

Visualisation interactive de graphes
: élaboration et optimisation
d'algorithmes à coûts
computationnels élevés.

Soutenance de thèse de
Antoine Lambert

Directeur de thèse : Guy Melançon
Co-directeur de thèse : David Auber

11 décembre 2012

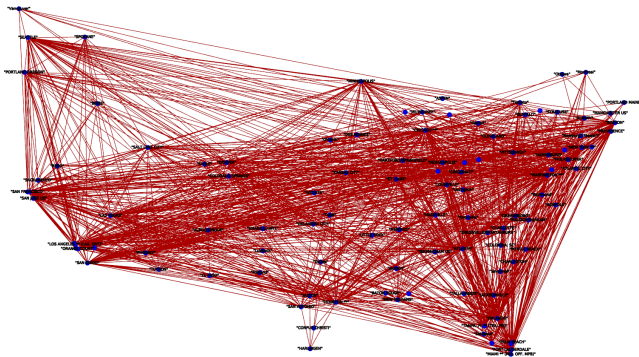
Introduction au domaine

Les graphes

Définition d'un graphe

Objet mathématique composé :

- d'un ensemble d'éléments appelés **sommets**
- d'un ensemble de relations entre paire de sommets appelées **arêtes**



Les graphes

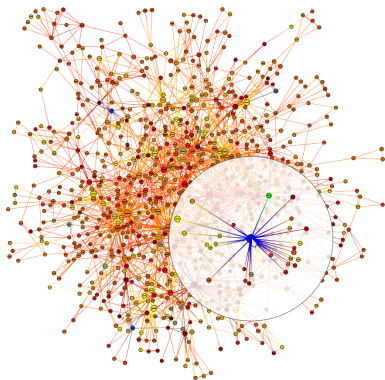
- **Les graphes jouent un rôle important** dans beaucoup de domaines de recherche (Biologie, Sciences Sociales, Informatique, ...)
- Les améliorations des techniques d'acquisition de données **entraînent un besoin de visualisation** car la taille et la complexité des graphes construits compliquent fortement un dessin manuel.
- Dans le monde de la recherche, les communautés "**Graph Drawing**" et de la **Visualisation d'Information** se concentrent sur la conception de visualisations efficaces de graphes.

Visualisation interactive de graphes

Définition

La visualisation interactive de graphes fait référence :

- à la **génération d'images abstraites** de ce type de structure
- aux **techniques d'interaction facilitant l'exploration** des représentations produites



- Domaine de recherche très actif depuis plusieurs dizaines d'années
- Sous-domaine de la Visualisation d'Information

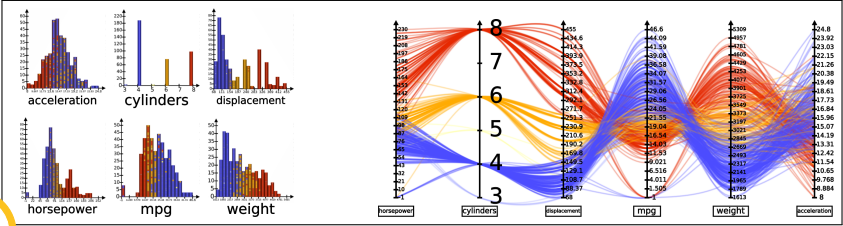
Visualisation d'Information

Définition

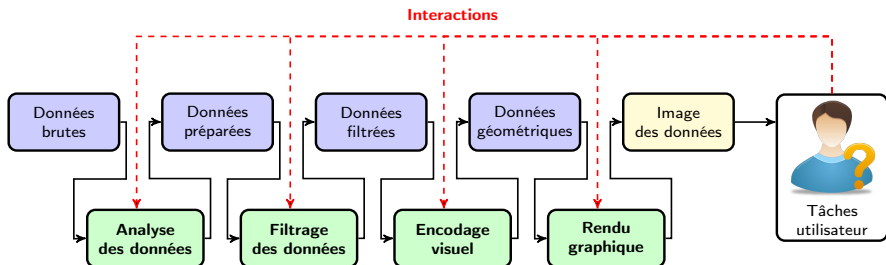
Domaine de recherche portant sur l'élaboration de représentations visuelles de données abstraites sans références spatiales.

car	model name	acceleration	cylinders	displacement	horsepower	model year	mpg	origin	weight
	chevrolet chevelle	12	8	307	150	70	16	1	3504
	buick skylark 330	11.5	8	350	160	70	15	1	3693
	plymouth satellite	11	8	318	150	70	18	1	3436
	amc rebel sst	12	8	304	150	70	16	1	3433
	ford torino	10.5	8	302	140	70	17	1	3446
	ford galaxie 500	10	8	429	198	70	15	1	4341
	chevrolet impala	9	8	454	230	70	14	1	4354
	plymouth fury ii	8.5	8	440	215	70	14	1	4311
	pontiac catalina	10	8	455	225	70	14	1	4425
	amc ambassador dpl	8.5	8	390	190	70	15	1	3650
	plymouth coupe 340	8	8	340	190	70	14	1	3604
	chevrolet monte carlo	9.5	8	400	150	70	15	1	3761
	toyota corona mark ii	15	4	113	95	70	24	3	2572
	plymouth duster	15.5	6	198	95	70	22	1	2833
	amc hornet	15.5	8	199	97	70	18	1	2774
	ford maverick	16	6	205	85	70	21	1	2587
	datsun 510	14.5	4	97	68	70	27	3	2190
	peugeot 504	17.5	4	110	87	70	26	2	2672
	audi 100 ls	14.5	4	107	90	70	24	2	2430

Ernesto Ramos et David Donoho. 1983 ASA Data Exposition dataset. <http://lib.stat.cmu.edu/datasets/>. 1983

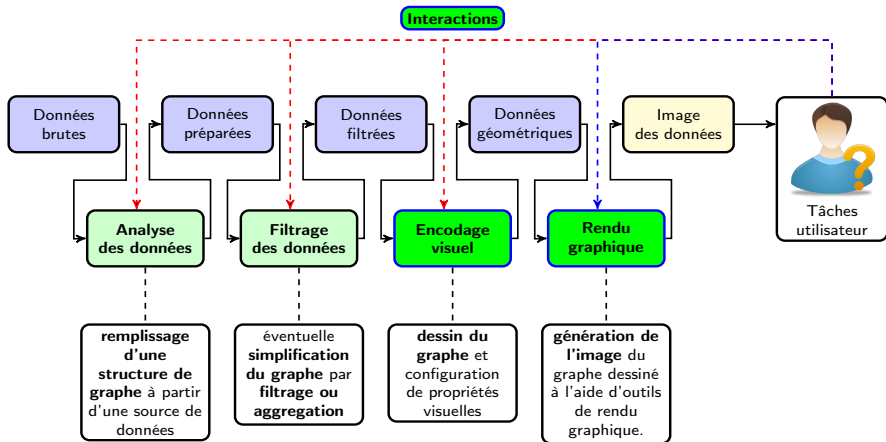


Pipeline de visualisation

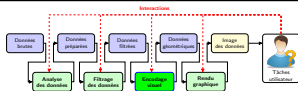


Stuart K. Card, Jock D. Mackinlay et Ben Shneiderman, eds. *Readings in information visualization : using vision to think*. Morgan Kaufmann Publishers Inc., 1999

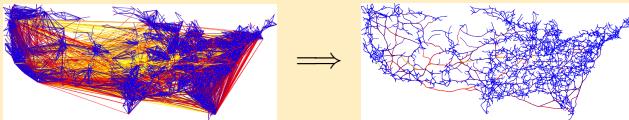
Pipeline de visualisation de graphes



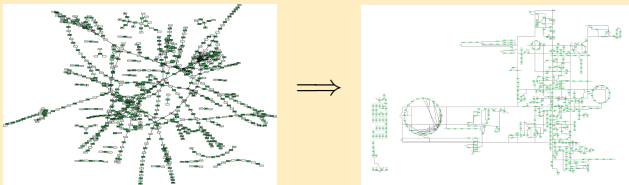
Première partie : Dessin de graphes



Edge bundling : regroupement d'arêtes en faisceaux



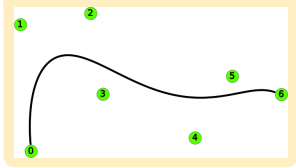
Représentation de réseaux métaboliques



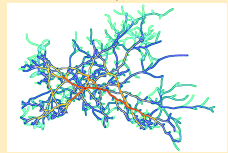
Deuxième partie : Infographie pour la visualisation interactive de graphes



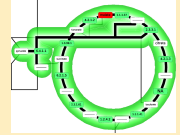
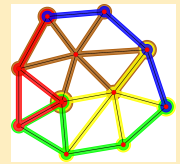
Rendu de courbes paramétriques au GPU



Edge splatting



Mise en évidence de sous-graphes

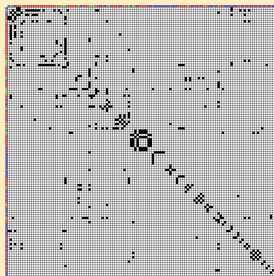
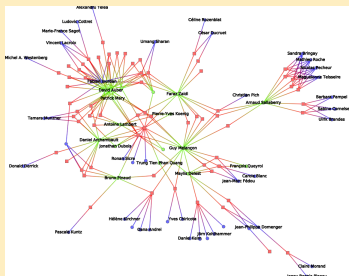


Dessin de graphes

Définition

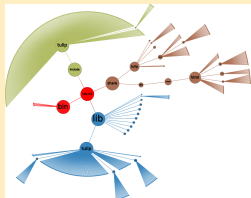
Dessiner un graphe consiste à le **plonger dans un plan ou un espace**, soit **calculer des coordonnées** pour les sommets et d'éventuels points de brisure pour les arêtes.

