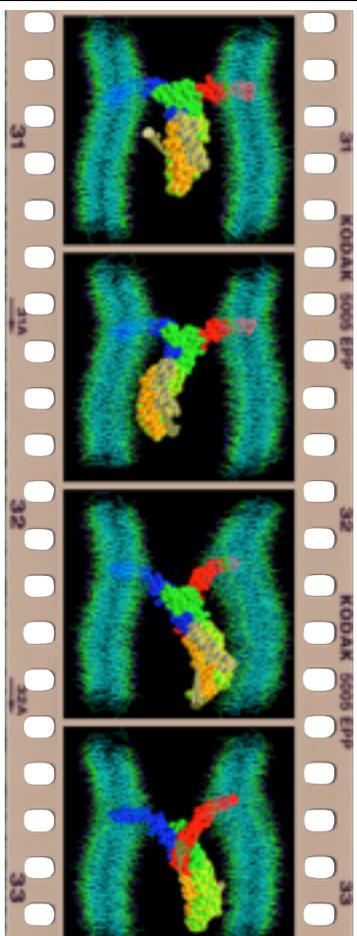
- MOAIS/Inria Grenoble

- LIFO Orléans

Applications

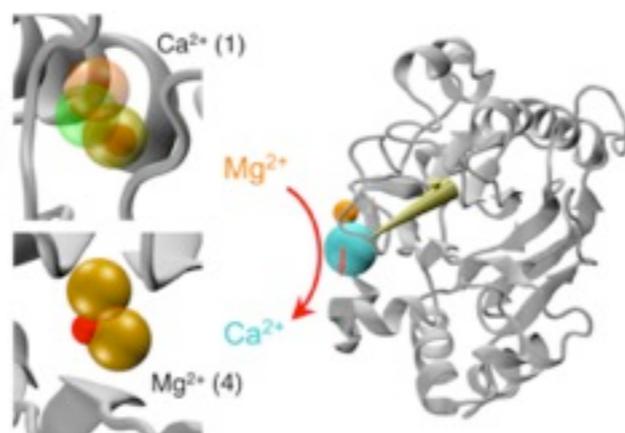
- Visualisation
 - *HyperBalls*
- Simulations interactives
 - *Systèmes biologiques*
- Exploration
 - *Trajectoires de DM*
 - *Jeux de données matériaux*

**Guider, sonder,
déformer,..**



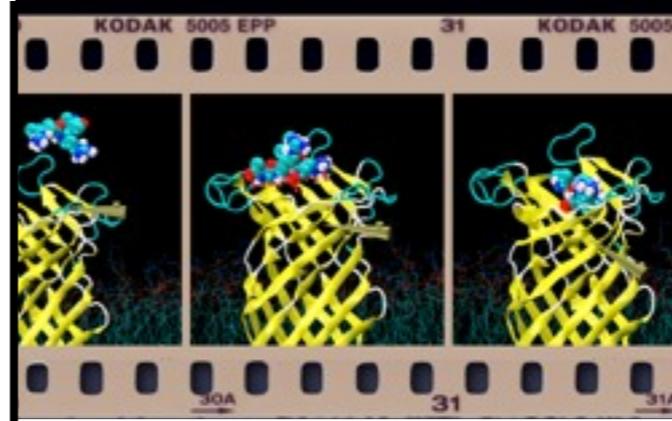
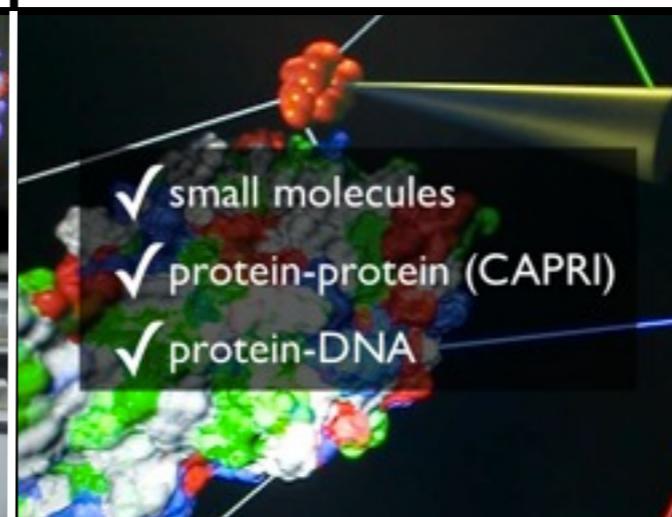
J Comput Chem 2009

