

Visualisation moléculaire 3D stéréoscopique

Rencontre AuDACES

Emmanuel Delage

01/06/2017

CC-BY



PLAN

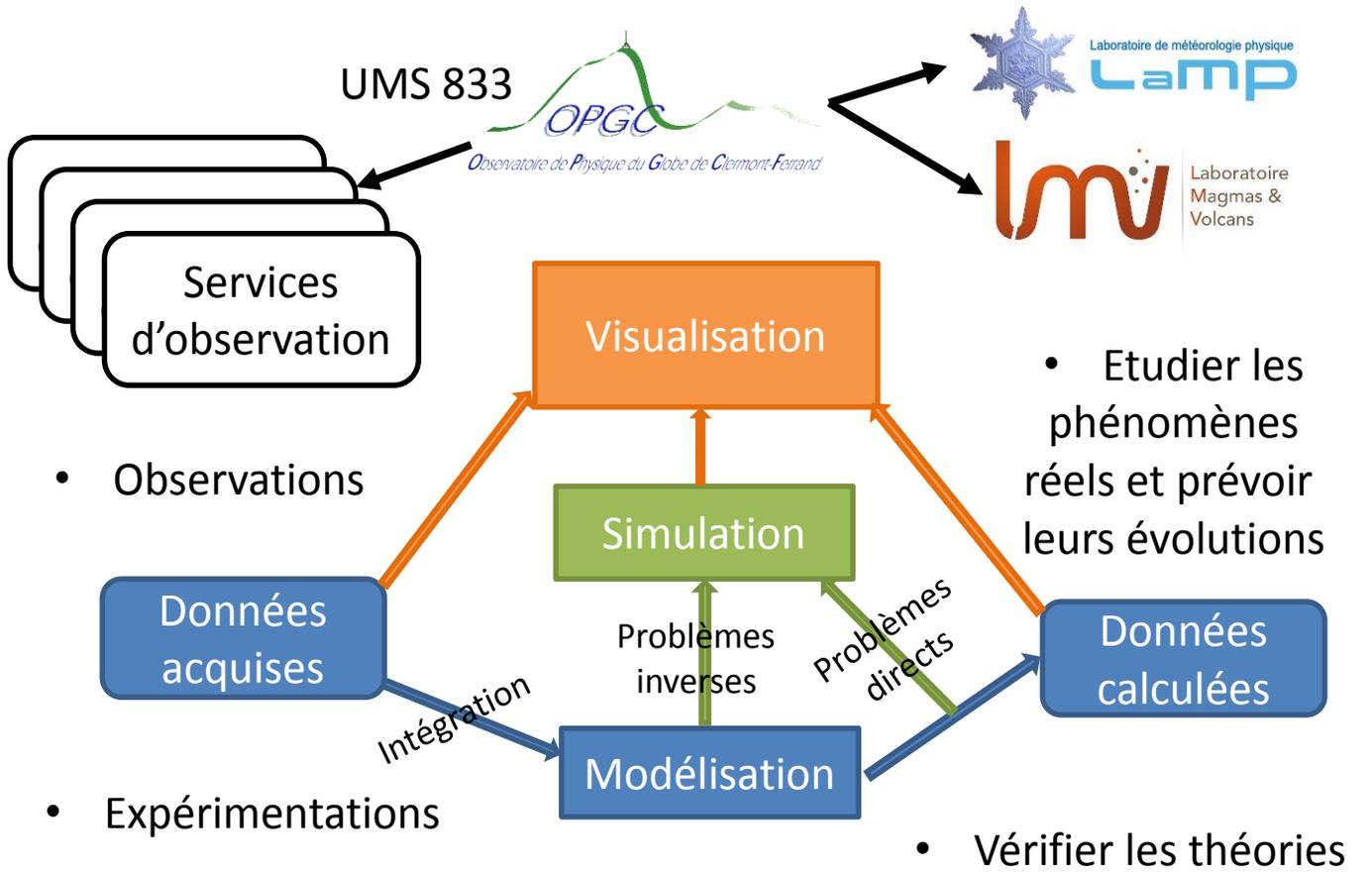
OPGC => Calcul : modélisation, simulation, visualisation
=> Visu simulation d'écoulement de lave
=> Visu simulation de formation de nuages

Visualisation scientifique => La recherche
=> Visualisation de données,
=> Visualisation moléculaire...

Visualisation 3D => Moteur 3D
=> Outils de visualisation
=> Visualisation 3D stéréoscopique

Illustration avec Sibmol3D => Qt, OpenGL
=> Lecture PDB
=> Interaction visu-information

