

## Architecture logicielle pour la conception de simulation de système multi-cellulaires sur GPU

Anne JEANNIN-GIRARDON  
Pascal BALLET  
Vincent RODIN

Lab-STICC  
Université de Bretagne Occidentale  
[anne.jeannin@univ-brest.fr](mailto:anne.jeannin@univ-brest.fr)

11 juin 2012



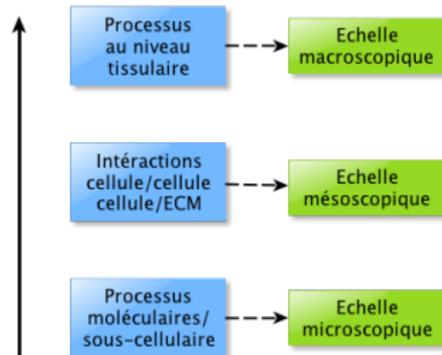
## Contexte : simulation en environnement virtuel

### But

Aide à la conception de modèles en biologie cellulaire...

### Moyen

... en favorisant une approche hybride de type 'middle-out' [Walker et Southgate, 2008], une implémentation sur architecture multi-cœur



### Positionnement

Démarche informatique pour le développement d'une architecture d'accueil des modèles, l'optimisation de leurs implémentations sur GPU

# Plan

- 1 Travaux connexes
- 2 Le framework OpenCL
- 3 Proposition : une architecture logicielle
- 4 Conclusion

## Travaux connexes

→ **CompuCell** : implémentation de CPM (+ OpenMP), simulations de tissus [Chaturvedi et coll., 2005]

→ **FlameGPU** : système multi-agents (+ CUDA), simulations généralistes [Richmond et coll., 2010]

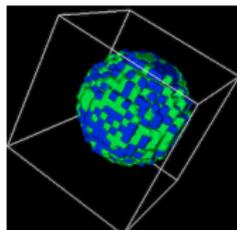


Fig: Simulation sous CompuCell3D

### Proposition

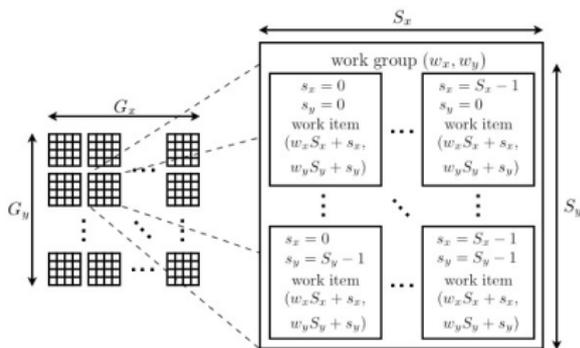
Une architecture flexible, avec des structures de données génériques, pouvant implémenter des modèles variés à travers OpenCL pour une exécution déportée sur le GPU.

# Plan

- 1 Travaux connexes
- 2 **Le framework OpenCL**
- 3 Proposition : une architecture logicielle
- 4 Conclusion

# Le framework OpenCL

## Modèle d'exécution

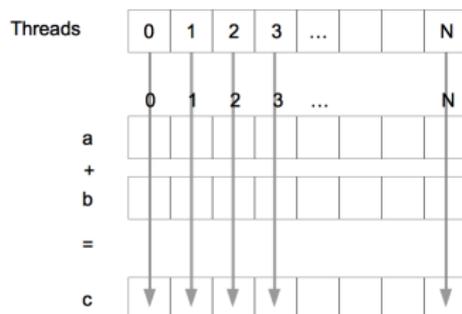


## Modèle d'exécution

- Nécessite de revoir sa façon de programmer (paralléliser les algorithmes, pas toujours immédiat)
- Utilisation des ressources de calculs (penser les structures de données)
- Découpage en grille
- Pour simplifier : la plus petite unité de la grille correspond à un processus

# Le framework OpenCL

## Exemple de calcul parallèle : addition de vecteurs

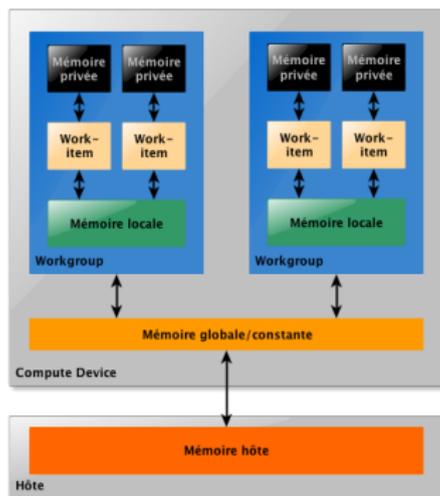


```
// N éléments, séquentiel
for(int i = 0; i < N; i++)
    c[i] = a[i] + b[i];
```

```
// N éléments, parallèle
int i = get_global_id(0);
c[i] = a[i] + b[i];
```

# Le framework OpenCL

## Modèle mémoire



## Modèle mémoire avec OpenCL

- Mémoire hiérarchisée
- Nécessite de revoir sa façon de programmer (quantité limitée de mémoire disponible)
- Gestion de la mémoire disponible (temps d'accès)

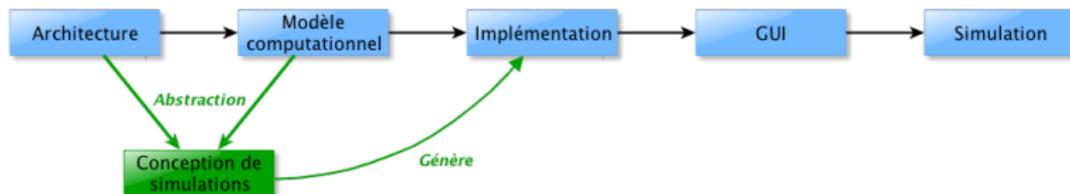
# Plan

- 1 Travaux connexes
- 2 Le framework OpenCL
- 3 Proposition : une architecture logicielle**
- 4 Conclusion