Logiciel *BioSpring* (OpenMP, OpenCL..)
Fixation d'ions



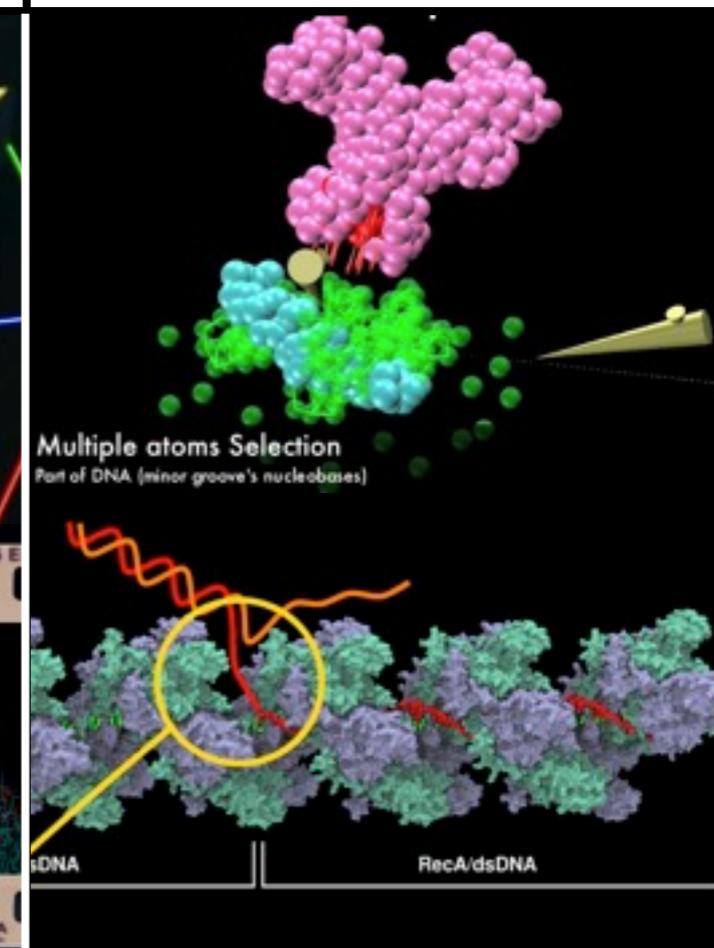
PSB 2010

Docking interactif



CAPRI 2009

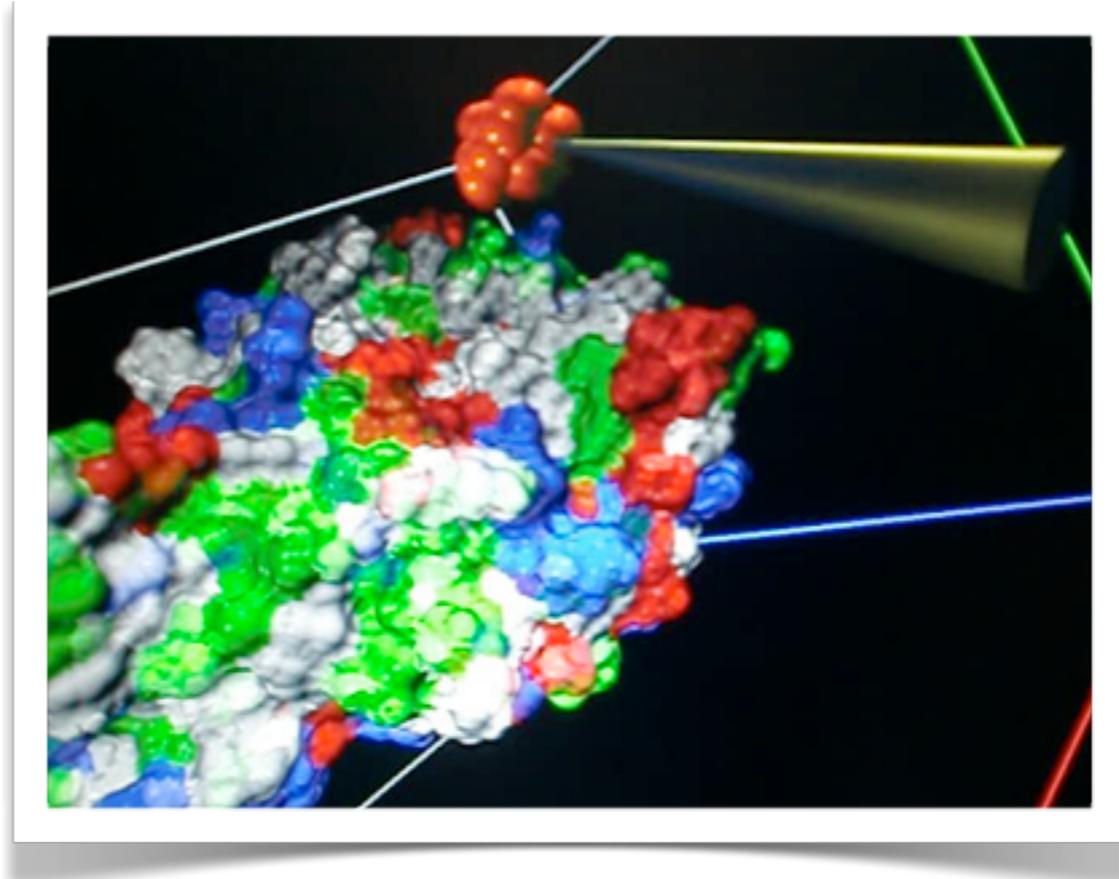
(Re)Construction



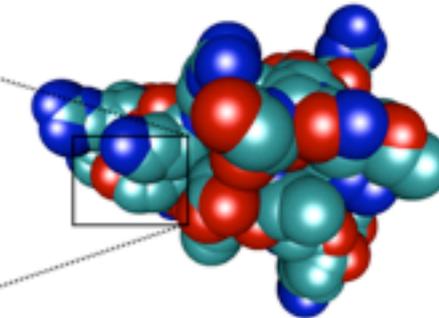
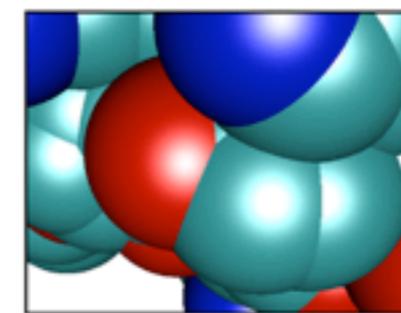
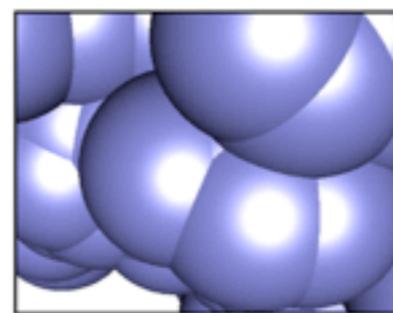
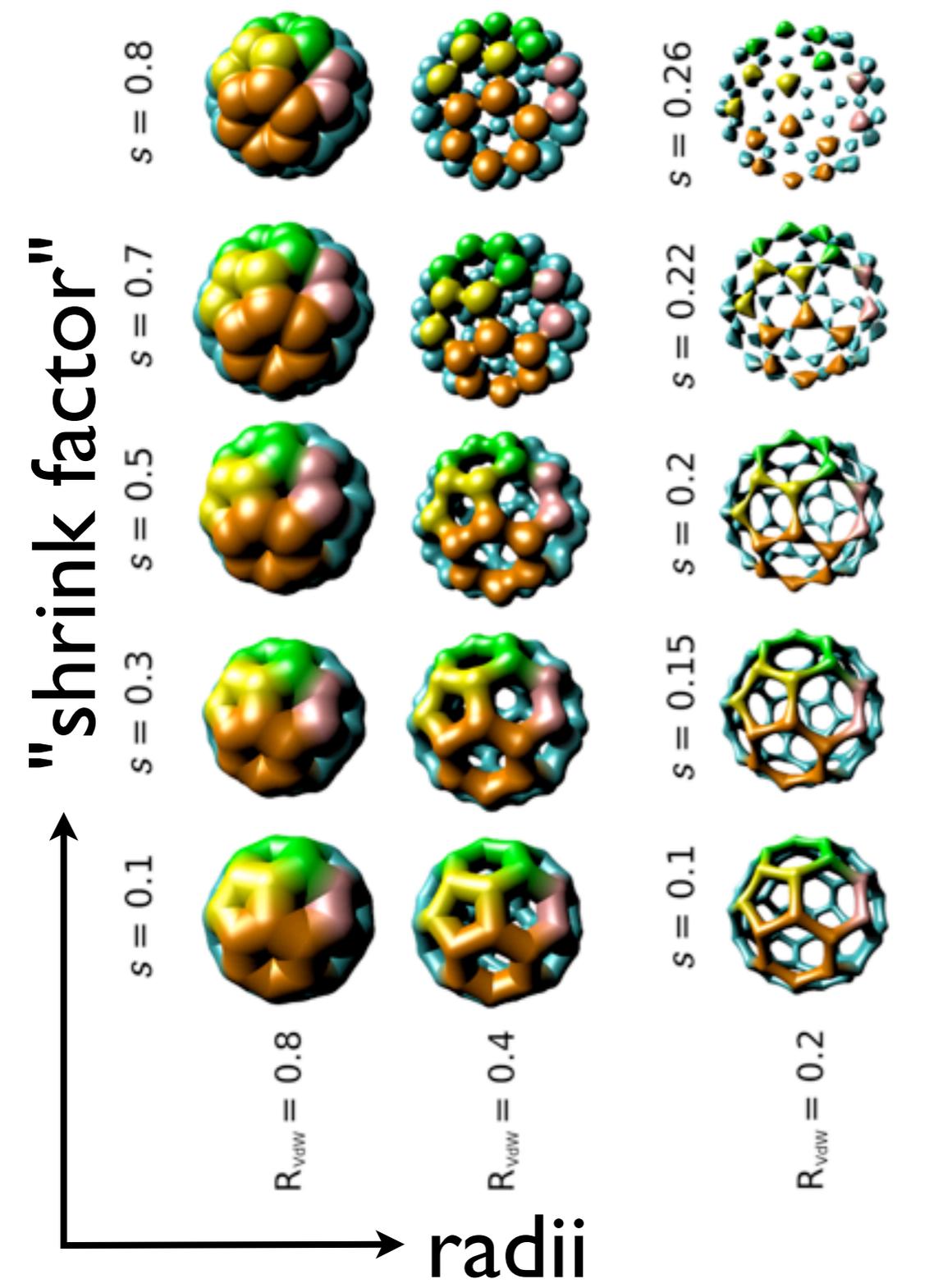
NAR 2010

What are Interactive Simulations good for?