Calcul à OPGC, focus sur la visualisation



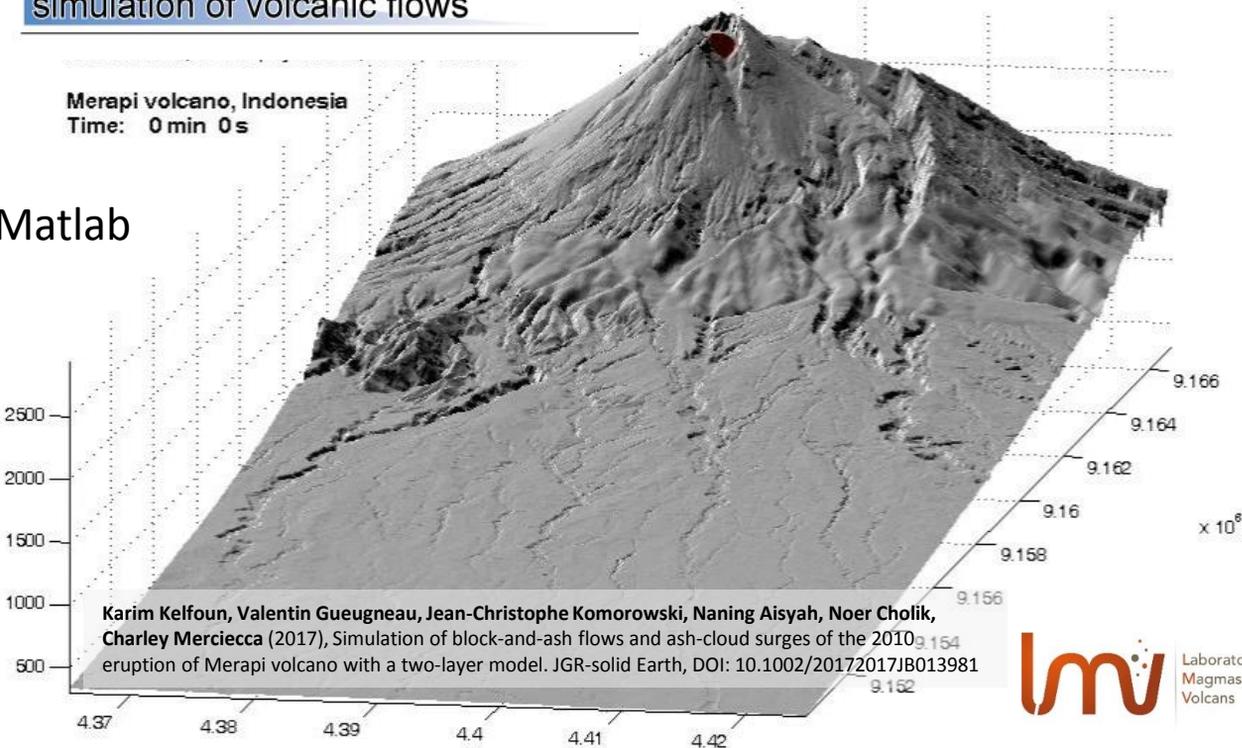
Visu de la simulation d'écoulement de lave

Karim Kelfoun (LMV/OPGC)



Merapi volcano, Indonesia
Time: 0 min 0 s

- Matlab



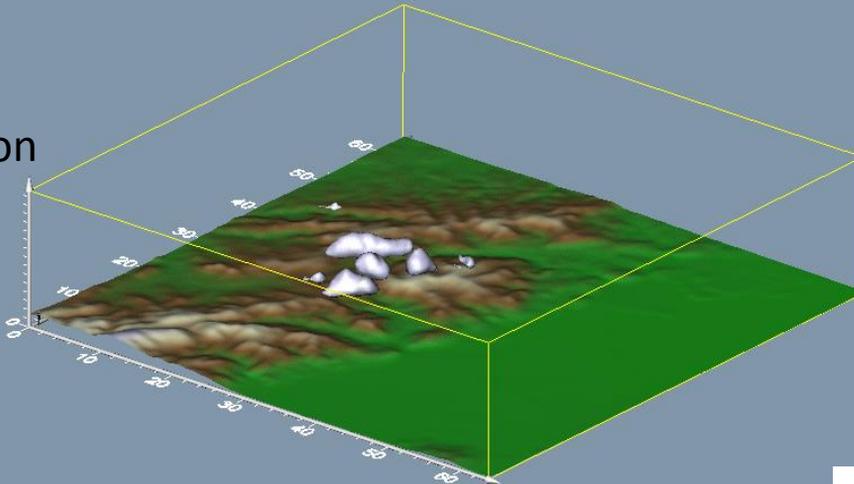
- Etude du portage pour la visualisation interactive (Qt/OpenGL)

Visu de la simulation de formation de nuages

Céline Planche (LaMP/OPGC) et Wolfram Wobrock (LaMP/OPGC)

C. Planche, W. Wobrock, A. Flossmann, F. Tridon, J. Van Baelen, Y. Pointin, M. Hagen. 2010. The influence of aerosol particle number and hygroscopicity on the evolution of convective cloud systems and their precipitation: A numerical study based on the COPS observations on 12 August 2007. *Atm. Res.* 98, 40-56.

- Voxler + création d'animation

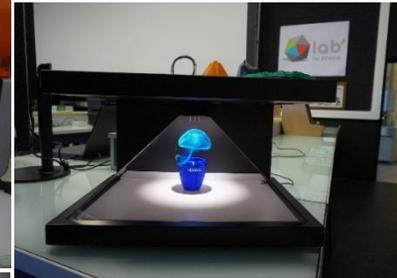


- Etude du portage pour la visualisation interactive (Qt/OpenGL)

Visite du Fab'Lab « Lab du Pensio » par l'OPGC

Adélaïde Albouy-Kissi • <http://lab-pensio.iut-lepuy.fr/>

- Le **FabLab** de l'IUT du Puy est **unique en région Auvergne - Rhones Alpes** car il propose les toutes dernières technologies de la **fabrication numérique** et de la **réalité virtuelle**



Exemples en recherche et en enseignement en Auvergne

- **IUT** Informatique – Imagerie Numérique
- Licence pro – Image et son
- **Master** Traitement d'images et du signal
- Master Informatique – Image, géométrie, algorithmes
- **ISIMA** – Informatique des systèmes embarqués
– Calcul et modélisations scientifiques



- **Institut Pascal** – Image, système de perception, robotique
– Thérapie guidée par l'image (ex ISIT)
- **LIMOS** – Modèles et algorithmes de l'aide à la décision :
Géométrie, imaGes, apprentissaGes, alGorithmes
- **Laboratoire de Mathématiques Blaise Pascal**

Groupement de recherche

Informatique Géométrique et Graphique,
Réalité Virtuelle et Visualisation

- visualisation **scientifique**,
- visualisation **d'informations**,
- visualisation analytique,
- visualisation in-situ,
- visualisation **hautes performances**,
- interaction visuelle, perception visuelle,
- évaluation de la visualisation,
- visualisation de **données relationnelles**,
- fouille visuelle des données,
- architectures client-serveur pour la visualisation de données distantes,
- visualisation sur dispositifs nouveaux (tablettes, smartphones), **mur d'images**
- visualisation de **données géolocalisées**,
- visualisation de **données biologiques et moléculaires**,
- visualisation de données incertaines.



