

Algoritmi per la visualizzazione

Prof.ssa Tiziana Calamoneri
VISUALIZZAZIONE DI
STRUTTURE MOLECOLARI

Visualizzazione di strutture molecolari (1)

- SCOPO: visualizzare un sistema di corpi tra cui agiscono delle forze.
- IDEA: cercare una configurazione dei corpi che minimizzi l'energia locale, cioè tale che la somma delle forze agente su ogni punto sia 0
- VISUALIZZAZIONE di uno stato di equilibrio

Prof.ssa Tiziana Calamoneri
Algoritmi per la visualizzazione

2

Visualizzazione di strutture molecolari (2)

- Tecniche usate anche al di fuori della rappresentazione delle strutture molecolari, perché si prestano per visualizzare qualunque grafo (che scaturisca da un modello fisico o no).
- Molti gli algoritmi basati sul modello delle forze, tutti costituiti da due parti fondamentali:
 - **modello**: un sistema di forze che fornisce il modello fisico del grafo
 - **algoritmo**: tecnica per trovare uno stato di equilibrio

Algoritmi basati sulla ricerca del punto di minimo delle forze di interazione

Prof.ssa Tiziana Calamoneri
Algoritmi per la visualizzazione

3

Algoritmi basati sulla ricerca del minimo delle forze (1)

PRIMO METODO

- archi del grafo: molle
- nodi del grafo: cariche elettriche con la stessa carica.

Su ogni nodo v agiscono le seguenti forze (grassetto = vettori):

- \mathbf{f}_{uv} = forza della molla dell'arco (u, v) per ogni u t.c. $(u, v) \in E$
- \mathbf{g}_{uv} = forza elettrica tra u e v per ogni $u \in V$

N.B. $\mathbf{f}_{uv} = k(\mathbf{d}(u, v) - l_{uv})$ - legge di Hooke

$\mathbf{g}_{uv} = k'(1/d(u, v)^2)$ - legge di Coulomb (k' contiene anche la quantità di carica)

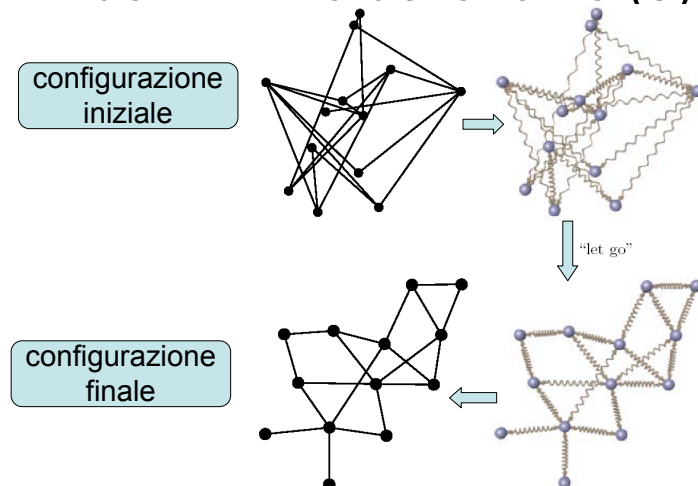
$$\vec{F}(v) = \sum_{u \in V} \vec{g}_{uv} + \sum_{(u, v) \in E} \vec{f}_{uv}$$

Algoritmi basati sulla ricerca del minimo delle forze (2)

PRIMO METODO (segue)

- Una volta definito il sistema di forze, bisogna cercare lo stato di equilibrio del sistema, cioè bisogna porre $\mathbf{F}(v) = \mathbf{0}$.
- Numerose tecniche numeriche per farlo. La più semplice:
 - posizionare a caso i nodi sul piano,
 - calcolare per ciascuno la forza a cui sono soggetti
 - muovere ogni nodo nella direzione della forza di una distanza proporzionale alla forza esercitata.
- Questo metodo non è il più veloce ma, con un tool di animazione, permette di seguire gli spostamenti dei nodi nel modo più intuitivo

Algoritmi basati sulla ricerca del minimo delle forze (3)



Algoritmi basati sulla ricerca del minimo delle forze (4)

PRIMO METODO (segue)

- Risultati molto buoni riguardo ai criteri estetici, grazie alle proprietà degli stati di equilibrio delle forze che abbiamo messo in gioco:
 - i nodi sono distribuiti uniformemente nell'area del disegno perché la forza della molla garantisce che la distanza tra u e v tenda ad essere quella relativa alla molla a riposo – quindi non troppo grande, e la forza elettrica garantisce che i nodi non si avvicinino mai troppo.
 - l'esperienza mostra che, se ci sono simmetrie nel grafo, esse vengono evidenziate.