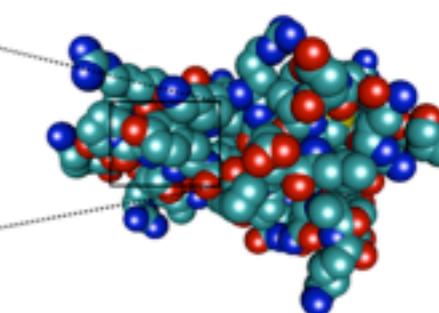
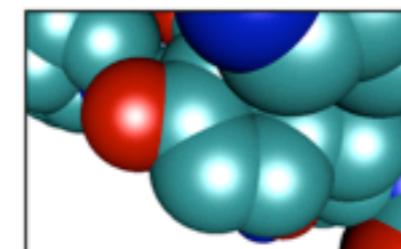
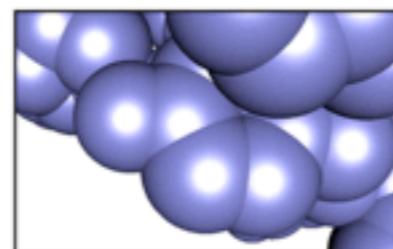
- hypotheses generation
structural and mechanic aspects
- explore rare events
large conformational changes
- construction of molecular systems
- dissemination & communication
- an **additional** tool able to use **human expertise**
- some simulations are **fast**.. just try them **before** wasting lots of computational power



Visualisation: *HyperBalls*



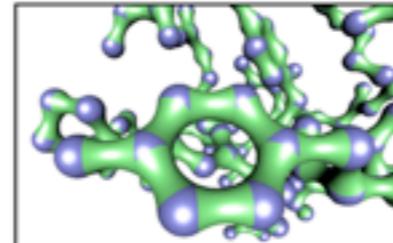
Space-Filling



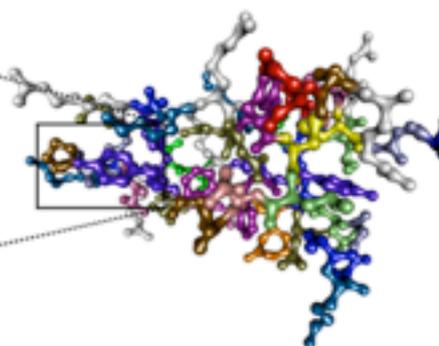
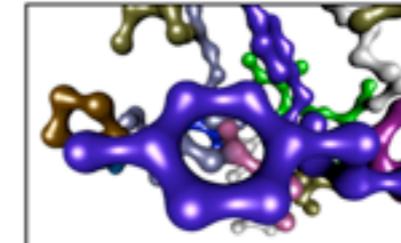
HyperBalls



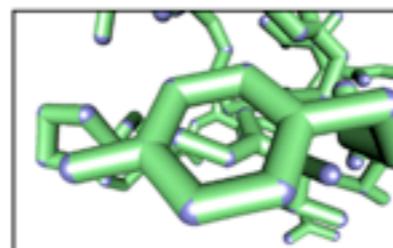
Tout-en-un



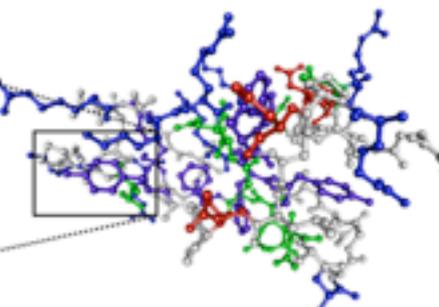
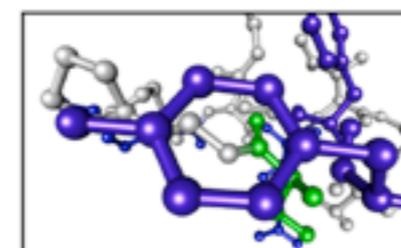
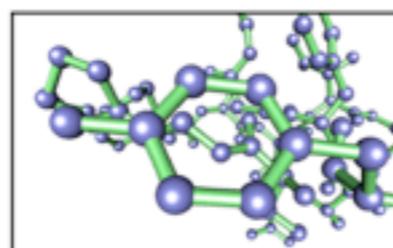
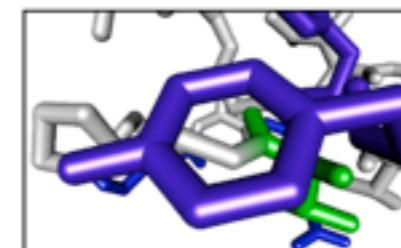
hyperboloids