<http://visu2017.liris.cnrs.fr/>

Journées Visu 2017

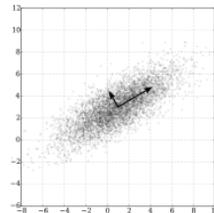
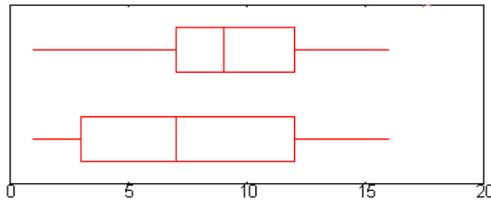
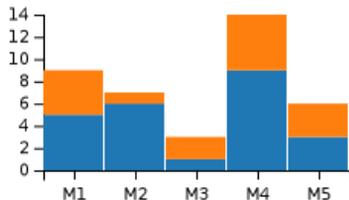


Visualisation de données

Ensemble de méthodes de représentation graphique, en 2D ou en 3D

Typologies de représentation

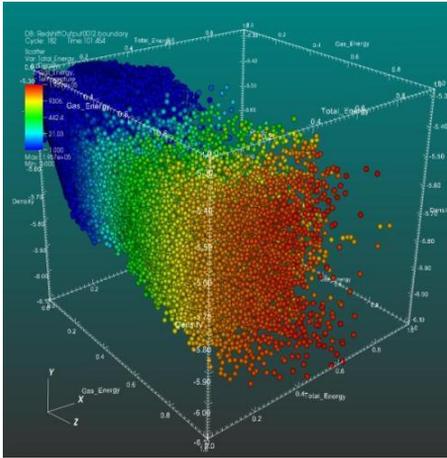
- les histogrammes,
- les boîte à moustaches,
- les représentations graphiques associées à l'ACP,
- Voir aussi les représentations graphiques de **données statistiques**



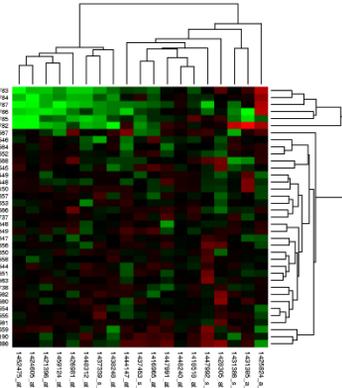
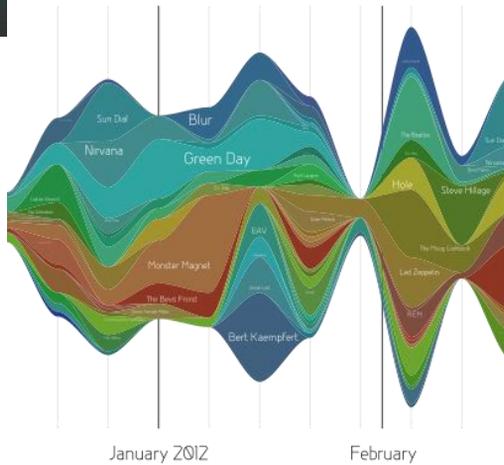
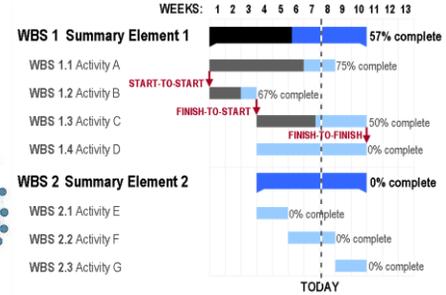
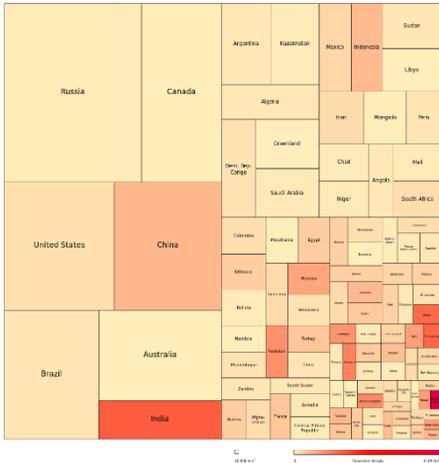
Intérêt :

- Simplifier les données complexes, Enrichir l'information
- Améliorer, ajuster le modèle
- Montrer des comparaisons, des causalités
- Faire ressortir des modèles et des relations entre données
- **Traiter, analyser et communiquer** sur les données

Exemples de visualisation de données



Top 100 States of the World by Area



Exemples de l'observatoire virtuel de l'OPGC

id_sample	id	code	date_occured	time_occured	date_collected	time_collected	collection_tool	temperature	material	texture_and_size	note_on_sample	note_on_location	latitude	longitude	elevation	sample_weight	collector
1	41	REU140621-1	2014-06-21	04:38:00	2014-06-21	04:38:00	null	null	lava	lava	bad quenching in water at	a'a upper crust	-21.265917	55.718111	1983	1134	A Di Muro - N Villeneuve
2	41	REU140624-1	2014-06-21	null	2014-06-24	null	null	null	pyroclast	aphyric, glassy large scoria	null	Main Vent	-21.250444	55.719556	2362	912	A Di Muro
3	41	REU140624-2	2014-06-21	null	2014-06-24	null	null	air temperature	fumaroles	white crust	white crust	Fissure near Main Vent	-21.250611	55.719472	2355	255	A Di Muro
4	41	REU140624-3	2014-06-21	null	2014-06-24	null	null	null	pyroclast	scoria lapilli	hot deposit (405°C)	Top of 10 cm thick deposit, main vent	-21.251056	55.719667	2336	0	A Di Muro
5	41	REU140624-4	2014-06-21	null	2014-06-24	null	null	null	pyroclast	scoria lapilli	hot deposit (405°C)	Main Vent	-21.251056	55.719667	2336	695	A Di Muro

