
Ray Tracing de molécules

Feuille de route

CLÉMENT LECOEUR – CLÉMENT MOREAU – VICTOR ROSSIGNOL

13 octobre 2019

Enseignants encadrants : Maxime MARIA – Simon GUIONNIERE

Spécification fonctionnelle : Ce Projet a pour but de réaliser le rendu d'une molécule. Trois représentations principales seront réalisées :

- Ball-and-stick [Figure 1] : représentation composée de sphères (atomes) et de cylindres (liaisons entre atomes).
- Van der Waals [Figure 2] : représentation composé uniquement de sphères avec des rayons différents en fonction de leur rayon atomique.
- Meta-balls [Figure 3] : représentation en forme de blob permettant de représenter l'isosurface formé par les atomes de la molécule.

L'intérêt de ces représentations est d'aider les bio-chimistes à mieux visualiser la structure d'une molécule à l'aide des représentations Ball-and-Stick et Van der Waals, mais également l'espace libre entre deux atomes à l'aide de la représentation avec des meta-balls.

Le moteur sera « offline ¹ » (éventuellement temps-réel selon l'avancement du projet et les performances obtenues) et utilisera le ray-tracing pour le rendu de la scène.

Puisque la représentation de la molécule sera composée de sphères, de cylindres et de meta-balls, aucun maillage ne sera utilisé afin de simplifier les calculs d'intersections et de diminuer la consommation de mémoire. Cela permettra également de gagner en précision car aucun maillage ne sera visible quelque soit le niveau de zoom.

La possibilité de choisir le matériau des objets de la scène, permettant de modifier la réflexion de la lumière sur la molécule entre une réflexion diffuse ou spéculaire, sera implémentée ainsi que deux structures accélératrices : une de type « grille régulière » et l'autre, spécifique à la représentation de meta-balls, de type « Fitted-BVH » qui composera la partie principale du projet [GPP⁺10].

Contraintes techniques : Ce projet devant être réalisé en C++, nous avons choisi d'utiliser Microsoft Visual Studio afin de réaliser ce projet.

Le projet GIT gérant les versions du code qui sera réalisé est accessible à l'adresse suivante :

https://git.unilim.fr/lecoeur1/Projet_RayTracing

1. Moteur de rendu ne fonctionnant pas en temps-réel dont les performances sont diminuées. Il calcule une seule image.

Principales étapes envisagées :

- Première étape : travail de recherche sur le ray tracing, le calcul des intersections entre une sphere, un cylindre, ou une metaballs et une droite, ainsi que comment réaliser une structure FBVH.
- Deuxième étape : réflexion sur la réalisation du programme et répartition des tâches de chacun en fonction du travail prévu à partir de l'étape 1, telles que le calcul des différentes intersections, calcul des différents matériaux (spéculaire et diffus), différentes étapes pour l'implémentation d'une FBVH, etc...
- Troisième étape : début d'implémentation des tâches les plus rapides et de la FBVH.
- Quatrième étape : finalisation des tâches les plus rapides, ici le lancer de rayons devrait être fonctionnel mais n'utilisera aucune structure accélératrice.
- Cinquième étape : début de l'implémentation d'une grille régulière et suite de la FBVH.
- Sixième étape : finalisation de la grille régulière et de la FBVH.

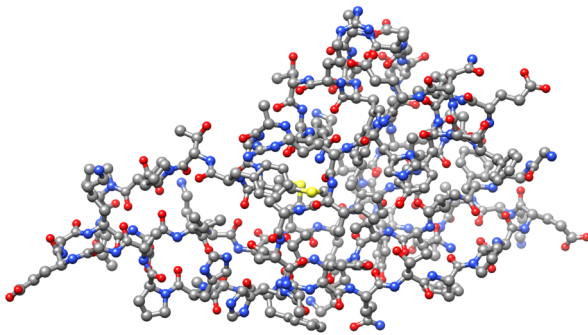


Figure 1 : Balls and Stick

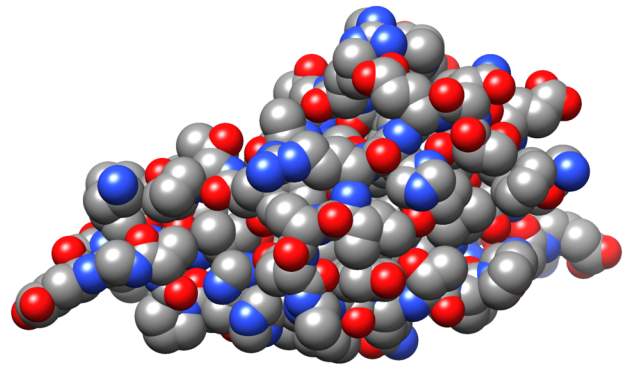


Figure 2 : Van der Waals

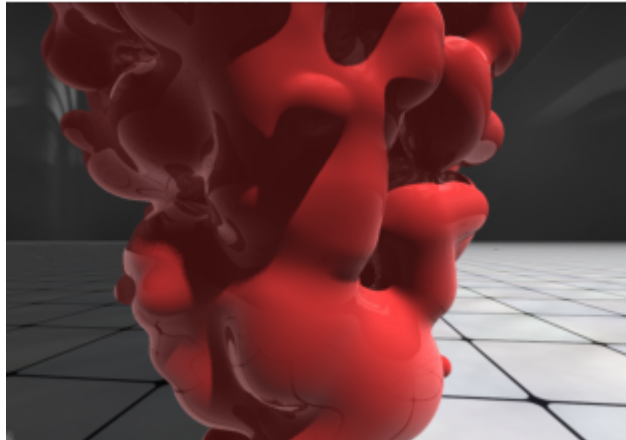


Figure 3 : meta-balls

Référence

[GPP+10] Olivier Gourmel, Anthony Pajot, Mathias Paulin, Loïc Barthe, and Pierre Poulin. Fitted BVH for Fast Raytracing of Metaballs. Computer Graphics Forum, Eurographics 2010 Proceedings, 29(2) :281 ?288, mai 2010.