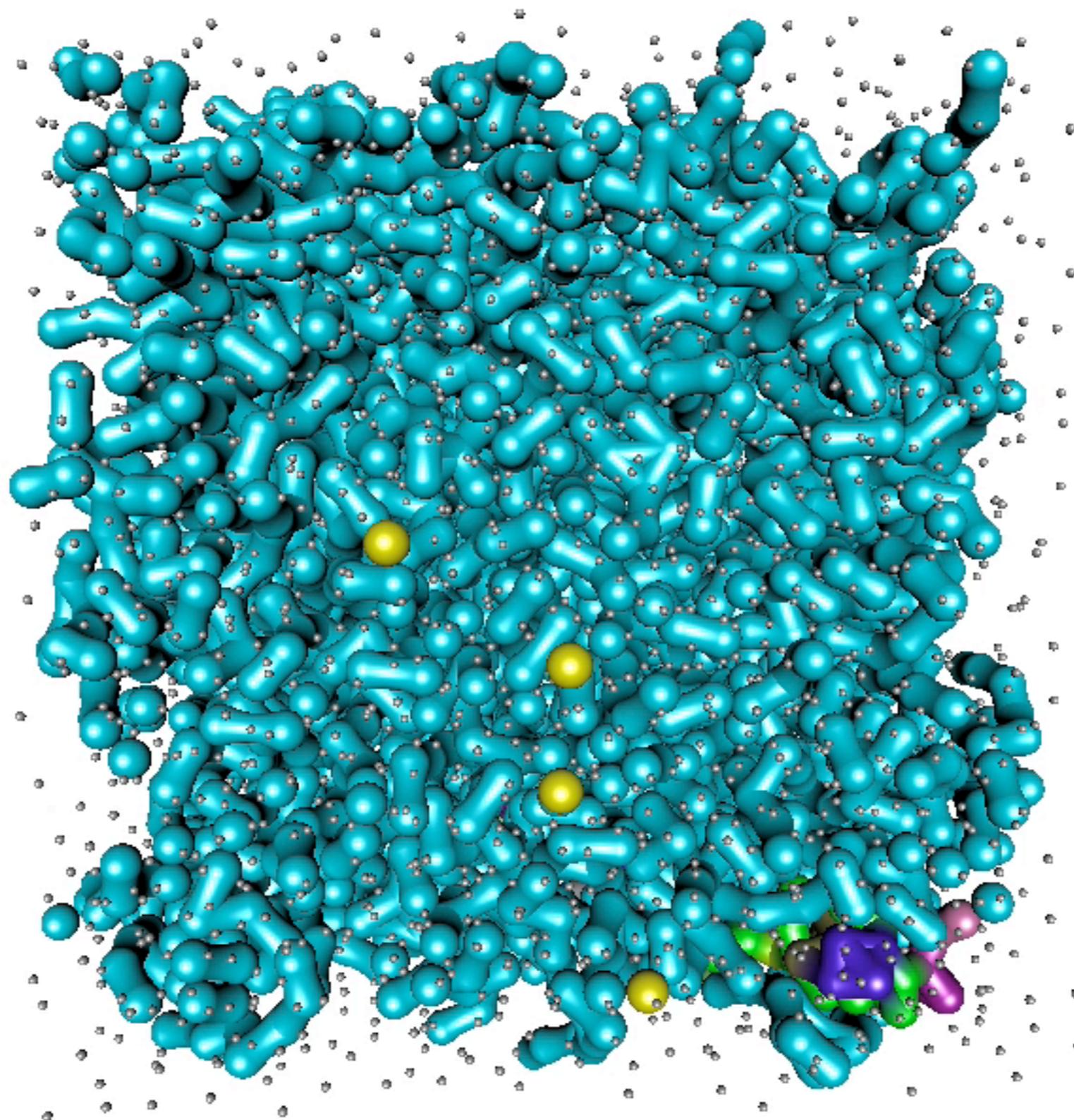


Licorice



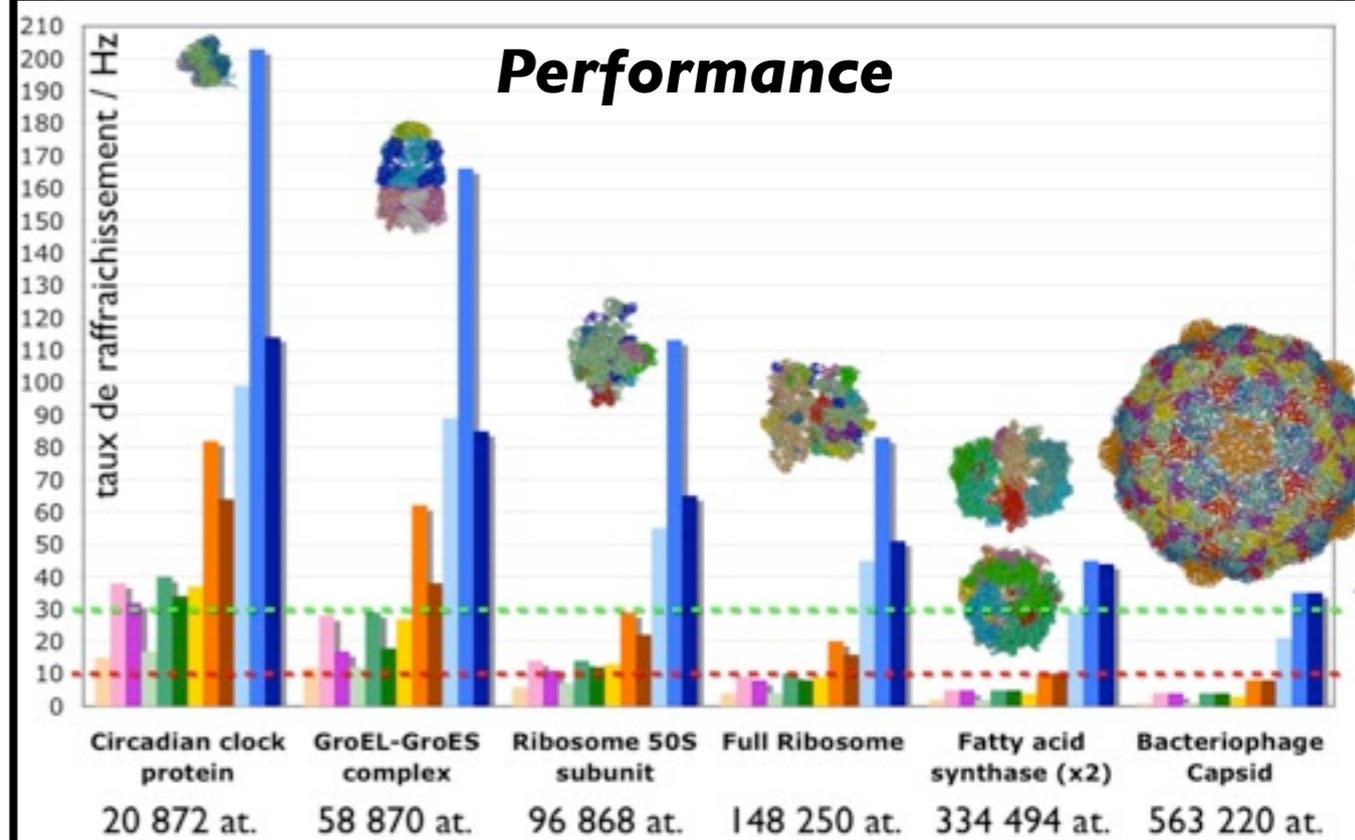
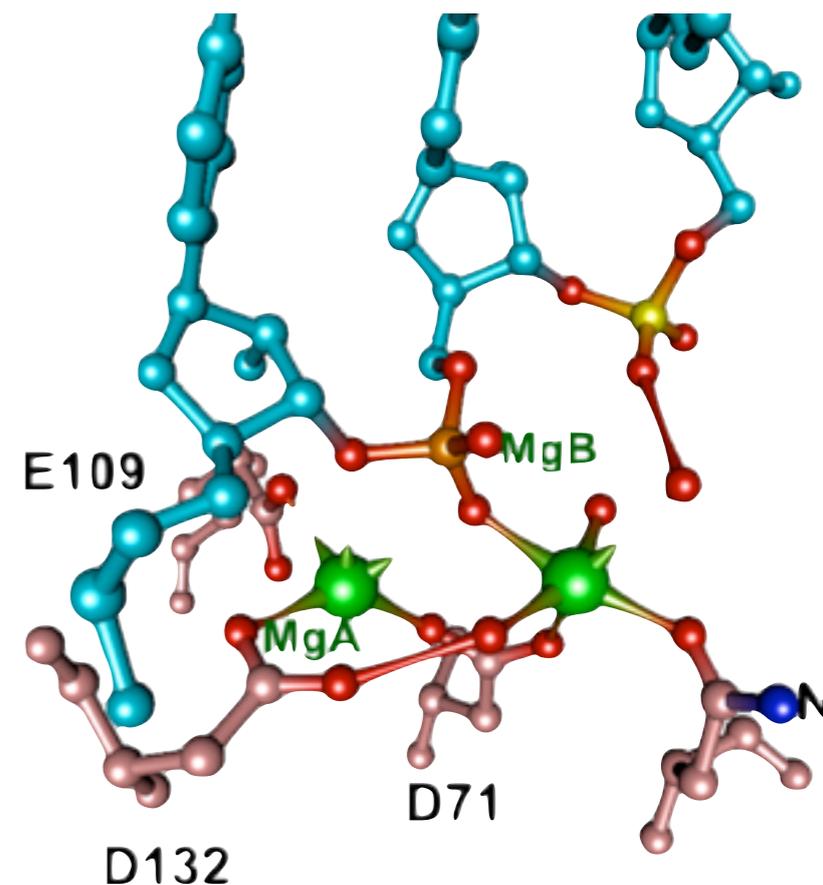
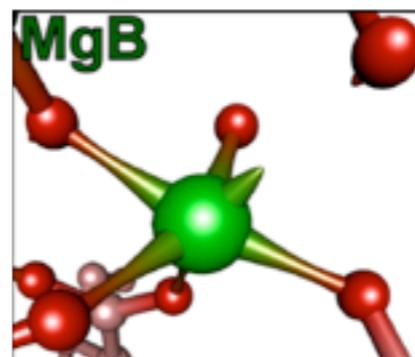
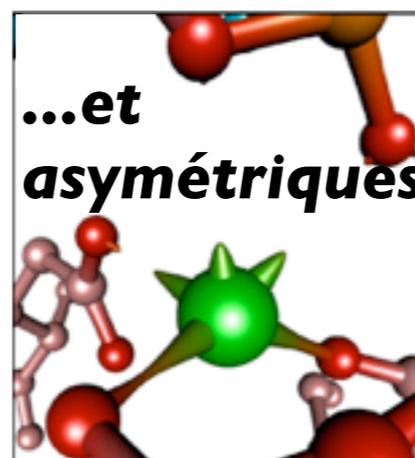
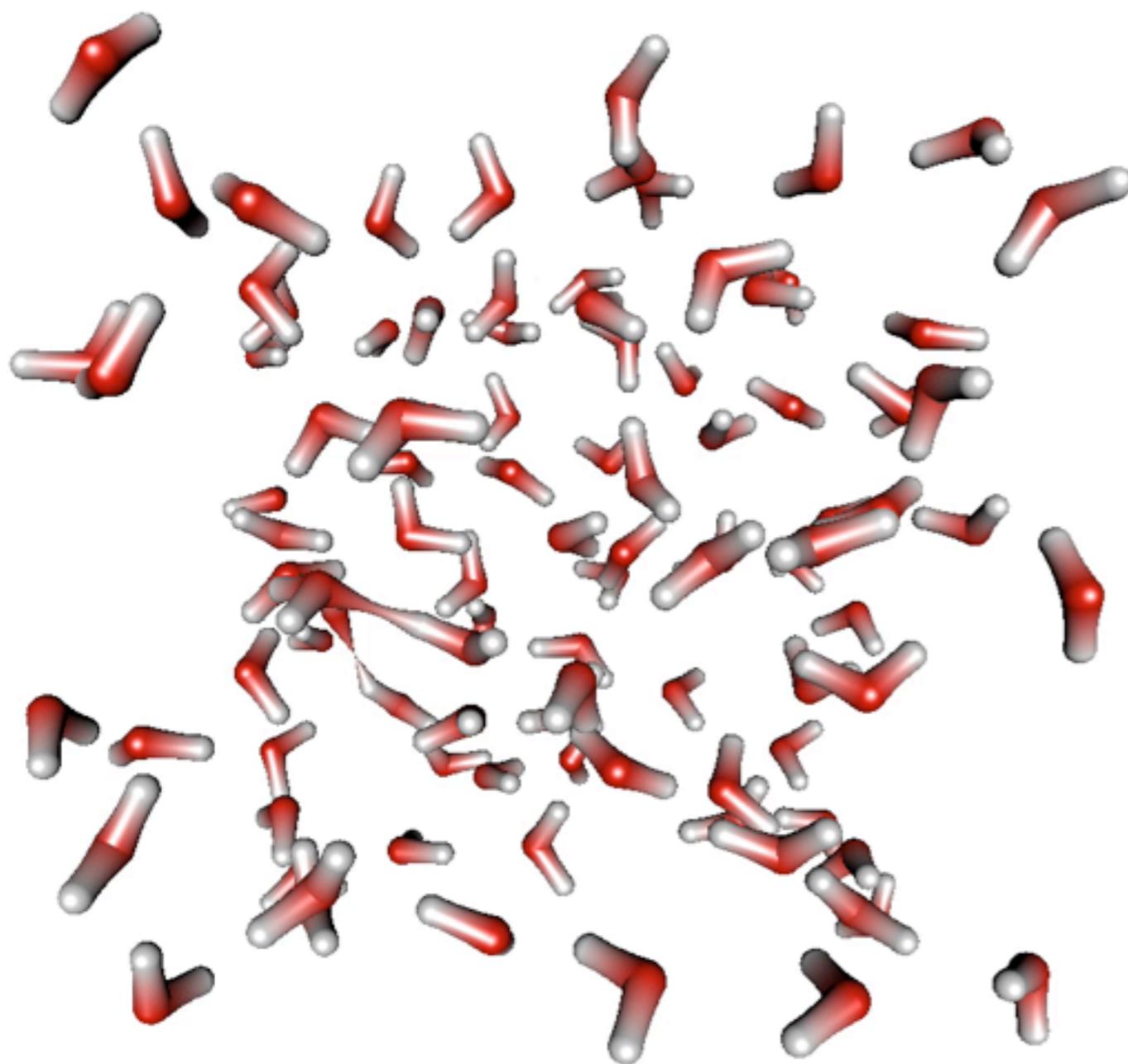
Ball & Stick