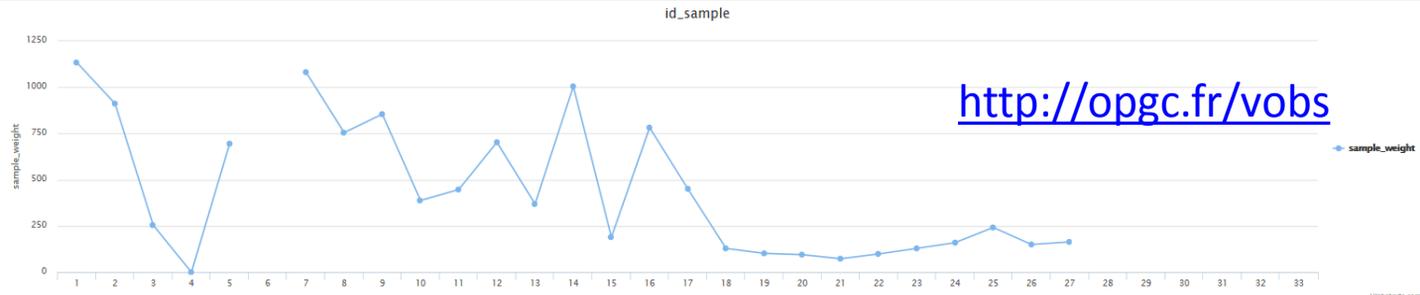
[CSV](#) [XML](#) [JSON](#)

Graphique :

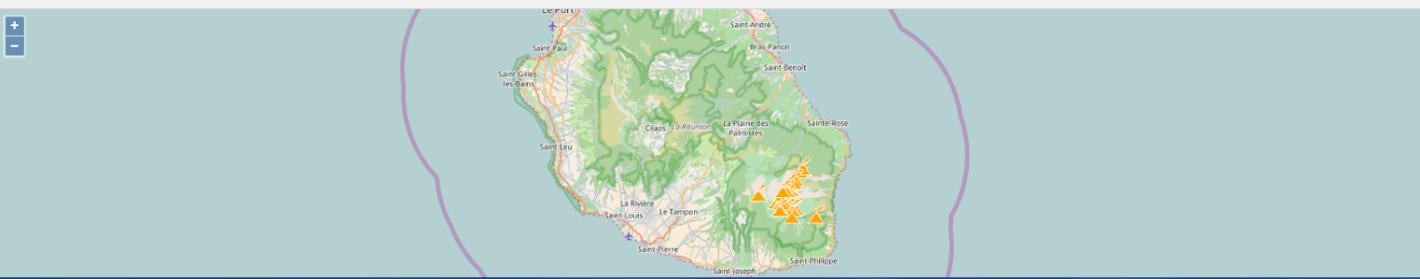
Axe des X :

Axe des Y :

Type de graphiques :

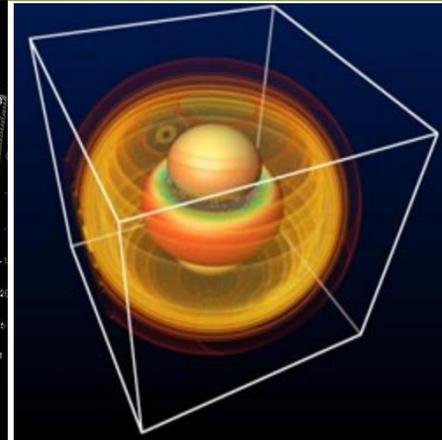
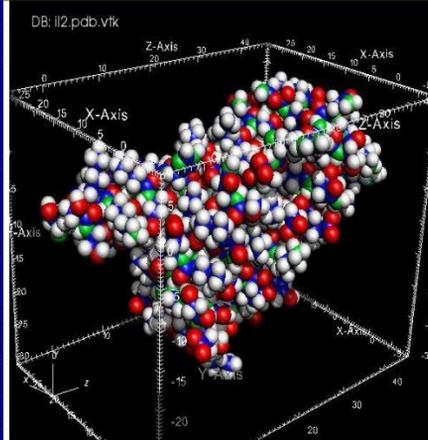
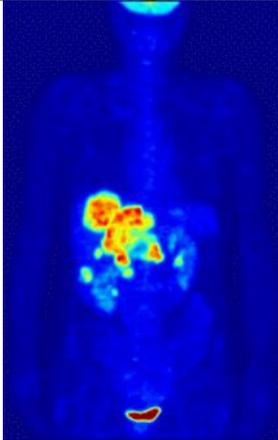


Carte :

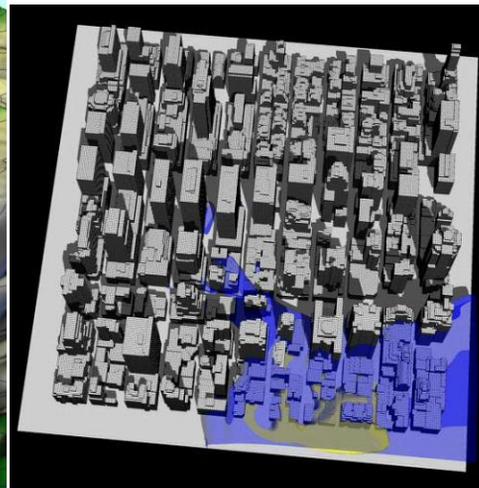
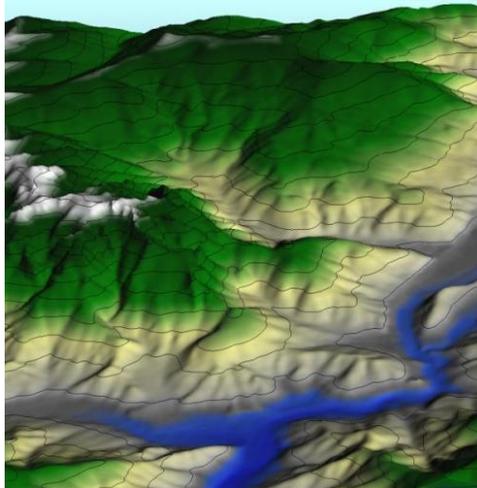