Représentations majeures : noeud-lien et matrice

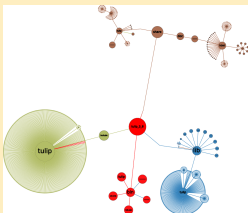


Exemples de représentations noeud-lien

Dessin d'arbres

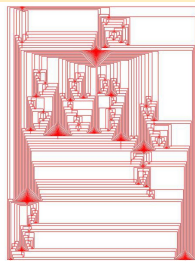


[1]



[2]

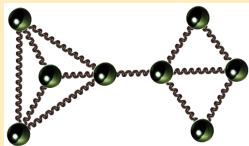
Dessin de graphes planaires



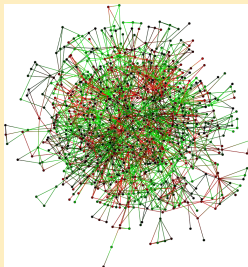
[3]

Exemples de représentations noeud-lien

Dessin de graphes généraux par modèle de forces

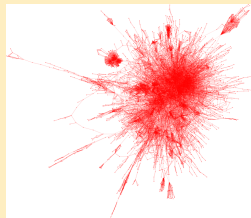


[1]



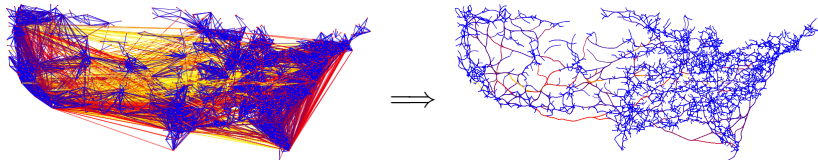
[2]

Dessin multi-niveaux



[3]

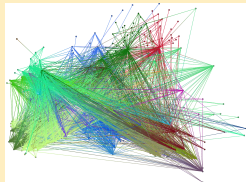
Edge bundling: regroupement d'arêtes en faisceaux



Regroupement d'arêtes en faisceaux

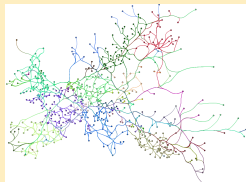
Motivation

- Les dessins de grands graphes généraux souffrent généralement de **problèmes d'occlusion**
- La découverte d'information peut être difficile en raison des **croisements d'arêtes** et des **chevauchements sommet-arête**.

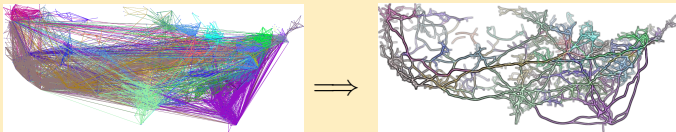


Principes

- **Routage des arêtes du graphe pour les grouper en faisceaux** (*bundles*) afin de réduire l'occlusion et améliorer la lisibilité du dessin
- Faire **émerger les grands flux d'information** entre différentes régions du dessin de graphe.



Winding Roads

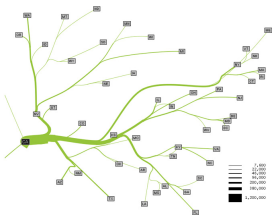


Antoine Lambert, Romain Bourqui et David Auber. "Winding Roads : Routing edges into bundles". Dans : *Computer Graphics Forum* 29.3 (2010). Proceedings of the Joint Eurographics/IEEE-VGTC Symposium on Visualization (EuroVis 2010), p. 853–862

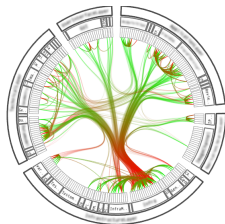
Points forts de la méthode

- fonctionnement intuitif
- flexible en termes de réduction d'occlusions
- facilement implémentable
- calcul rapide en exploitant les architectures de calculs parallèles

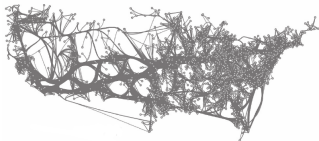
État de l'art antérieur à *Winding Roads*



[1]



[2]

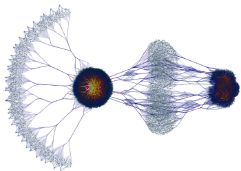


[3]

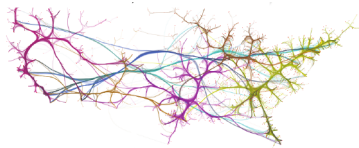


[4]

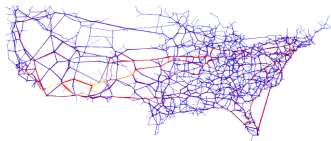
État de l'art postérieur à *Winding Roads*



[1]



[2]

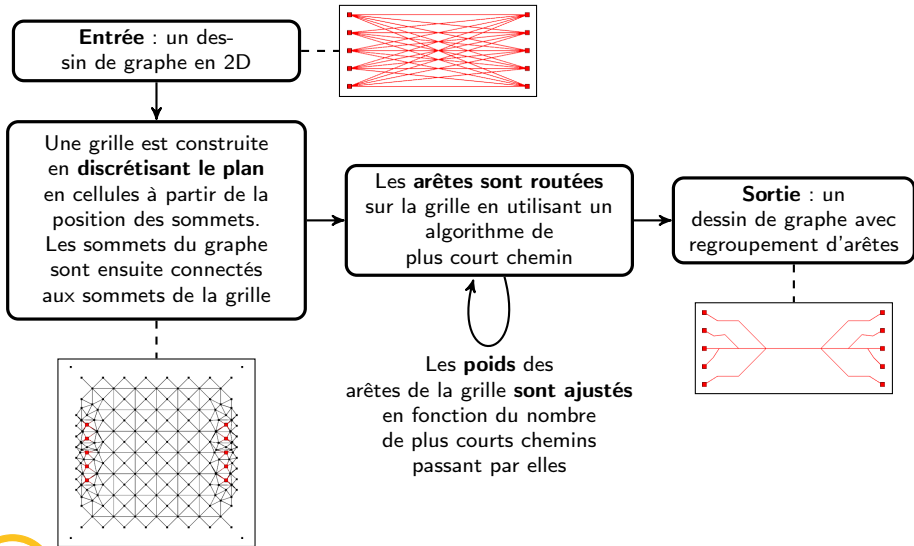


[3]



[4]

Aperçu globale de la technique

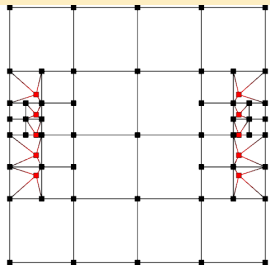


Première étape : calcul de la grille

Principe

Calculer une discrétisation du plan en utilisant les positions des sommets

Approches expérimentées



Quadtree

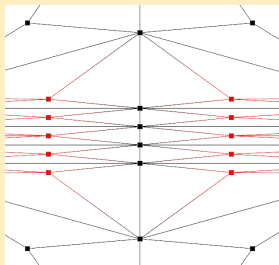
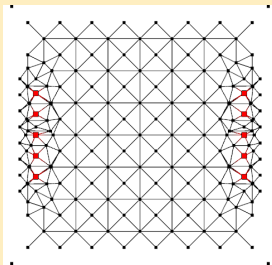


diagramme de Voronoï



combinaison
Quadtree/Voronoi

Deuxième étape : routage des arêtes

Principe

- On route les arêtes du graphe original sur la grille
- On utilise un algorithme de plus court chemin (Dijkstra) pour cela

Augmentation de l'effet de regroupement

- La **métaphore des routes et autoroutes** est utilisée : les routes régulières sont transformées en autoroutes si le trafic y est dense
- Ce phénomène peut être simulé de la façon suivante :
 - on associe des poids aux arêtes de la grille : $w(e)_0 = \text{longueur}(e)$
 - on exécute le calcul des plus courts chemins plusieurs fois
 - Entre chaque itération, **on ajuste les poids des arêtes de la grille** en fonction du nombre de plus court chemin m passant par une arête :

$$w(e)_{i+1} = \begin{cases} w(e)_i, & \text{if } m = 0 \\ w(e)_i / (\log(m) + 1), & \text{if } m > 0 \end{cases}$$