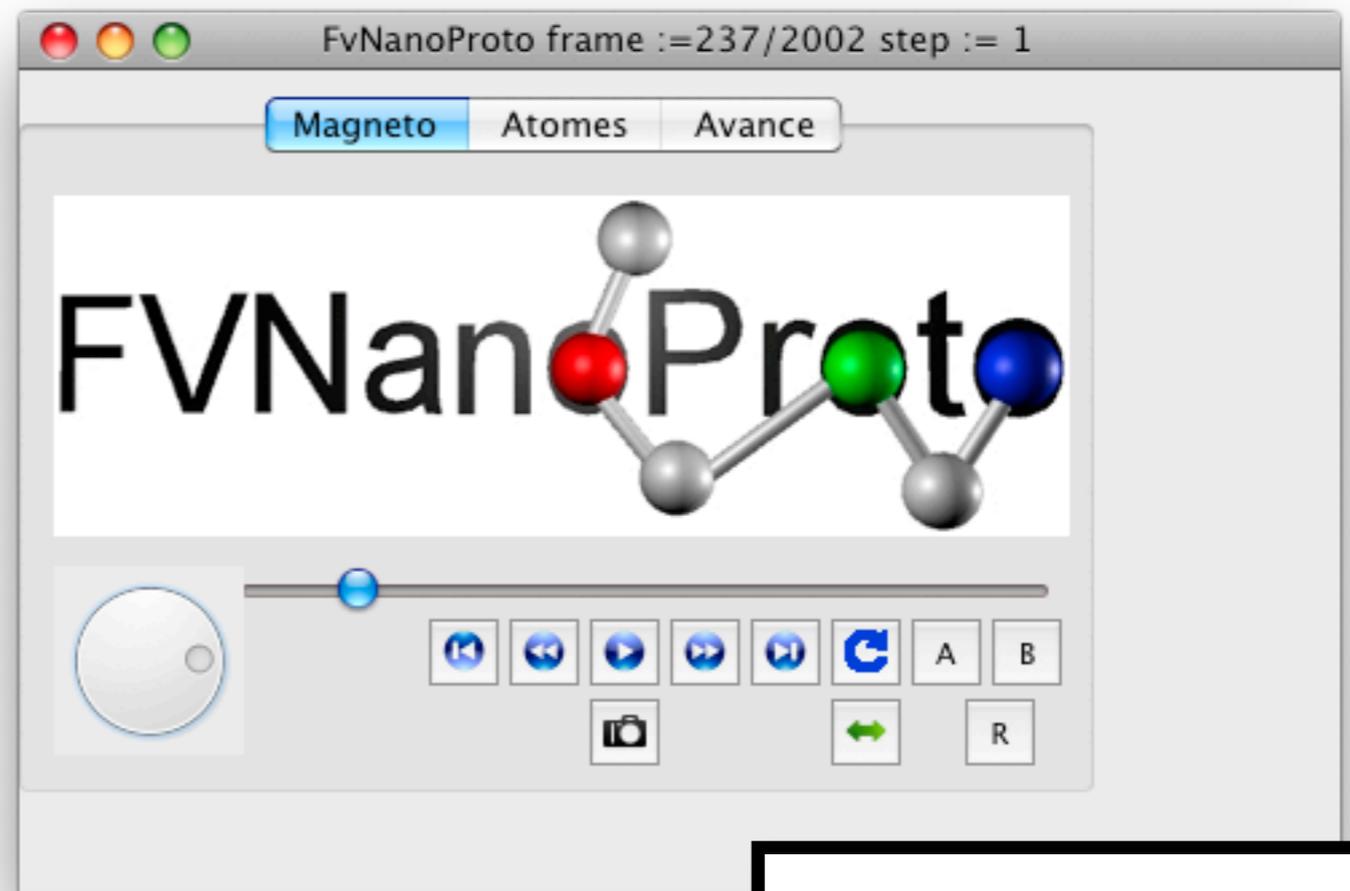


Atouts

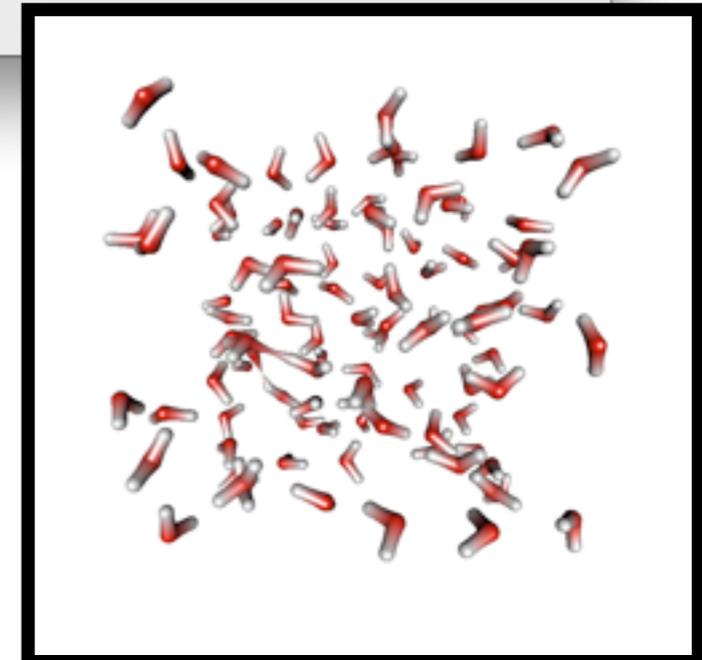
Liaisons dynamiques ...