Visualisation scientifique - Applications

Sciences
naturelles :

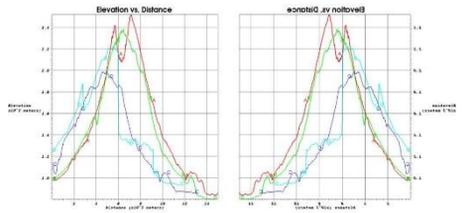
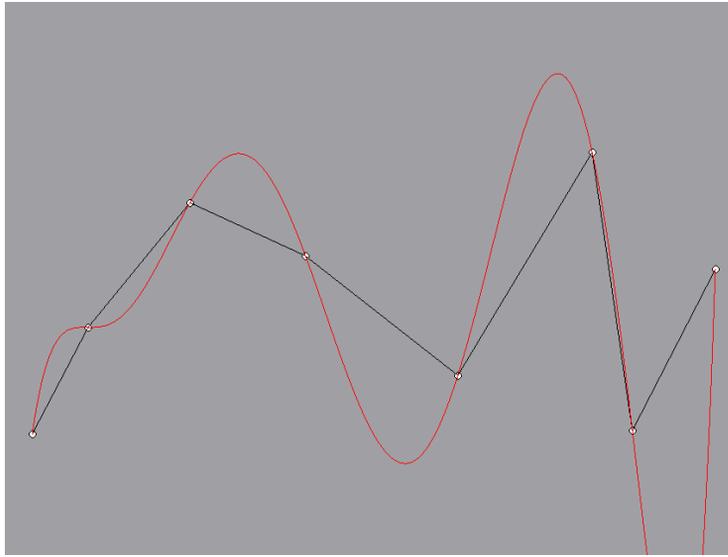


Géographie,
Écologie :

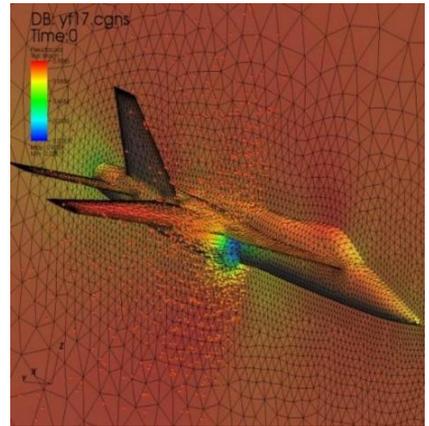


Visualisation scientifique - Applications

sciences formelles : Mathématiques, informatique théorique



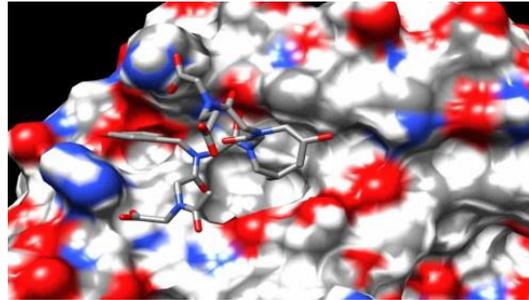
Sciences appliquées



Modélisation moléculaire => visualisation moléculaire

Exemple d'études menées à l'Institut de Chimie de Clermont-Ferrand :

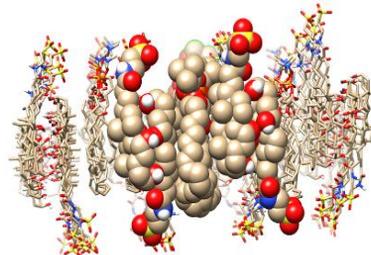
- Interaction drogue / récepteur
- Biologie structurale
- Réactivité Chimique et Biochimique



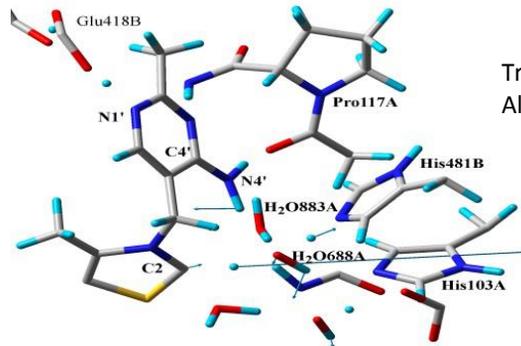
PIM,
PKC γ ,
DIRK,
CLK1,
CGRP,
MCL1,
BCLxl,
PDZ

Outils/stratégies :

- Docking, Dynamique moléculaire
- Modélisation par Homologie
- Paramétrisation de champ de forces
- Mécanique Quantique
- Méthodes mixtes QM/MM



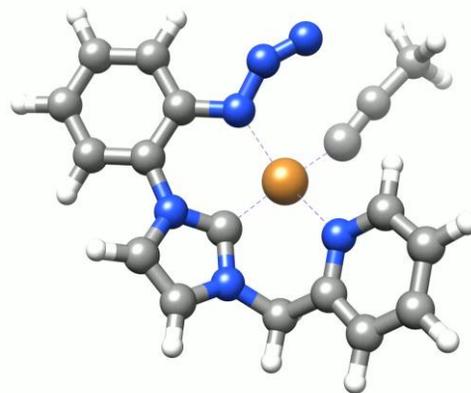
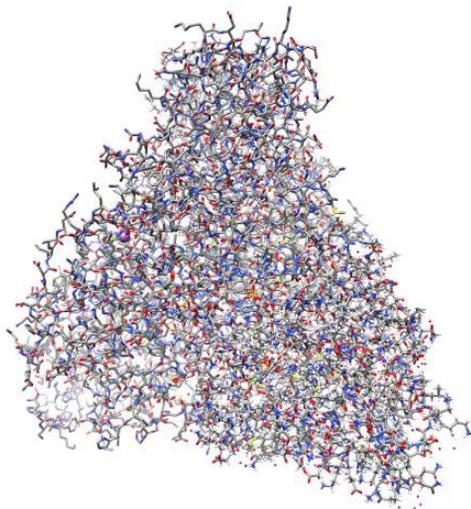
Micelle
Taurocholate/
lecithine,
PKC γ ,
Glaciogène.