Illustration du processus de routage

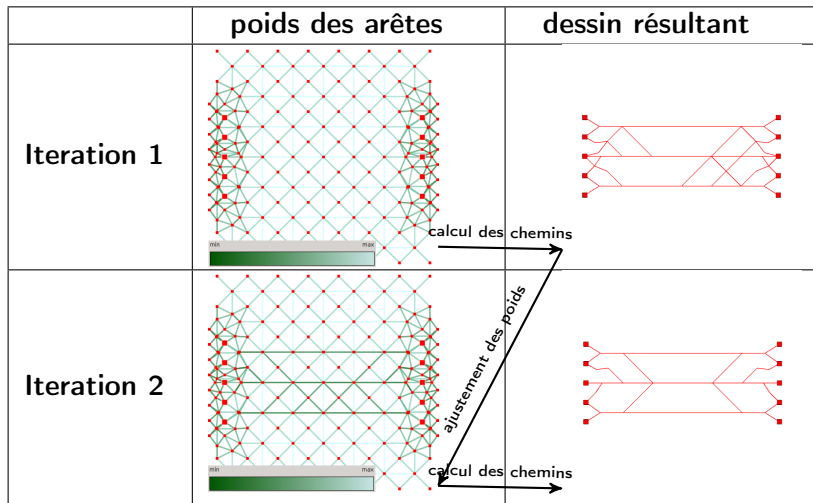
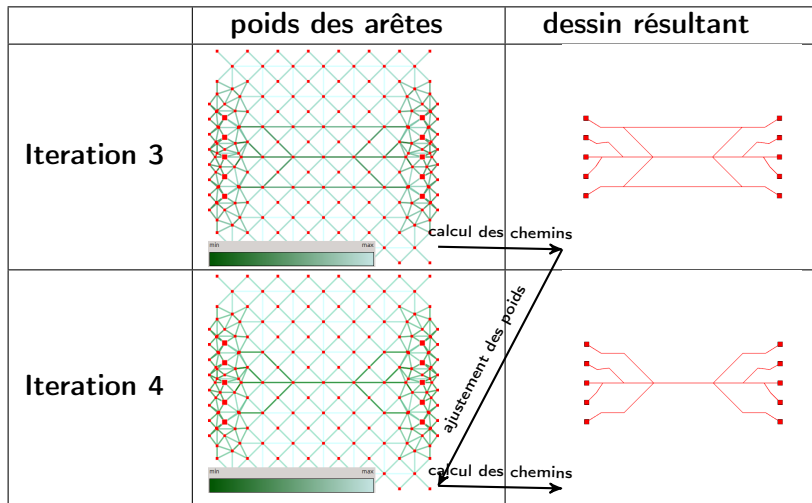


Illustration du processus de routage

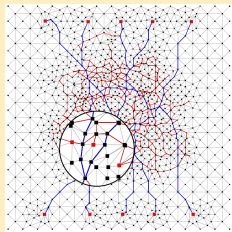


Une vidéo pour résumer

Avantages de la méthode

Réduction des chevauchements entre sommets et arêtes

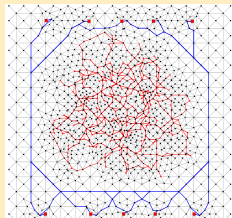
Ne pas prendre en compte les arêtes connectant un sommet de la grille et un sommet original lors du routage.



Promotion de chemins ne passant pas dans des régions denses

Adaptation des poids initiaux des arêtes de la grille :

- $w(e) = \text{length}(e)^\alpha$
- $\alpha < 1$ promeut des chemins à l'extérieur des régions denses.



Implémentation et performances

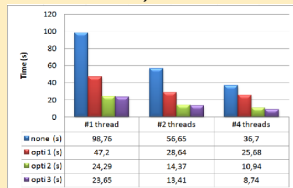
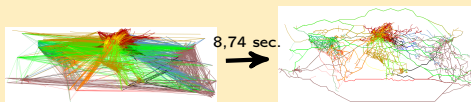
Implémentation

Plusieurs optimisations peuvent être appliquées afin :

- ❶ de réduire le temps de calcul des plus courts chemins sur la grille
- ❷ de réduire le nombre d'appels à l'algorithme de plus court chemin
- ❸ d'exploiter au mieux les architectures de calcul multi-coeurs

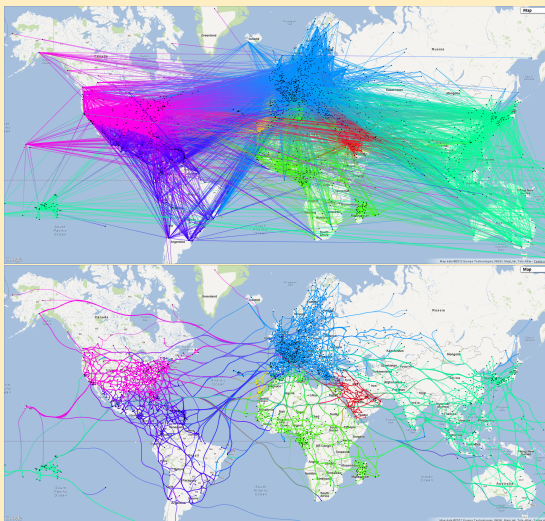
Performances

Temps de calcul obtenus sur le réseau d'interconnexions des aéroports internationaux de l'année 2000 (1525 sommets / 16479 arêtes).



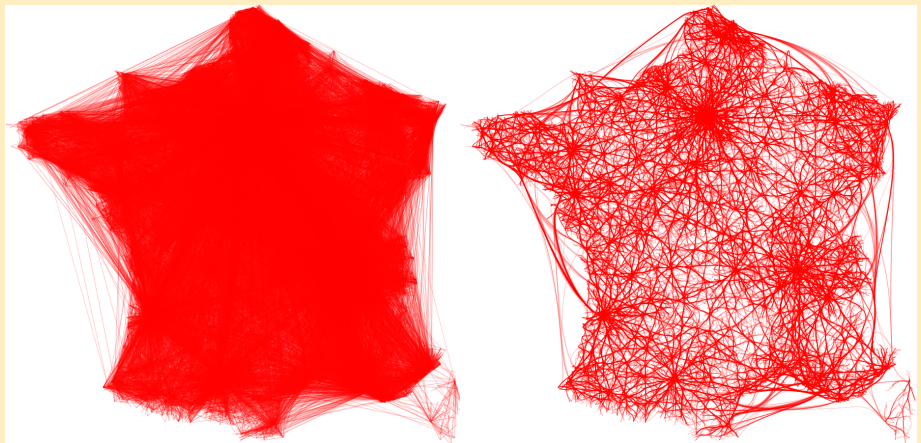
Exemple de résultat

Réseau d'interconnexions des aéroports internationaux en 2004



Exemple de résultat

Réseau de flux de travailleurs en France (1975)



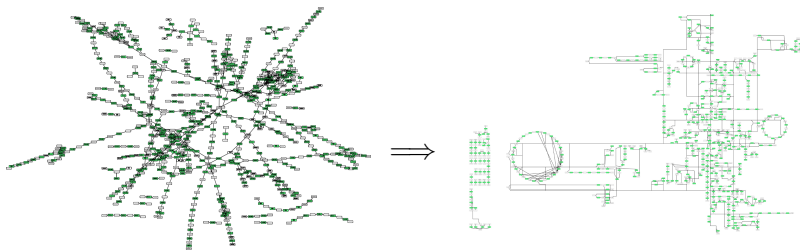
Généralisation pour les dessins 3D

- L'algorithme *Winding Roads* peut être généralisé pour les dessins de graphe dans l'espace.
- La grille de routage est basée sur une combinaison d'octree et de diagramme de Voronoï 3d.



Antoine Lambert, Romain Bourqui et David Auber. "3D Edge Bundling for Geographical Data Visualization". Dans : *Proceedings of the 14th International Conference Information Visualisation. IV'10*. IEEE Computer Society, 2010, p. 329–335

Représentation de réseaux métaboliques



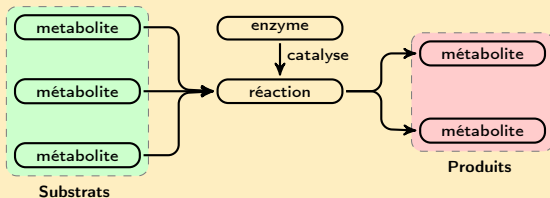
Introduction aux réseaux métaboliques

Métabolisme

L'ensemble des réactions biochimiques se produisant dans les cellules d'un organisme vivant.

Réaction biochimique

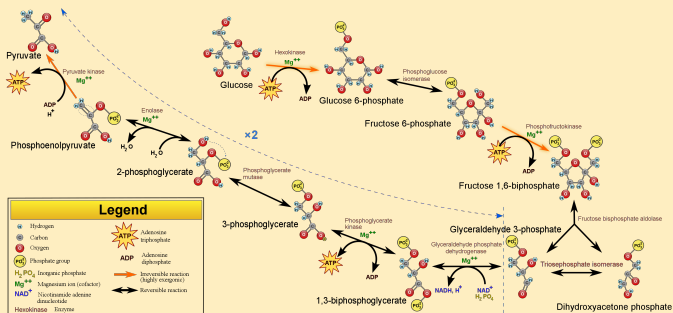
Procédé transformant un ensemble de substances chimiques (métabolites) en un autre.