# Flot de conception et abstraction

## Flot de conception

- Conception logicielle pour la création de simulation : différentes étapes, différentes spécialités  $\Rightarrow$  flot de conception complexe
- Logiciel devant offrir des fonctionnalités spécifiques, séparés dans différents modules (exécution du modèle de calcul, visualisation en environnement virtuel, export de données)



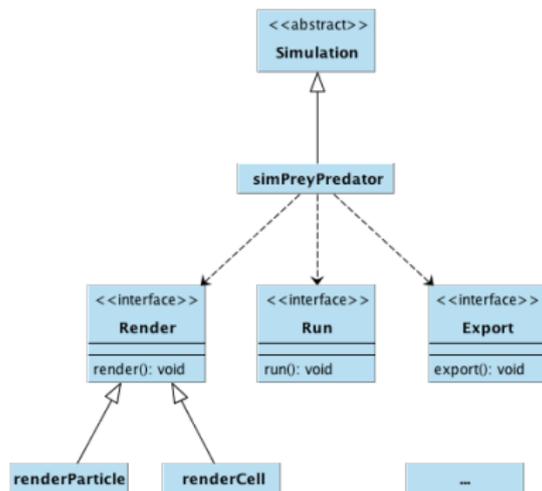
# Modularité d'une architecture logicielle

Besoin de définir de nouvelles simulations, de nouveaux comportements, de manière indépendante et sans 'casser' ce qui existe dans l'architecture.

## Flexibilité

Méthodes de conception en informatique pour la modularité des applications.

Patron de conception 'stratégie' : permet l'ajout de comportements selon les besoins, et sans modification de l'existant.



## Quelques exemples, différents types de modèles

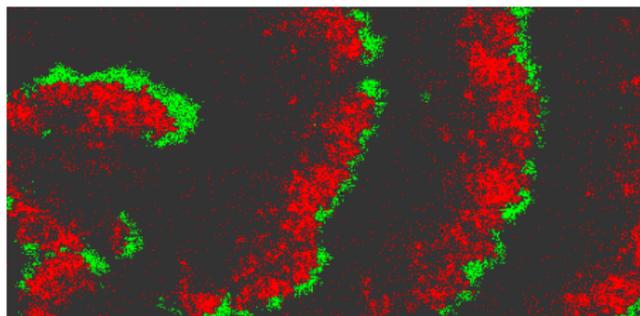


Fig: Modèle individu-centré pour la simulation de système proies/prédateurs

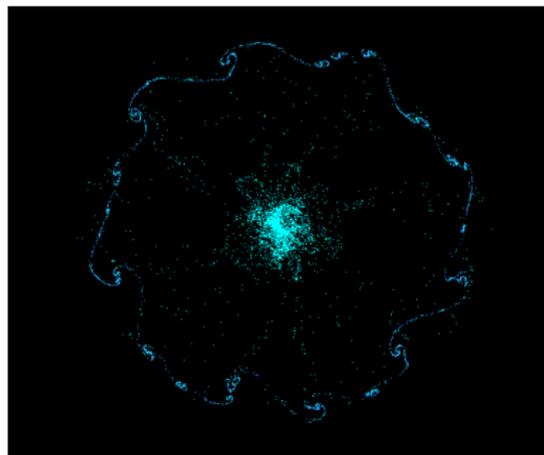


Fig: Problème à N corps : résolution par pas de temps

# Plan

- 1 Travaux connexes
- 2 Le framework OpenCL
- 3 Proposition : une architecture logicielle
- 4 Conclusion

## Conclusion et perspectives

### Récapitulatif

- Offrir des outils pour aider à la simulation de systèmes biologiques (en particulier le systèmes multi-cellulaires),
- aider à la compréhension de ces systèmes, permettre des expérimentations virtuelles ...
- ... à travers une architecture d'accueil de modèles de ces systèmes, implémentés sur GPU

### Perspectives

- Approfondir le développement de cette architecture d'accueil
- Implémentation parallèle d'un modèle logiciel de cellule [Ballet et Tracqui, 2007]

## Références

- BALLET P. et TRACQUI P., « Migration de cellules virtuelles déformables - modélisation biomécanique multiagent de la migration cellulaire », *RSTI série TSI (No Spécial 'Modélisation et simulation pour la post-génomique')*, Edition Lavoisier - Hermes Sciences - volume 26 - n° 1-2/2007, fév. 2007.
- CHATURVEDI R., HUANG C., KAZMIERCZAK B., SCHNEIDER T., IZAGUIRRE J., GLIMM T., HENTSCHEL H., GLAZIER J., NEWMAN S. et ALBER M., « On multiscale approaches to three-dimensional modelling of morphogenesis », *Journal of The Royal Society Interface*, vol. 2, n° 3, p. 237–253, 2005, doi : 10.1098/rsif.2005.0033.
- RICHMOND P., WALKER D., COAKLEY S. et ROMANO D., « High performance cellular level agent-based simulation with flame for the gpu », *Briefings in Bioinformatics*, 2010, doi : 10.1093/bib/bbp073, adresse : <http://bib.oxfordjournals.org/content/early/2010/02/01/bib.bbp073.abstract>.
- WALKER D.C. et SOUTHGATE J., « The virtual cell - a candidate coordinator for 'middle-out' modelling of biological systems », *Briefings in Bioinformatics*, vol. 10, n° 4, p. 450–461, 2008.