Transcétolase,
Aldolase.

Modélisation moléculaire => visualisation moléculaire

Vincent Thery (ICCF) et Lionel Nauton (ICCF)



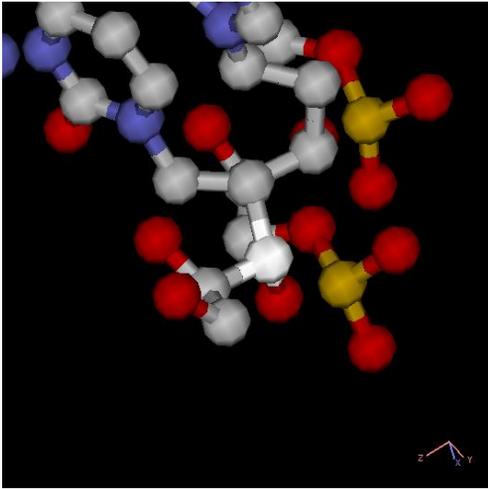
Exemples de ressources matérielles et logicielles :

- **Station graphique** et vision 3D nvidia quadro FX 3800 pour la **stéréo**,
- Station de calcul DELL, PowerEdge R815, 32 Processeur, 64 Go de RAM
- Gaussian/Gaussview, NAMD/VMD, **CHIMERA**, Sybylx.
- + **Mésocentre Clermont Auvergne** : <https://crr.i.clermont-universite.fr/>

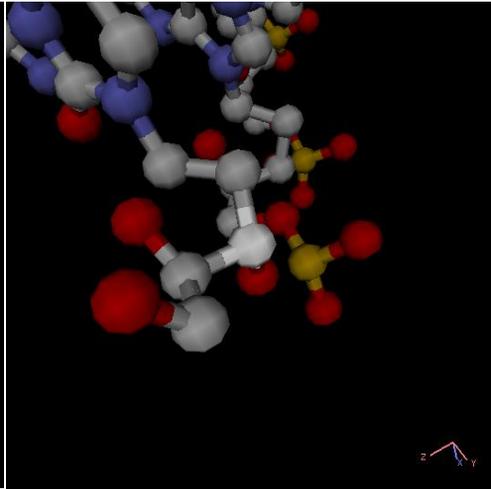
Moteur 3D

- composant logiciel qui crée des images matricielles à partir de coordonnées 3D
 - utilisé dans moteurs de jeu (ex:Unity), logiciels de calcul (CAO, éléments finis...)
1. Modéliser ce que l'on veut visualiser ou représenter : **modélisation**
 - ✓ Rotation, translation, zoom.
 2. Effectuer la visualisation de ce que l'on a modélisé : **rendu**
 - ✓ Calcul de l'éclairage (on parle d'illumination),
 - ✓ Application éventuelle de textures, Calcul de la profondeur (Z-buffer),
 - ✓ **Projection** dans le plan d'observation...