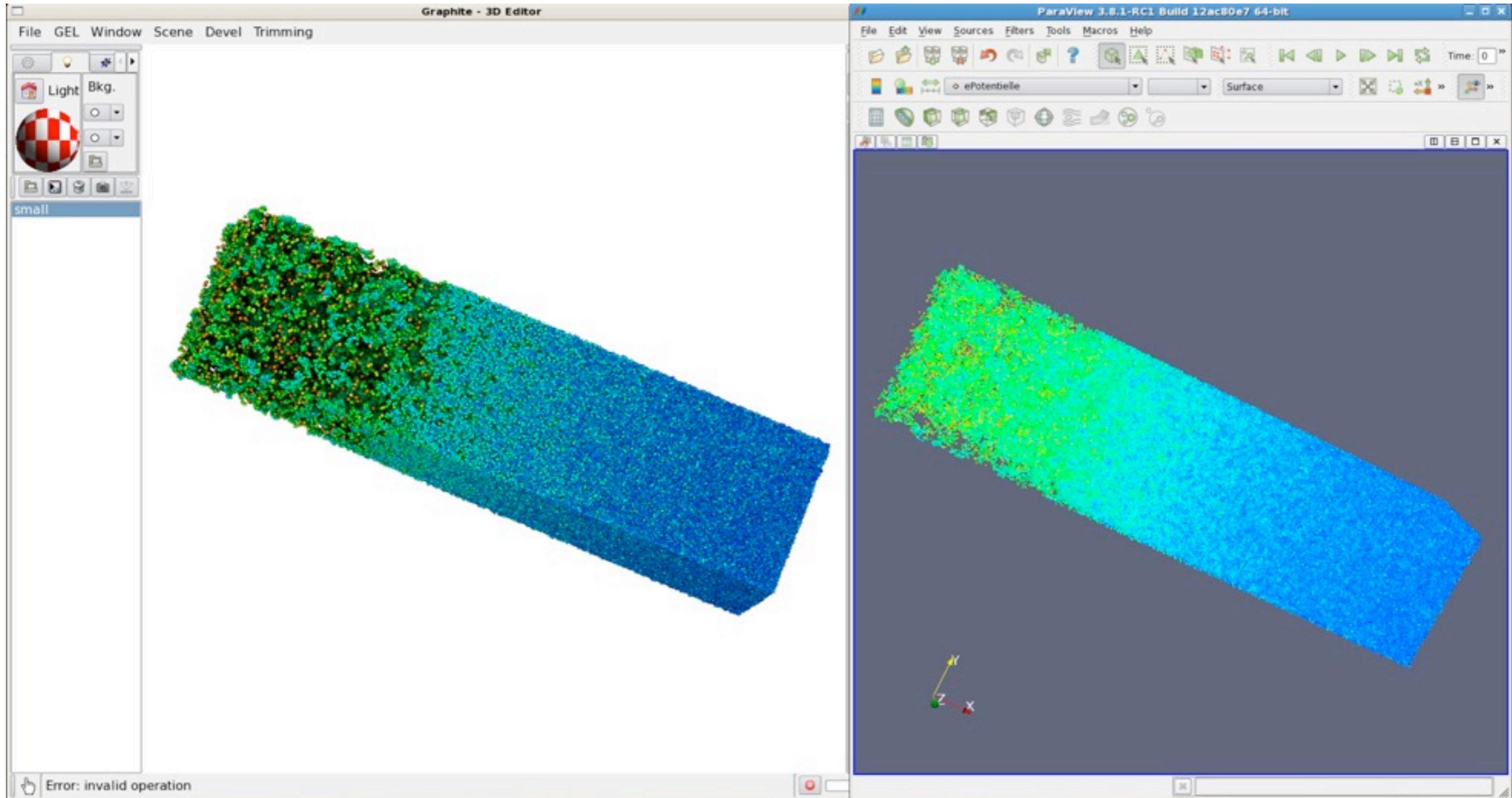
Trajectory Viewer



- navigate within trajectory data
- control synchronization and speed
- provide continuous data stream
- add visual analytics options
 - dynamic change of color/representation



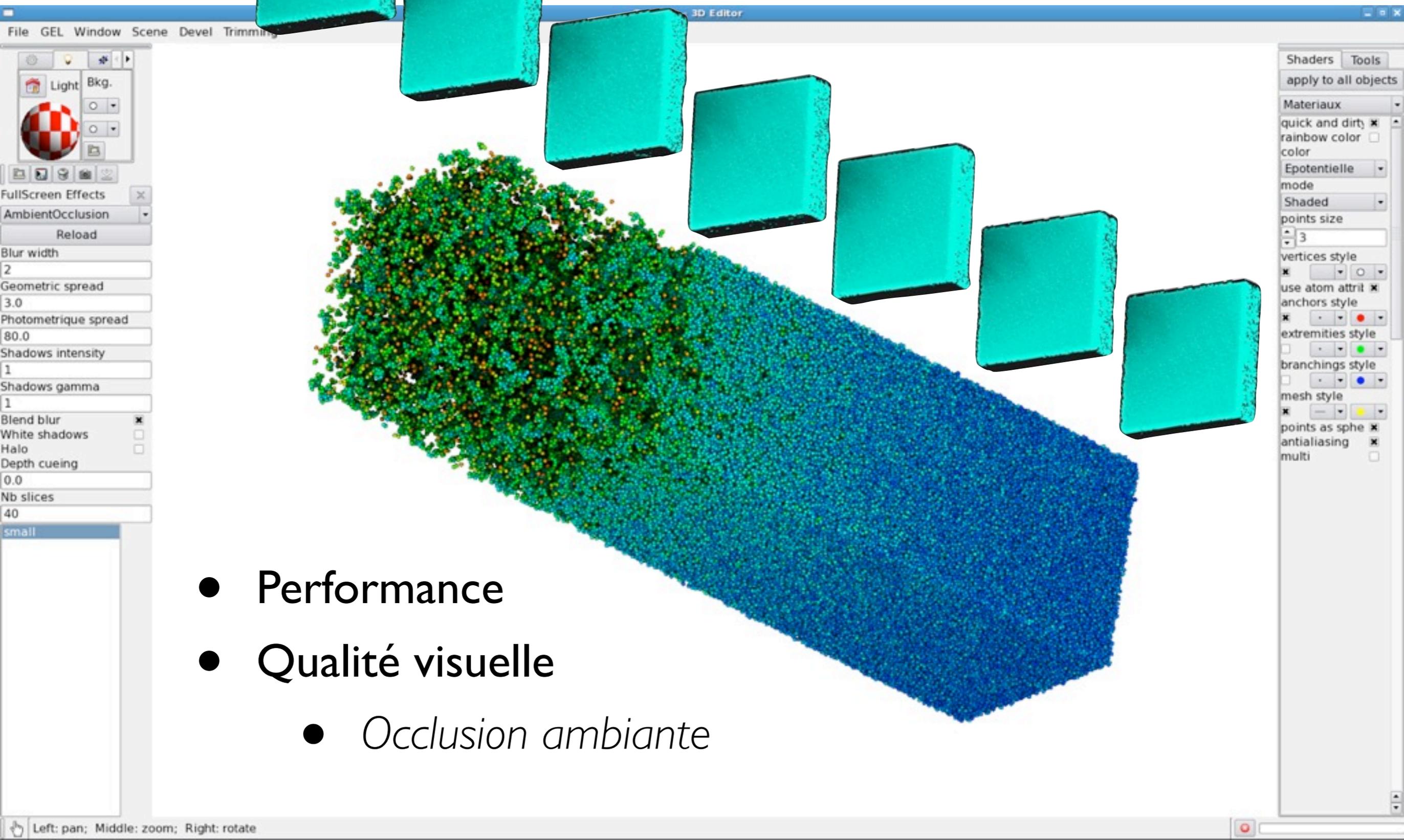
Interface métier matériaux



Plugin Graphite (*nouveau*)