Introduction aux réseaux métaboliques

Voie métabolique

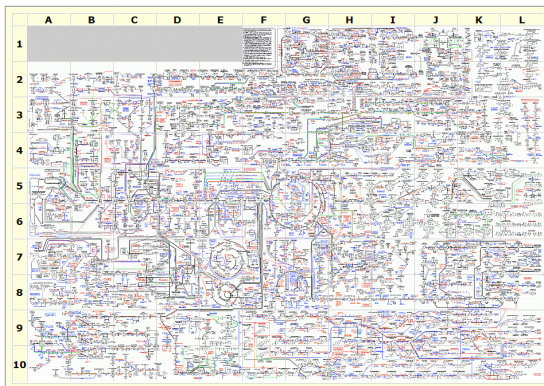
- ensemble de réactions se produisant dans une cellule modifiant un composé chimique principal
- les produits d'une réaction sont les substrats des suivantes
- Exemple : la Glycolyse, voie transformant le glucose en pyruvate



Introduction aux réseaux métaboliques

Réseau métabolique d'un organisme

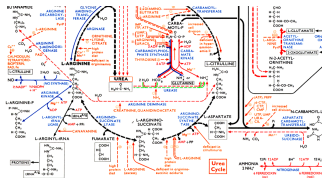
- Intégration de toutes les voies métaboliques dans un unique réseau
- Les voies forment une **décomposition chevauchante** du réseau



Dessin de réseaux métaboliques : les défis

Exigence de visualisation

Respecter les conventions de dessin biologique pouvant être observées sur les représentations manuelles.

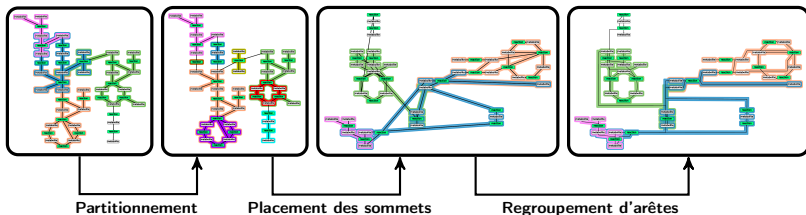


Contraintes de dessin

- ❶ **Contrainte de proximité** : L'information relative aux voies métaboliques doit être préservée autant que possible
- ❷ **Contrainte de duplication** : Eviter de dupliquer des sommets afin de respecter la connectivité du réseau
- ❸ **Contrainte de dessin biologique** : Représentation particulière des cycles et cascades de réactions
- ❹ **Contrainte de dessin d'arêtes** : Dessin "pseudo-orthogonal" des arêtes
- ❺ **Contrainte d'occlusion** : Le nombre de croisements d'arêtes doit être minimisé

Pipeline de notre méthode de dessin

Antoine Lambert, Jonathan Dubois et Romain Bourqui. "Pathway Preserving Representation of Metabolic Networks". Dans : *Computer Graphics Forum* 30.3 (2011). Proceedings of the Joint Eurographics/IEEE-VGTC Symposium on Visualization (EuroVis 2011), p. 1021–1030

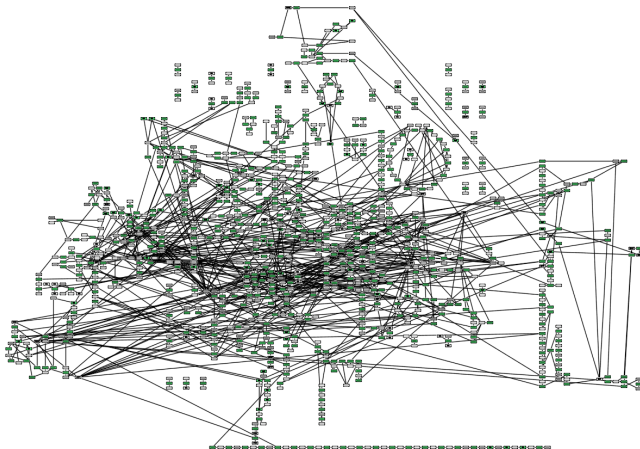


Etapas du pipeline

- 1 La décomposition du réseau en voies métaboliques est transformée en une **partition des éléments**
- 2 Un **graphe quotient** multi-niveaux est calculé à partir de la partition puis est **dessiné de manière ascendante**
- 3 Application d'une version dédiée de notre méthode de **regroupement d'arêtes** pour les router de manière "pseudo-orthogonale" et réduire l'occlusion

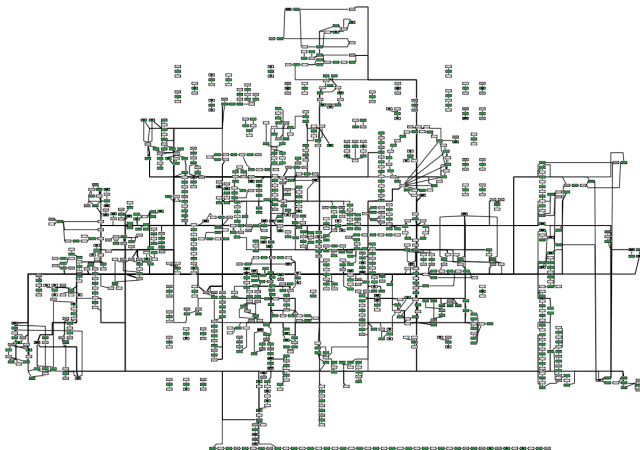
Dessin avant regroupement d'arêtes

- la représentation contient beaucoup d'occlusions du aux nombreux croisements d'arêtes
- les conventions de dessin biologique ne sont pas respectées pour les arêtes

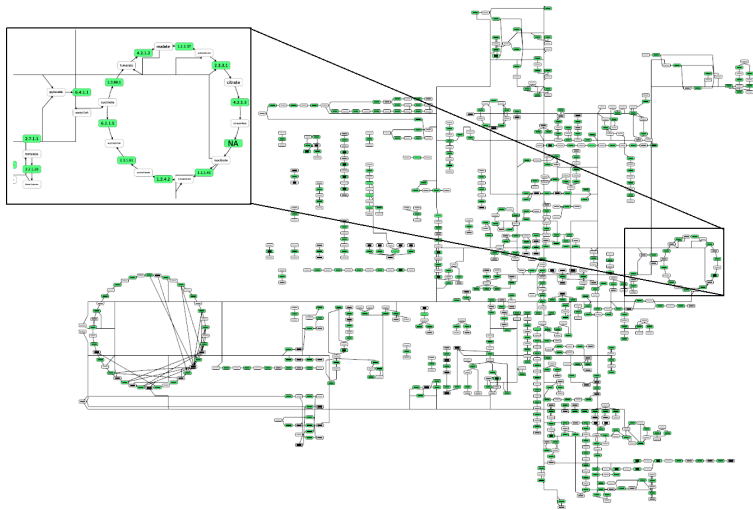


Dessin après regroupement d'arêtes

- Nous appliquons notre méthode de regroupement d'arêtes *Winding Roads*.
- Nous utilisons uniquement un quadtree pour générer la grille de routage

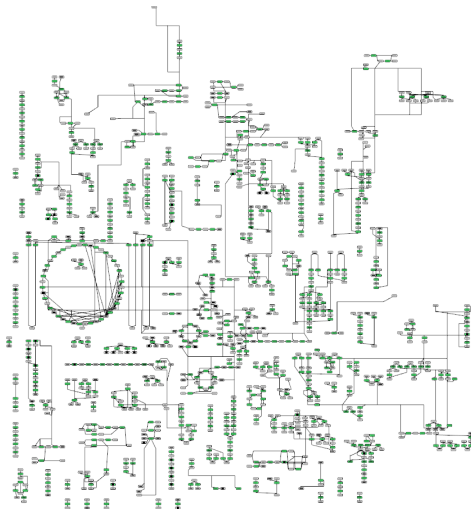


Résultats sur le réseau métabolique de la levure



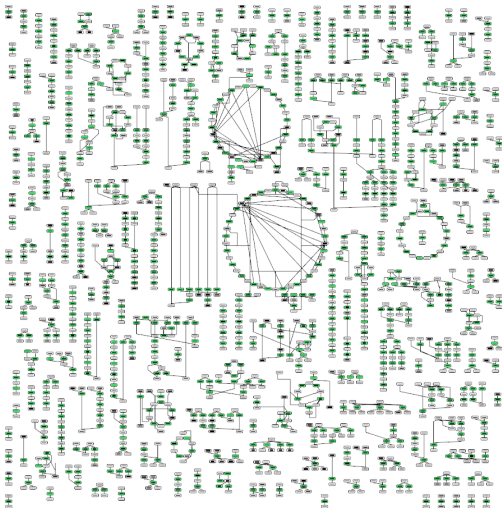
Réseau dessiné sans duplication de sommets garantissant la *Contrainte de proximité* sur la voie métabolique du cycle de Krebs (836 sommets/ 936 arêtes).