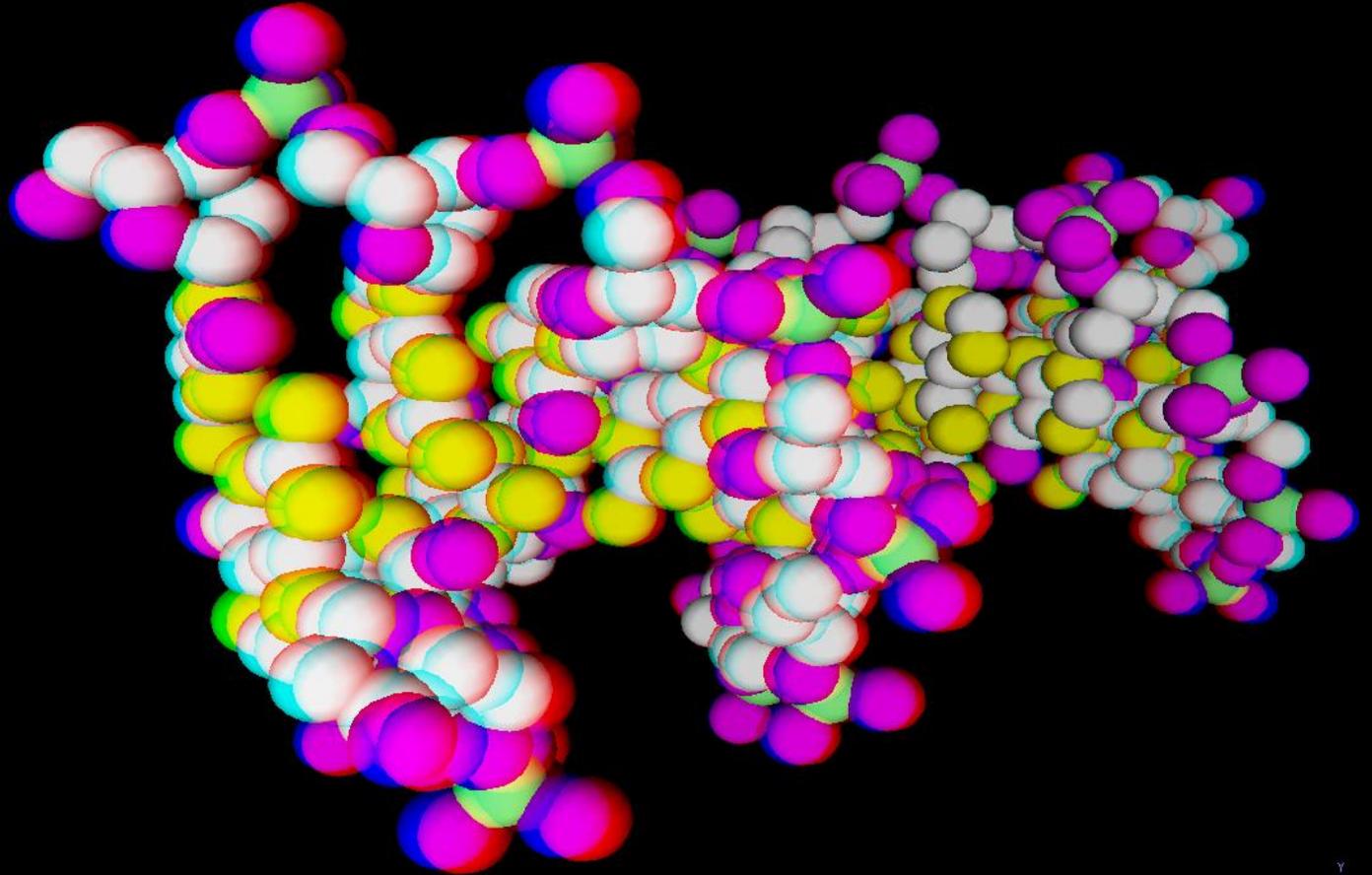
Orthogonale



Perspective



Projection en relief stéréoscopique pour anaglyphes



Stéréoscopie

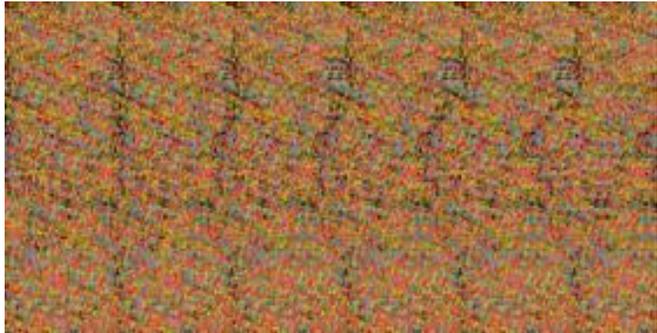
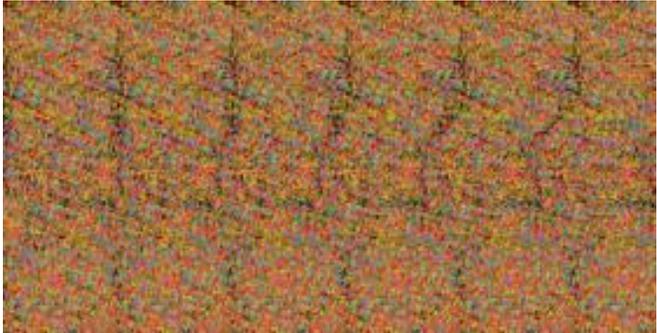
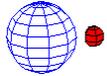
- Techniques pour reproduire une perception du **relief** à partir de **deux images**

- **l'anaglyphe,**

- l'entrelacé (écran métallisé, deux projecteurs avec filtres polarisants), Ecrans polarisés dans chaque sens les lignes de pixels pairs et impairs,

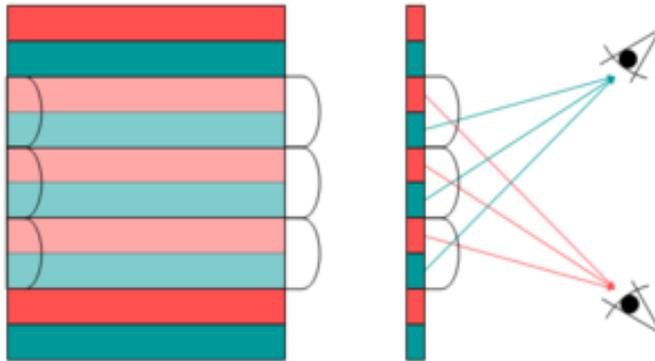


- la vision croisée, ou la vision parallèle :



Stéréoscopie

- l'auto-stéréoscopie à réseau lenticulaire,

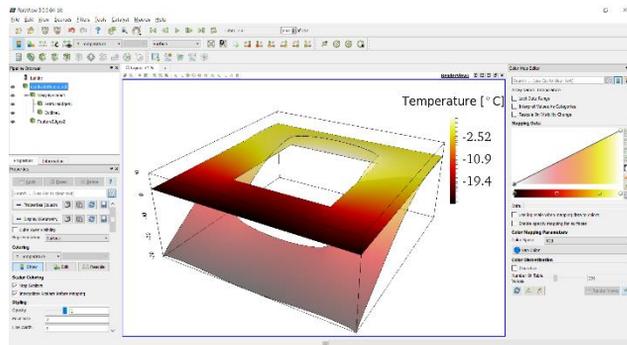


- les lunettes alternantes à cristaux liquides...

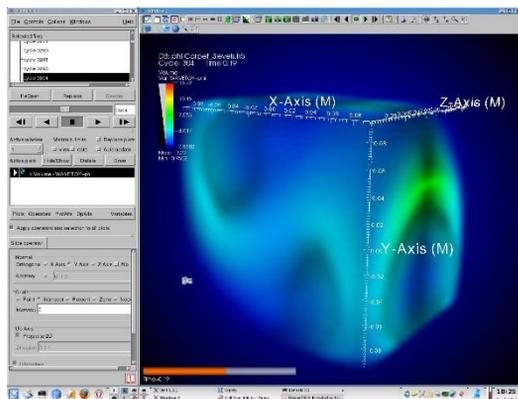
Domaines professionnels : vidéo, géographie, biologie, chimie, architecture, imagerie médicale, CAO , ainsi qu'évidemment en photogrammétrie...