Paraview (*ancien*)

Surface métier matériaux



- Performance
- Qualité visuelle
 - *Occlusion ambiante*

Réalisations

- Un prototype du laboratoire virtuel
 - Une dizaine de modules hétérogènes (dont **Gromacs**)
 - Un réseau de communication et de synchronisation complexe
 - Cohérence temporelle, cohérence des données
- Rendus 100% sur carte graphique
 - shaders pour rendu Ball and Stick, VdW et Licorice
 - Utilisation de FlowVR-Render => multi-écran
- Nombreux tests
 - une dizaine de simulations
 - modèle allant jusqu'à 300000 atomes
 - divers architectures (Mac, PC, grappe de PC, machine multi-cœur)
 - Diverses modalités d'interaction testées
- Expérimentations avancées
 - Tests sur architectures de grandes tailles (cluster 1000 cœurs)
 - mise en place de show-rooms
- Réalisation des applications grand défi
 - gros volumes de données, gros volumes de calculs
 - élargir le domaine des simulations (physique des matériaux...)
- Enrichir le modèle de composition FlowVR
 - Intégration plus aisée de composants
 - outils de vérification de cohérence de la composition
- Extension et optimisation des composants
 - simulation
 - rendu graphique
 - interaction

Publications

- Jean-Denis Lesage and Bruno Raffin. *A Hierarchical Component Model for Large Parallel Interactive Applications*. Journal of SuperComputed. 2008.
- Jean-Denis Lesage and Bruno Raffin. *High Performance Interactive Computing with FlowVR*. IEEE VR 2008 SEARIS workshop 2008, pages 3-16, Reno, USA.
- N. Férey, O. Delalande, G. Grasseau and M. Baaden. *A VR framework for interacting with molecular simulations*. 2008, in Proceedings of the 2008 ACM symposium on Virtual reality software and technology, edited by E. Kruiff, pp. 91-94, ACM, Bordeaux, France.
- N. Férey, O. Delalande, G. Grasseau and M. Baaden. *From Interactive to Immersive Molecular Dynamics*. 2008, in Proceedings of the International Workshop on Virtual Reality and Physical Simulation (VRIPHYS'08), edited by F. Faure and M. Teschner, pp. 89-96, Eurographics, Grenoble, France.
- O. Delalande, N. Férey, G. Grasseau and M. Baaden. *Complex Molecular Assemblies at hand via Interactive Simulations*. 2009, J. Comput. Chem., in press.
- O. Delalande, N. Férey, B. Laurent, M. Guérault, B. Hartmann and M. Baaden. *Multi-resolution and multi-physics approach for interactively locating functionally linked ion binding sites by steering small molecules into electrostatic potential maps using a haptic device*. Submitted to Pacific Symposium for Biocomputing 2010.
- Sébastien Limet and Sophie Robert. *FlowVR-VRPN: first experiments of a VRPN/FlowVR coupling*. In Proceedings of the ACM Symposium on Virtual Reality Software and Technology, VRST 2008, Steven Feiner and Daniel Thalmann and Pascal Guitton and Bernd Fröhlich and Ernst Kruijff and Martin Hachet ed., pp.251-252 (poster), 2008
- S. Limet, S. Robert et A. Turki, *FlowVR-SciViz : A Component-Based Framework for Interactive Scientific Visualization*, in Component-Based High Performance Computing (CBHPC09), Portland, OR, USA, ACM, November, 2009

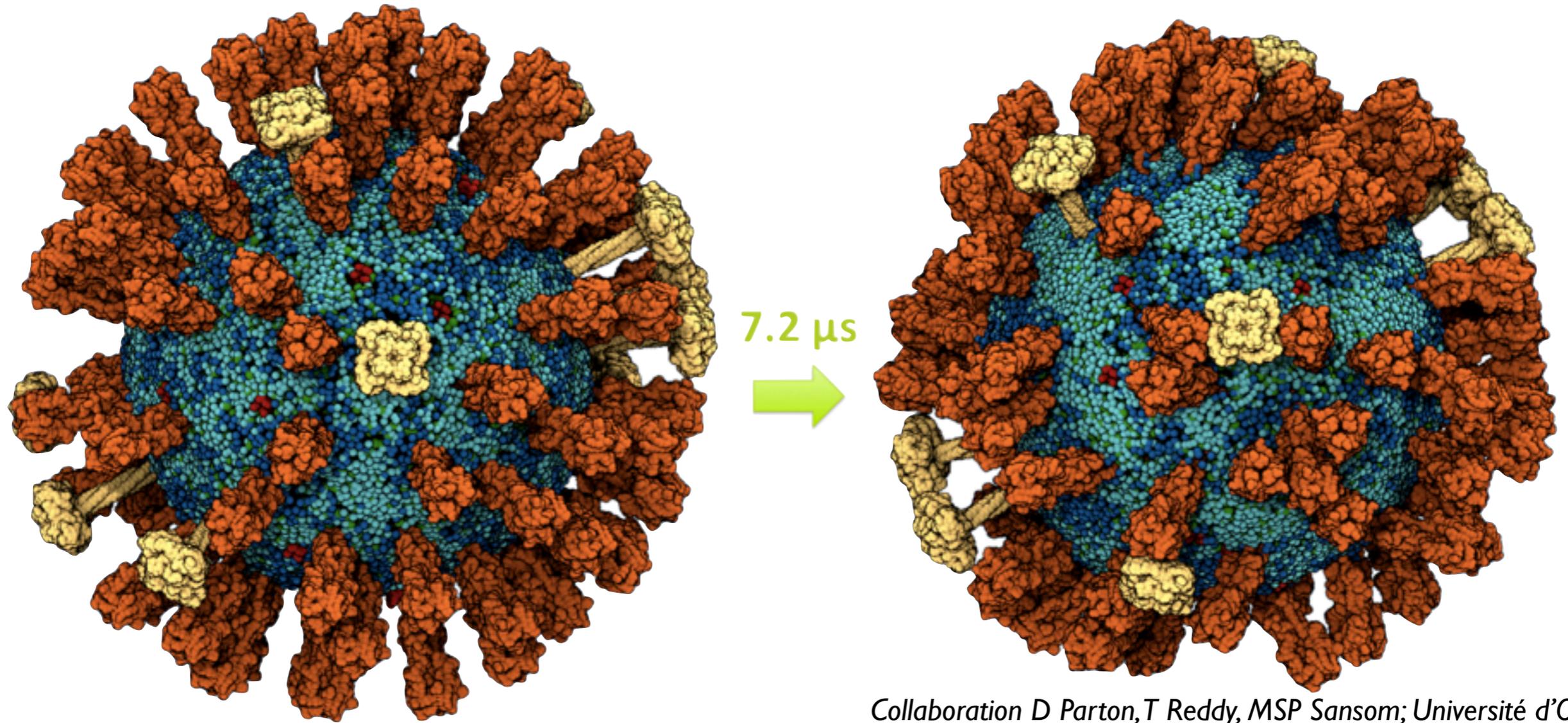
Site web

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

Conférences et workshops

- Groupe de Graphisme et Modélisation Moléculaire 2011 (120 participants)
- Workshop International à l'Institut Pasteur en Uruguay
- Préparation d'une "Faraday Discussion"