Résultats sur le réseau métabolique de la levure



Réseau dessiné après avoir dupliqué les éléments appartenant à plus de 3 voies métaboliques (1360 sommets/ 1430 arêtes).

Résultats sur le réseau métabolique de la levure

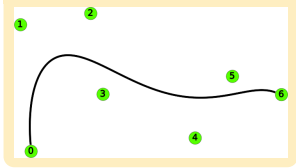


Réseau dessiné après avoir dupliqué les éléments appartenant à plus de 1 voies métabolique (1804 sommets/ 1723 arêtes).

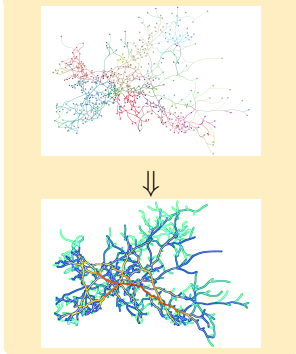
Deuxième partie : Infographie pour la visualisation interactive de graphes



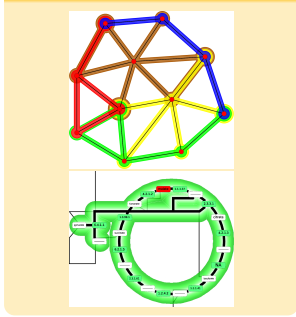
Rendu de courbes paramétriques au GPU



Edge splatting



Mise en évidence de sous-graphes



Interactions avec une visualisation de graphes

Visualisation interactive

- Un **dessin statique n'est pas suffisant** pour analyser un grand jeu de données
- Les utilisateurs ont **besoin de l'explorer et de manipuler les données** représentées de manière interactive

Techniques d'interaction

- Aident à **résoudre un ensemble de tâches** relatives à l'analyse d'un graphe
- Exemple de tâche :
 - basée sur la topologie : identification du voisinage d'un sommet
 - basée sur les attributs : recherche de sommets ayant une valeur particulière

Exemples de technique d'interaction

Interaction pour la navigation : *Zoom and Pan*

Jarke J. Van Wijk et Wim A. A. Nuij. "Smooth and efficient zooming and panning". Dans : *Proceedings of the IEEE Symposium on Information Visualization*. INFOVIS'03. IEEE Computer Society, 2003, p. 15–22

Exemples de technique d'interaction

Interactions Focus+Contexte

Fisheye

Loupe

Mise en évidence du
voisinage

Exemples de technique d'interaction

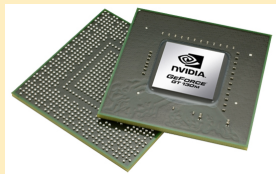
Interaction sur les données : exécution de scripts

Antoine Lambert et David Auber. *Graphs analysis and visualization with Tulip-Python*. Poster at the 5th European Conference for Scientists using Python (EuroSciPy 2012). 2012

Le processeur graphique (GPU)

Définition

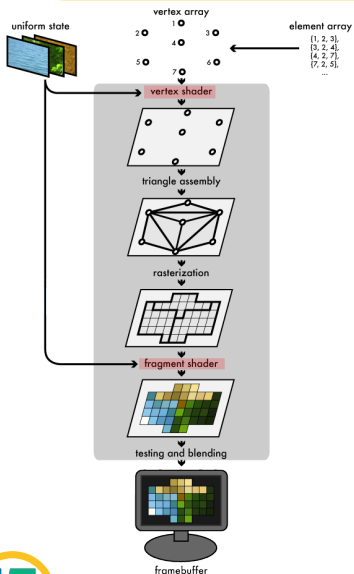
Circuit électronique spécialisé dédié au **traitement des données graphiques** et à la **génération rapide d'images**.



Propriétés

- exploitable via une API 3D : OpenGL ou Direct3D
- mode de **fonctionnement en pipeline** avec des étapes programmables
- **très grande puissance de calcul** vectoriel parallèle
- aussi utilisé comme **accélérateur de calcul non graphique** (GPGPU)

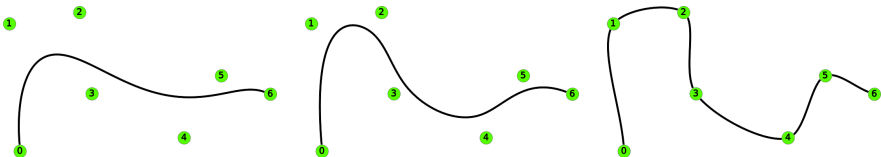
Pipeline de rendu graphique



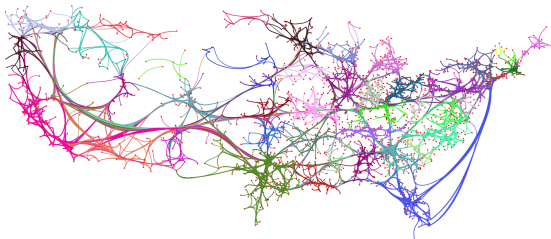
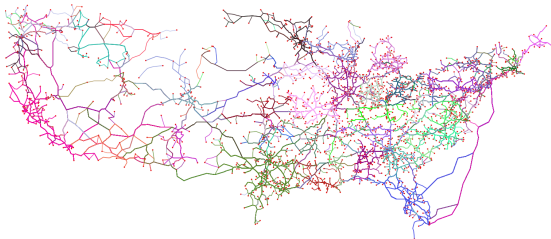
Étapes programmables

- **vertex shader** : traitement des sommets envoyés en amont du pipeline
 - projection des coordonnées des sommets de l'espace 3D vers l'espace écran
 - application de déformation (exemple : *fisheye*)
- **fragment shader** : traitement des pixels en aval du pipeline
 - calcul de la couleur de chaque pixel
 - application de textures
 - application d'algorithmes d'éclairage

Exploitation du processeur graphique pour le rendu de courbes paramétriques



Lissage d'arêtes par courbes paramétriques

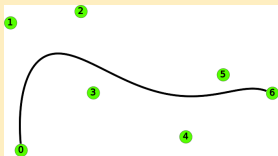


Courbes paramétriques

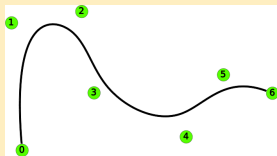
Définition

Une courbe paramétrique est définie par un ensemble de $n + 1$ points de contrôle $P = \{P_0, P_1, \dots, P_n\}$ et est analytiquement décrite par un polynôme $Q(t)$, $0 \leq t \leq 1$.

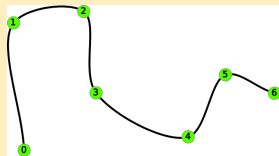
Exemples



courbe de Bézier



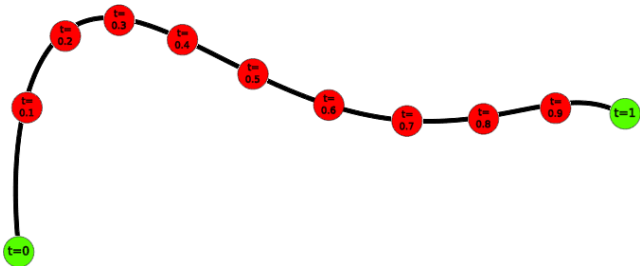
courbe B-Spline



courbe de Catmull-Rom

Exemple : courbe de Bézier

$$Q(t) = \sum_{i=0}^n B_{i,n}(t)P_i \text{ avec } B_{i,n}(t) = \binom{n}{i}(1-t)^{n-i}t^i$$



Rendu de courbes paramétriques

- **Evaluer le polynôme $Q(t)$ autant de fois que nécessaire** pour interpoler les points d'une courbe a un **côût de calcul élevé** qui augmente selon le nombre de points de contrôle
 - **Solution simple : précalculer les points de la courbe**
 - ⇒ acceptable pour les dessins statiques mais **nécessite une grande quantité de mémoire**
 - ⇒ non adaptée pour des animations de déformation de courbes
- ⇒ Pour **animer des déformations de courbes**, le calcul des points d'interpolation **nécessite une approche efficace**

Motivation : interactions fluides

Exemple : interaction Bring & Go

Rendu de courbes paramétriques au GPU

Principe

Délégation du calcul des points de la courbe au processeur graphique afin d'exploiter ses performances de calcul vectoriel.