Outils de visualisation 3D

ParaView est un logiciel libre de visualisation de données. Il est fondé sur la bibliothèque VTK. ParaView dispose d'une architecture client-serveur qui permet de traiter des données à distance



<https://www.projet-plume.org/fiche/paraview>



VisIt est un outil d'analyse graphique interactive open source pour visualiser des données scientifiques. VisIt a été conçu pour gérer des tailles de données très importantes dans la gamme terascale et peut également gérer de petits ensembles de données dans la gamme kilobyte.

<https://www.projet-plume.org/fiche/visit>

Qt une API C++ avec des composants d'interface graphique (widgets), d'accès aux données, de connexions réseaux, de gestion des fils d'exécution, d'analyse XML, etc.



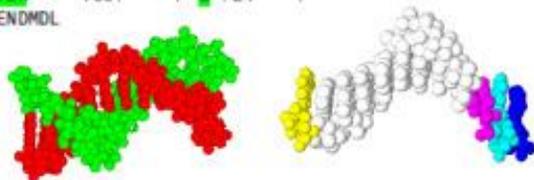
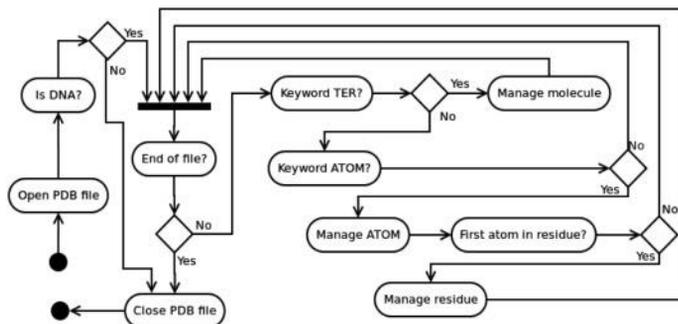
<https://www.projet-plume.org/fiche/qt>



OpenGL (*Open Graphics Library*) est un ensemble normalisé de fonctions de calcul d'images 2D ou 3D. Cette interface de programmation est disponible sur de nombreuses plateformes où elle est utilisée pour des applications qui vont du jeu vidéo jusqu'à la CAO en passant par la modélisation

Lecture PDB

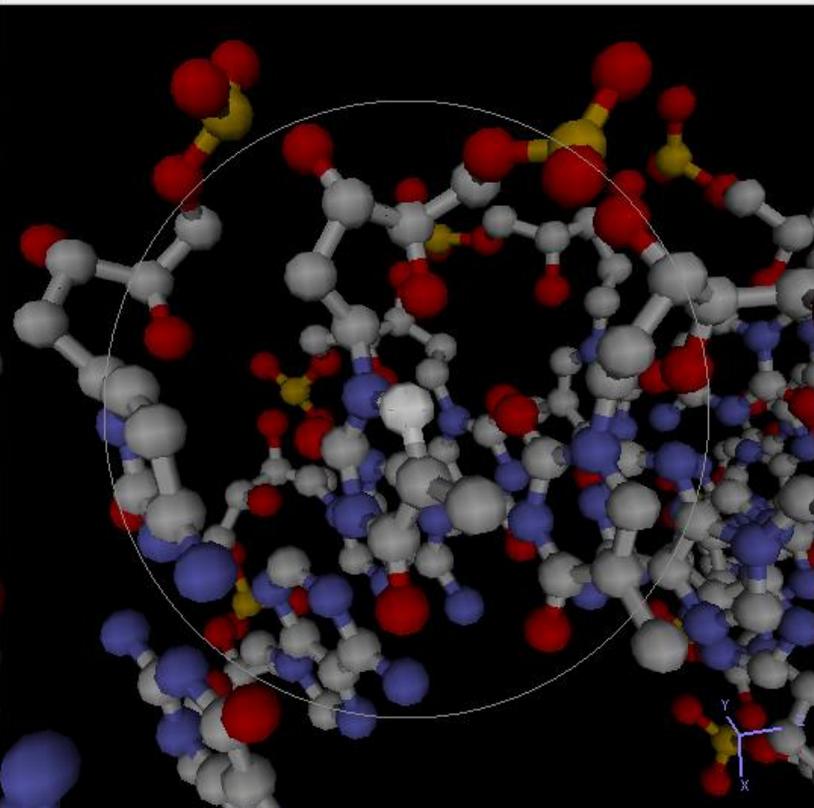
HEADER	DNA	Element	Chain/Strand ID	Residue/Nucleotide number	Atoms coordinates		
...							
MODEL	1						
ATOM	1	O5'			9.256	-9.769	4.573
ATOM	2	C5'			10.679	-9.579	4.526
...							
ATOM	31	H05'			8.851	-8.927	4.348
ATOM	32	P			11.658	-7.780	9.003
...							
ATOM	64	H22			9.859	2.240	7.805
ATOM	65	P			13.850	-2.418	12.300
...							
ATOM	382	H22		12	-4.024	2.925	36.606
TER	383			12			
ATOM	384	O5'		13	-9.356	10.980	33.794
...							
ATOM	759	H6		24	7.443	4.634	2.491
TER	760			24			
ENDMDL							



Interaction Visu \Leftrightarrow Information

SIBMOL3D (Perspective) | [Academic version]

File Visualization Help



Browser

- ▶ C3
- ▶ G4
- ▶ A5
- ▶ A6
- ▶ T7
- ▲ T8
 - P 142
 - O1P 143
 - O2P 144
 - O5* 145
 - C5* 146
 - C4* 147
 - O4* 148
 - C3* 149
 - O3* 150
 - C2* 151
 - C1* 152
 - N1 153
 - C2 154
 - O2 155
 - N3 156
 - C4 157
 - O4 158
 - C5 159
 - C5M 160
 - C6 161

D
E
M
O
?