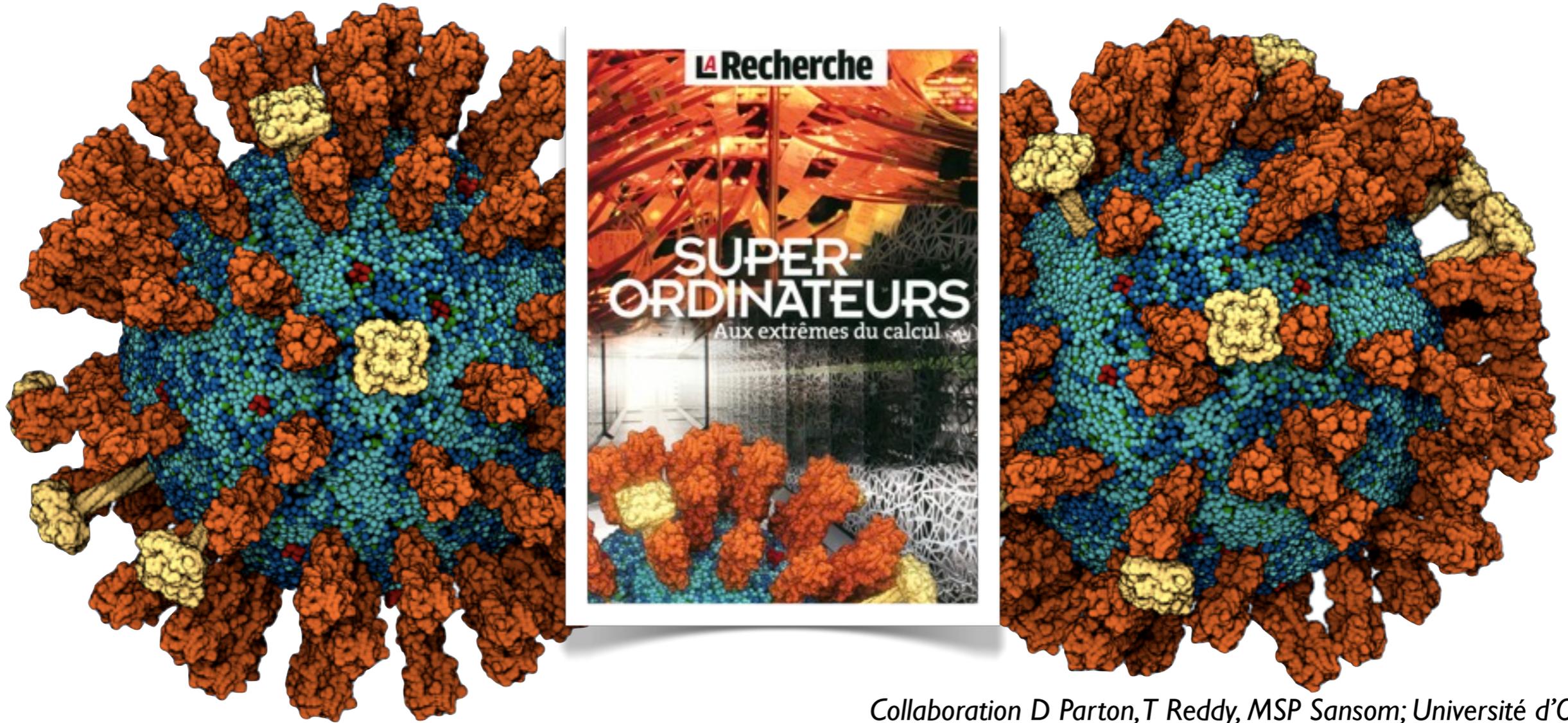
Quelques défis pour demain



Collaboration D Parton, T Reddy, MSP Sansom; Université d'Oxford

- **besoins** en
 - stockage et partage
 - traitement de grandes quantités de données
 - visualisation et analyse

Quelques défis pour demain



Collaboration D Parton, T Reddy, MSP Sansom; Université d'Oxford

- **besoins en**
 - stockage et partage
 - traitement de grandes quantités de données
 - visualisation et analyse

Exa
viz

ANR MN 2011

Réseau FvNano

CEA Bruyères

JP Nominé
M Chavent

LIFO, Orléans

S Robert
A Turki
S Limet
E Melin

MOAIS Grenoble

A Vanel
B Raffin

INRIA, Nancy

B Lévy
D Ritchie

INTS, Paris

B Hartmann

LBT

C Prévost
S Sacquin-Mora
M Guérout

Univ. Oxford

MSP Sansom

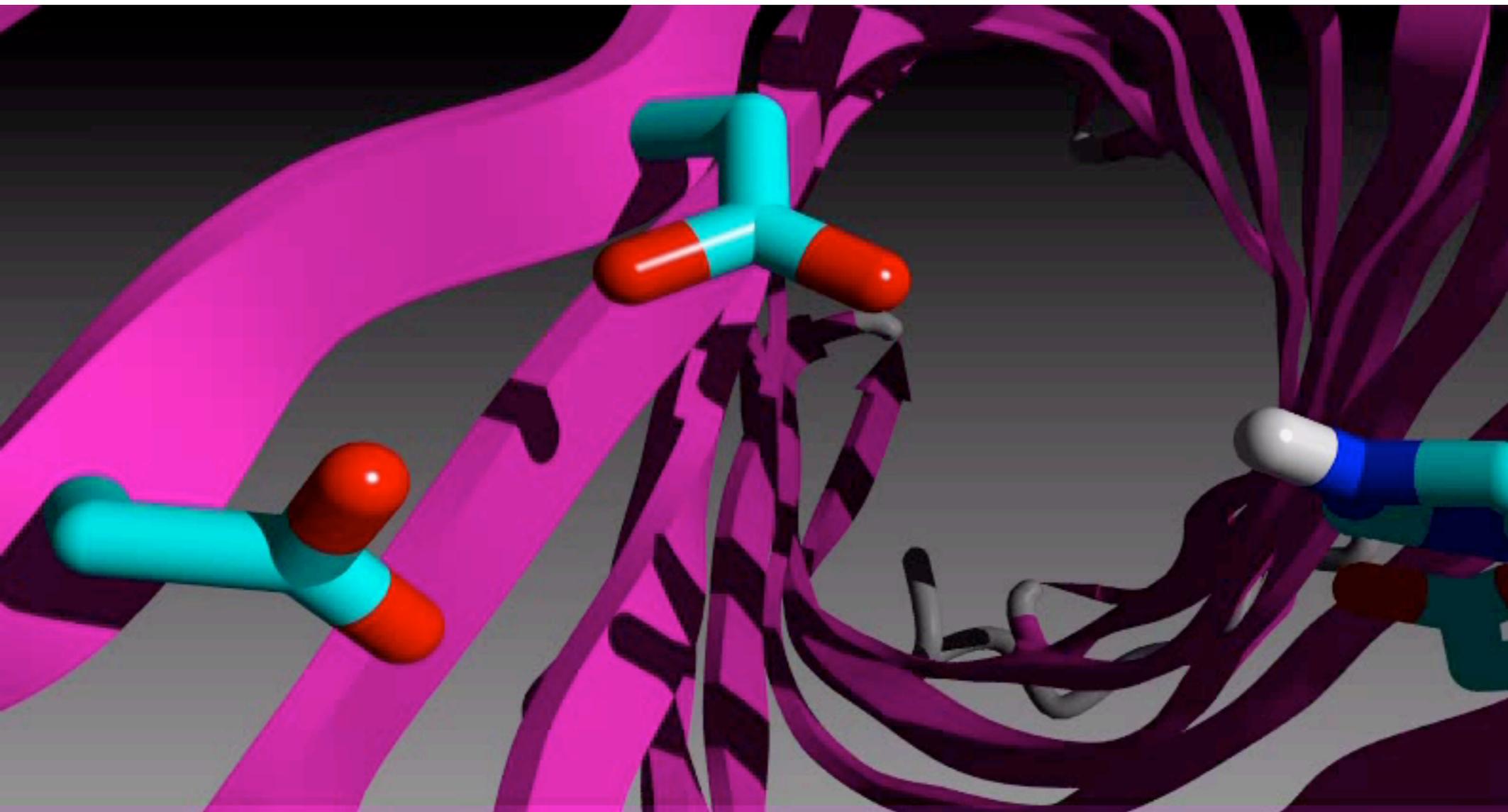
Univ. Stuttgart

T Ertl



Matthieu Chavent * Nicolas Férey * Olivier Delalande (ex-Postdoctoral fellows)

Marc Piuzzi (post-doc) * Alex Tek * Benoist Laurent * Zhihan Lu (PhD students)



Merci !