Fonctionnement

Le calcul des points de la courbe sont réalisés par un *vertex shader* :

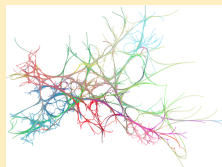
- Les points de contrôle sont transférés en mémoire vidéo
- Le paramètre t est envoyé dans la composante x des sommets en amont du pipeline
- Le *shader* calcule le point de la courbe associé au paramètre t
- Le point est envoyé vers les prochaines étapes du pipeline de rendu

Antoine Lambert, David Auber et Guy Melançon. "Living Flows : Enhanced Exploration of Edge-Bundled Graphs Based on GPU-Intensive Edge Rendering". Dans : *Information Visualisation (IV), 2010 14th International Conference*. IEEE Computer Society, 2010, p. 523–530

Performances

Dessin de graphe de test : sous-réseau européen des interconnexions entre aéroports internationaux en 2000 (433 sommets / 4343 arêtes)

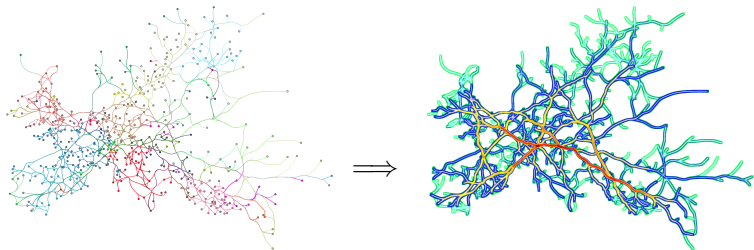
- arêtes rendues en courbes de Bézier
- nombre moyen de points de contrôle par arête : 30 (min = 3, max = 79)
- nombre de points interpolant une courbe : 200



Comparaison des performances : rendu GPU contre rendus CPU

		nombre d'images par seconde	occupation Mémoire (en Mo)
rendu GPU	ligne	18	3.74
	polygone	11	3.74
rendu CPU (sans mise en cache)	ligne	0.5	3.74
	polygone	0.4	3.74
rendu CPU (avec mise en cache)	ligne	18	15.26
	polygone	11	30.52

Edge splatting: visualisation de la densité des faisceaux d'arêtes

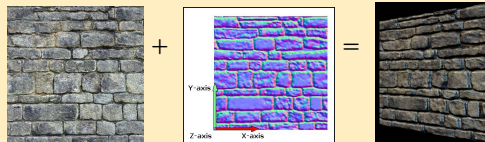


Edge splatting : introduction

Technique de rendu au GPU permettant de **distinguer les gros faisceaux d'arêtes des petits** dans une visualisation de graphe avec regroupement d'arêtes

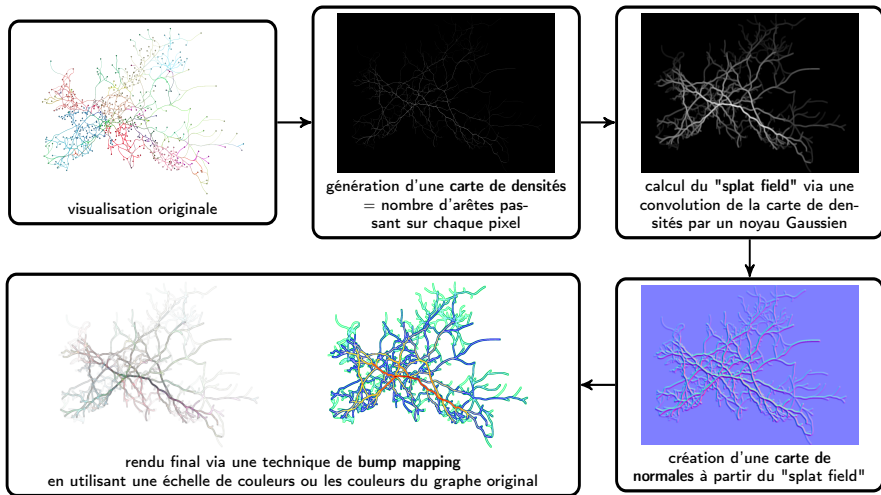
Principe

- on calcule un **splat field** = une image encodant les variations continues de la densité des faisceaux
- on rend ensuite ce **splat field** à l'écran comme une **carte de hauteurs** en utilisant une technique de **bump mapping**



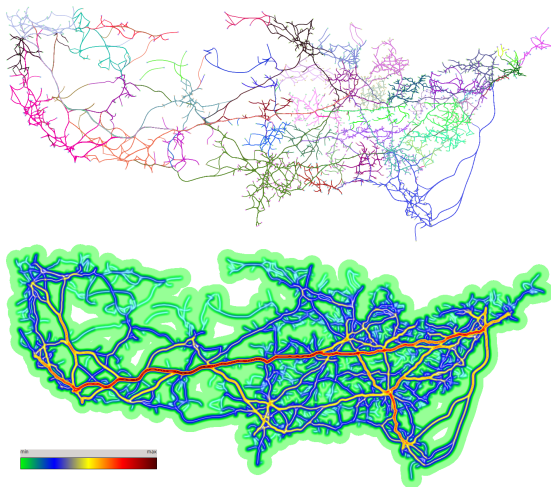
- De cette façon, les **faisceaux denses apparaîtront plus hauts** que les autres et ressortiront du dessin

Edge splatting : détails de la technique



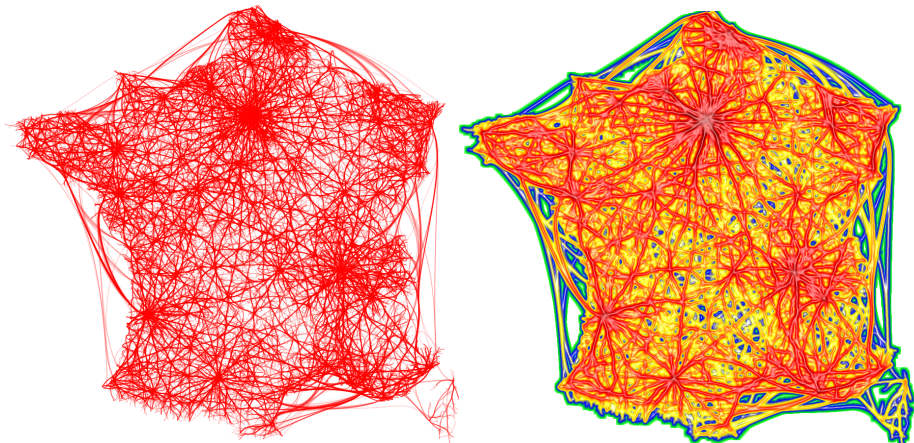
Edge splatting : exemple de résultat

Réseau de migrations entre états aux États Unis entre 1995 et 2000.



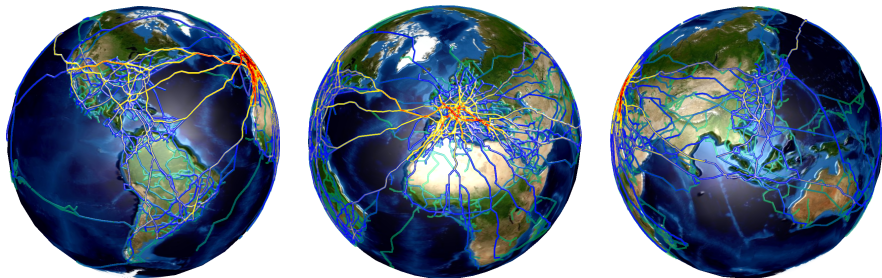
Edge splatting : exemple de résultat

Réseau de flux de travailleurs en France en 1975.

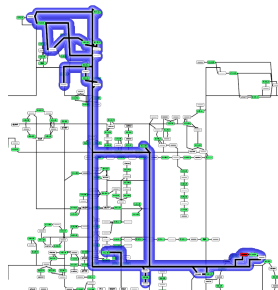
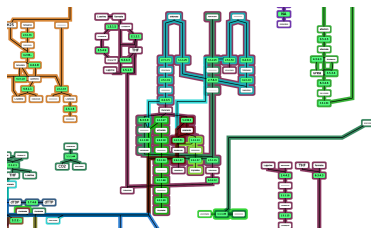


Edge splatting pour les dessins sphériques

Réseau d'interconnexions des aéroports internationaux en 2004.



Mise en évidence de sous-graphes dans le contexte globale



Mise en évidence de sous-graphes

Motivation

- Aider à l'**identification de sous-graphes d'intérêt** dans la représentation d'un graphe
- **Identifier des éléments partagés** entre plusieurs sous-graphes.

Techniques d'interaction proposées

- Utilisation d'**enveloppes concaves** pour entourer les sous-graphes
- Utilisation d'une **déformation 3D** pour mettre en exergue un sous-graphe

Utilisation d'enveloppes concaves

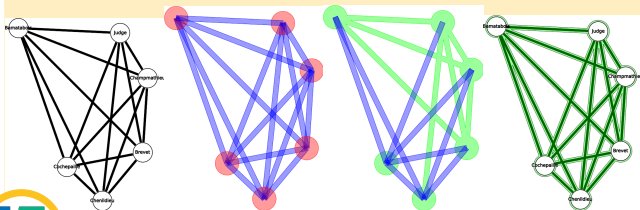
Méthode de génération d'enveloppe concave

Antoine Lambert, François Queyroi et Romain Bourqui. "Visualizing patterns in Node-link Diagrams". Dans : *Proceedings of the 16th International Conference on Information Visualisation. IV'12*. IEEE Computer Society, 2012, p. 48–53

Avantages de la méthode :

- calcul des enveloppes depuis l'espace topologique
- garantit que toutes les enveloppes seront distinguables dans le cas de sous-graphes chevauchants

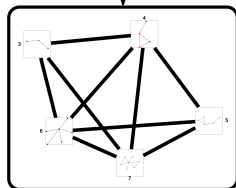
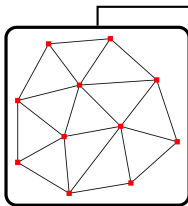
Génération d'enveloppe par union de polygones



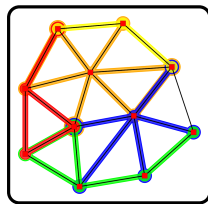
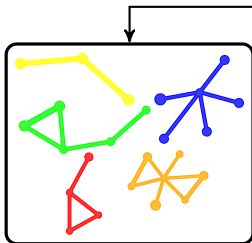
Bala R. Vatti. "A generic solution to polygon clipping". Dans : *Communications of the ACM* 35 (7 1992), p. 56–63

Pipeline de génération des enveloppes

graphe de dépendance et application d'une coloration dédiée



Calcul des enveloppes



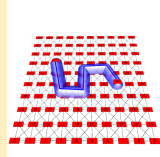
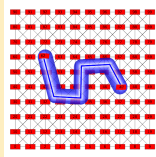
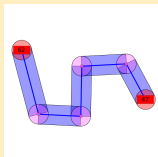
Résultat

Utilisation d'une déformation 3D

Déformation de la visualisation à l'échelle locale du sous-graphe à mettre en exergue.

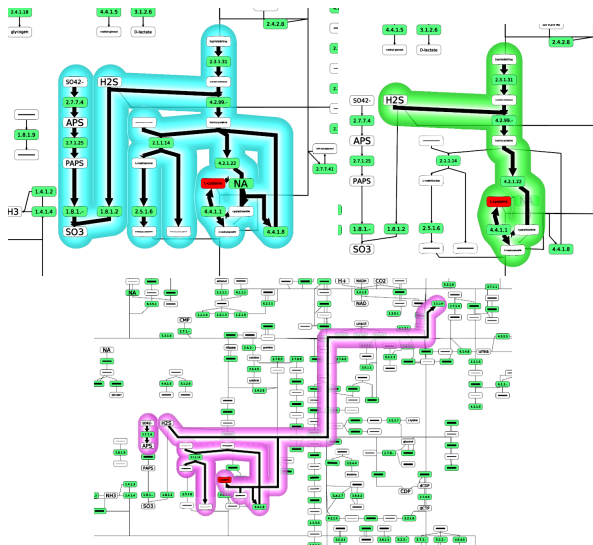
Fonctionnement

- Soit r le rayon de la déformation et Sk le squelette du sous-graphe
- Pour tous les sommets v des primitives géométriques utilisées pour représenter les éléments du réseau :
 - calculer $d = \text{distance}(v, Sk)$
 - si $d \leq r$ alors $v.z = f(d/r) * r$ avec $f(x) = 1 - x^2$
- rendu d'une surface + projection en perspective pour visualiser l'effet de déformation



Exemples d'application

Mise en évidence de voies métaboliques dans le dessin d'un réseau métabolique.

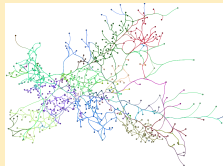


Conclusion et perspectives

Résumé des contributions

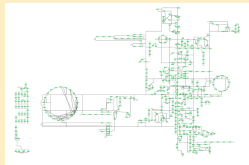
Winding Roads : algorithme de regroupement d'arêtes

- fonctionnement intuitif
- flexible en termes de réduction d'occlusions
- facilement implémentable et parallélisable



Méthode de dessin d'un réseau métabolique complet

- peut dessiner un réseau complet sans duplication de sommets
- prise en compte de la décomposition du réseau en voies métaboliques
- utilise une version dédiée de *Winding Roads*



Résumé des contributions

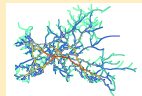
Rendu de courbes paramétriques au GPU

- méthode efficace déléguant le calcul des points interpolants une courbe au processeur graphique
- permet de mettre en place des animations de déformations de courbes fluides



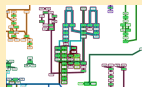
Edge splatting : visualisation de la densité des faisceaux d'arêtes

technique de rendu pour distinguer visuellement les gros faisceaux des petits



Mise en évidence de sous-graphes dans le contexte global

- utilisation d'enveloppes concaves avec garantie de visibilité dans le cas de sous-graphes chevauchants
- utilisation d'une déformation 3D pour clairement mettre en évidence un sous-graphe d'intérêt



Perspectives

Amélioration de l'algorithme *Winding Roads*

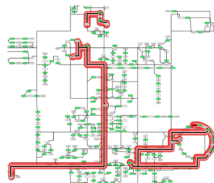
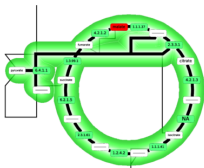
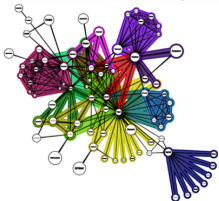
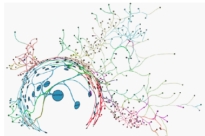
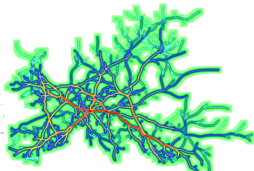
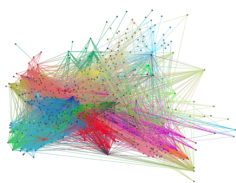
- prise en compte de la direction des arêtes
- séparation des arêtes dans un faisceau
- regroupement d'arêtes multi-niveaux

Représentation de réseaux métaboliques

- prise en compte d'un autre niveau de décomposition : les compartiments cellulaires
- utilisation du standard de dessin biologique : *Systems Biology Graphical Notation* (SBGN)

Mise en évidence de sous-graphes

Réalisation d'une évaluation empirique pour comparer les différentes techniques de visualisation d'ensembles chevauchants dans une visualisation de graphe.



Merci pour votre attention

Première étape : calcul de la grille

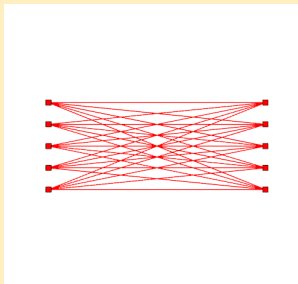
Principe

Calculer une discrétisation du plan en utilisant les positions des sommets

Approches expérimentées

Un compromis doit être trouvé entre :

- la **précision de la grille**, afin de pouvoir router les arêtes dans des régions denses
- la **taille de la grille**, car une grille trop grande rendrait le calcul des plus courts chemins trop coûteux



Première étape : calcul de la grille

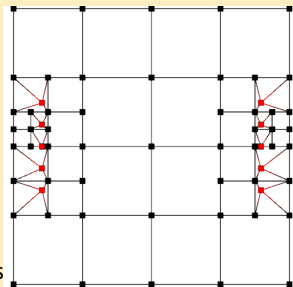
Principe

Calculer une discrétisation du plan en utilisant les positions des sommets

Approches expérimentées

Première approche : Utilisation d'un **quad tree**

- On décompose le plan en 4 parties, on applique ce procédé récursivement jusqu'à ce qu'une cellule contienne au plus un sommet
- Avantage : calcul de la grille rapide
- Inconvénients :
 - peut générer une très grosse grille
 - les arêtes seront uniquement routées sur des chemins horizontaux et verticaux



Première étape : calcul de la grille

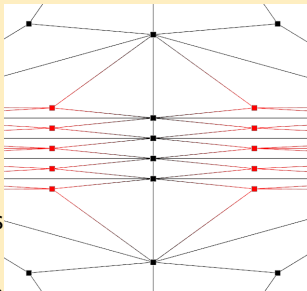
Principe

Calculer une discrétisation du plan en utilisant les positions des sommets

Approches expérimentées

Seconde approche : Utilisation d'un **diagramme de Voronoï**

- On décompose le plan en cellules à partir d'un ensemble de points (positions des sommets du graphe)
- Avantages : calcul de grille rapide et grille de petite taille
- Inconvénient : de larges cellules sont générées pour les régions peu denses, pouvant induire de grands détours lorsque l'on route une arête



Première étape : calcul de la grille

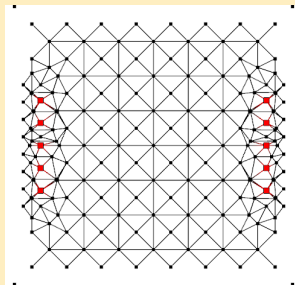
Principe

Calculer une discrétisation du plan en utilisant les positions des sommets

Approches expérimentées

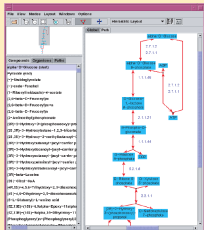
Approche retenue : **Combinaison quad tree / Voronoï**

- 1 Génération d'un quad tree suivant un certain paramétrage
- 2 Calcul du diagramme de Voronoï à partir de l'ensemble des points défini par les centres des cellules du quad tree et les positions des sommets

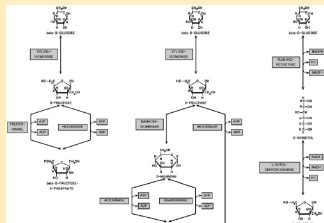


Représentation du métabolisme : état de l'art

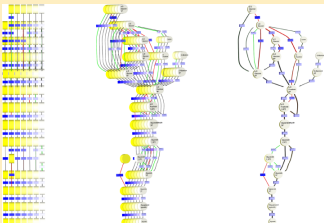
Dessin de voies métaboliques : approches hiérarchiques



[1]



[2]



[3]

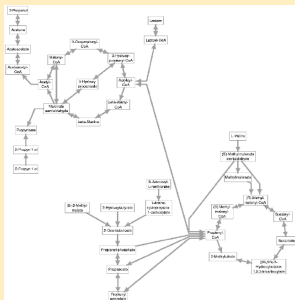
[1] M. Sirava et al. "BioMiner - modeling, analyzing, and visualizing biochemical pathways and networks". Dans : *Bioinformatics* 18 (2002), S219–S230

[2] Falk Schreiber. "Comparison of metabolic pathways using constraint graph drawing". Dans : *APBC 03 : Proceedings of the First Asia-Pacific bioinformatics conference on Bioinformatics*. Australian Computer Society, Inc., 2003, p. 105–110

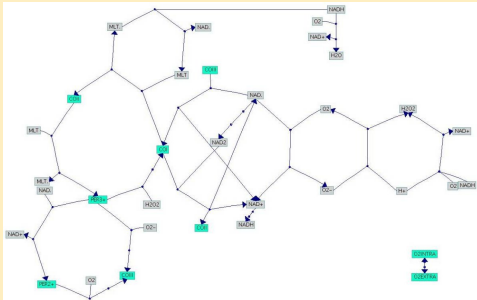
[3] U. Brandes, T. Dwyer et F. Schreiber. "Visualizing Related Metabolic Pathways in Two and Half Dimensions". Dans : *Proceedings of the International Symposium on Graph Drawing*. GD'03. 2004, p. 110–122

Représentation du métabolisme : état de l'art

Dessin de voies métaboliques respectant les conventions biologiques



[1]



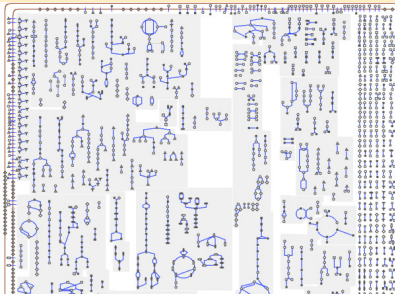
[2]

[1] Moritz Becker et Isabel Rojas. "A Graph Layout Algorithm for Drawing Metabolic Pathways". Dans : *Bioinformatics* 17 (2001), p. 461–467

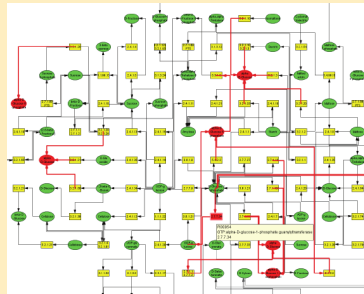
[2] Katja Wegner et Ursula Kummer. "A new dynamical layout algorithm for complex biochemical reaction networks". Dans : *BMC Bioinformatics* 6 (2005), p. 212

Représentation du métabolisme : état de l'art

Dessin de réseaux métaboliques avec duplication de sommets



[1]



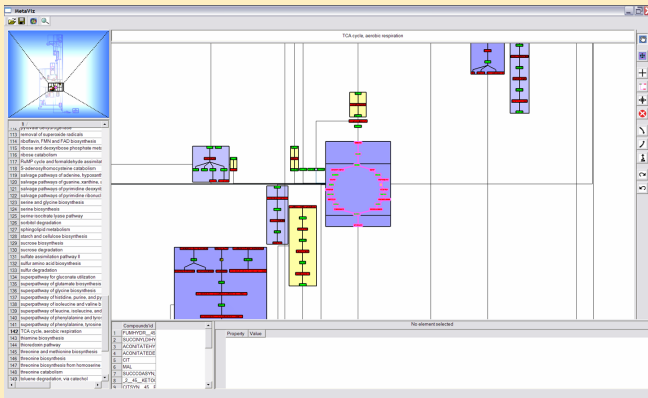
[2]

[1] Suzanne Pailey et Peter Karp. "The Pathway Tools cellular overview diagram and Omics Viewer". Dans : *Nucleic Acids Research* 34.13 (2006), p. 3771–3778

[2] M. Rohrschneider et al. "A Novel Grid-Based Visualization Approach for Metabolic Networks with Advanced Focus&Context View". Dans : *Proceedings of the International Symposium on Graph Drawing*. GD'09. 2010, n. 268–279

Représentation du métabolisme : état de l'art

Dessin de réseaux métaboliques sans duplication de sommets



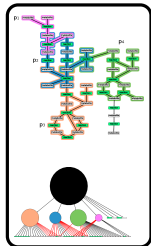
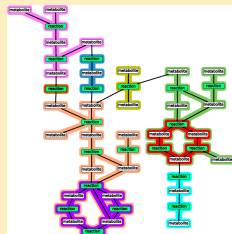
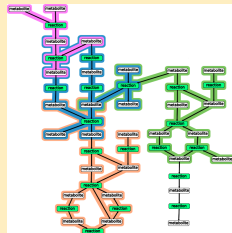
R. Bourqui et al. "Metabolic network visualization eliminating node redundancy and preserving metabolic pathways". Dans : *BMC Systems Biology* 1 (2007), p. 29

Partitionnement du réseau

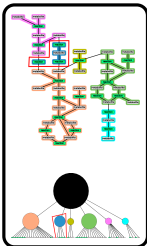
Processus de partitionnement (adapté de [1])

- 1 Calcul d'un ensemble maximal de voies indépendantes
- 2 Calcul des composantes connexes
- 3 Détection de structures topologiques

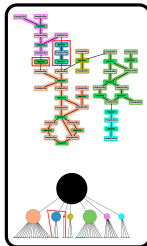
[1] R. Bourqui et al. "Metabolic network visualization eliminating node redundancy and preserving metabolic pathways". Dans : *BMC Systems Biology* 1 (2007), p. 29



voies indépendantes



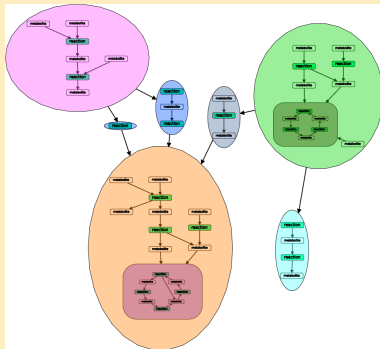
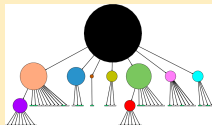
composantes connexes



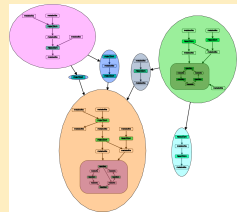
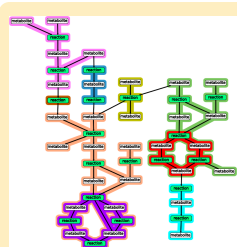
structures topologiques

Dessin du réseau

1) Construction d'un graphe quotient multi-niveaux



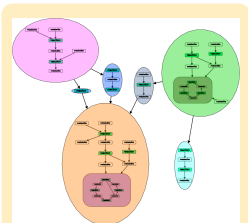
- Chaque groupe de la partition est représenté par un méta-sommet
- Deux méta-sommet sont reliés par une méta-arête si il existe au moins une arête entre les deux groupes correspondants



Dessin du réseau

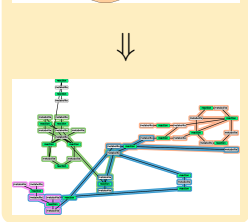
2) Dessin des plus bas niveaux de la hiérarchie

- Les dessins des cycles de réactions sont calculés en utilisant un algorithme de dessin circulaire
- Les autres groupes sont dessinés en utilisant un algorithme de dessin hiérarchique



3) Dessin du graphe quotient de plus haut niveau

- La taille d'un méta-sommet est changée à la boîte englobante du dessin du groupe sous-jacent
- Le graphe quotient est ensuite dessiné en utilisant une méthode par modèle de forces adaptée de GEM
- Pour obtenir un dessin plus compact, des rotations sont effectuées sur les méta-sommets et quatre configurations sont testées.
- La configuration qui minimise la longueur d'arête moyenne est retenue



Relaxation de la contrainte de duplication

- Pour les réseaux denses, éviter de dupliquer des sommets peut mener à des représentations trop complexes et peu lisibles
- Pour pallier à ces problèmes, nous proposons de relaxer la contrainte de duplication selon deux niveaux
 - **Voie métabolique** : un sommet métabolite est dupliqué si il est impliqué dans plus de n réactions
 - **Réseau** : un sommet métabolite/réaction est dupliqué si il est contenu dans plus de n voies métaboliques