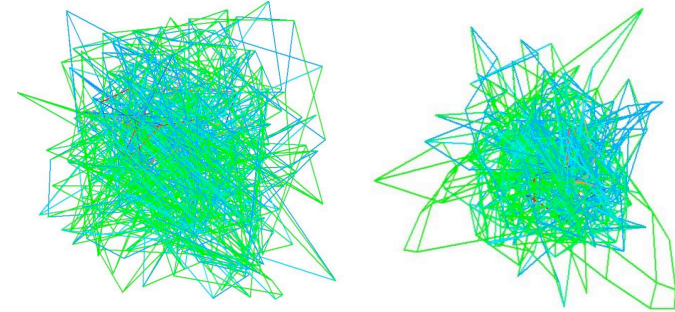
Algoritmi basati sulla ricerca del minimo delle forze (5)

PRIMO METODO (segue)

- Tuttavia, questo metodo **non garantisce** di giungere ad un **punto di equilibrio** in un certo numero di passi, e quindi non si può stimare il suo tempo di esecuzione
- non viene garantita la **convergenza**: ci sono situazioni in cui un nodo “rimbalza” attorno ad un punto per un tempo infinito, senza arrivare mai ad una situazione di equilibrio (che, per esempio, si trova ad una distanza minore rispetto allo spostamento fissato).
- Per evitare tale situazione si **tronca l'algoritmo** dopo un certo tempo fissato. Questo non garantisce di arrivare ad un punto di equilibrio esatto, ma ragionevolmente vicino.

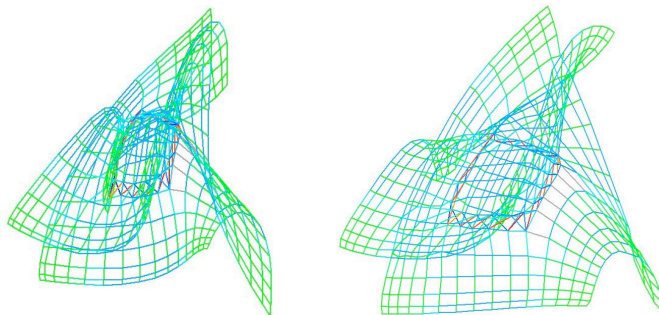
Algoritmi basati sulla ricerca del minimo delle forze (6)

Un esempio



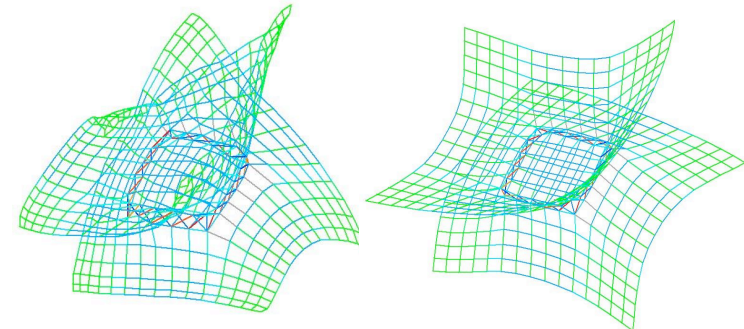
Algoritmi basati sulla ricerca del minimo delle forze (7)

Un esempio (segue)



Algoritmi basati sulla ricerca del minimo delle forze (8)

Un esempio (segue)



Algoritmi basati sulla ricerca del minimo delle forze (9)

SECONDO METODO [Tutte '60]

- * Può essere visto come caso particolare del metodo precedente.
- * **archi del grafo**: molle con lunghezza a riposo nulla ($l_{uv}=0$). Parametro della molla=1
- * **nodi del grafo**: cariche elettriche nulle.

$$\vec{F}(v) = \sum_{(u,v) \in E} \vec{d}(u,v)$$

Tra le soluzioni di equilibrio compare anche quella banale in cui tutti i nodi sono nell'origine...

Algoritmi basati sulla ricerca del minimo delle forze (10)

SECONDO METODO (segue)

...la soluzione nulla genera un disegno degenere.

- Per evitare questa soluzione:
 - insieme V dei nodi partizionato in un insieme V_1 di nodi detti **fissi**, e un altro insieme V_2 di nodi detti **liberi**.
 - E' come se i nodi fissi fossero inchiodati al piano, per cui le forze delle molle non hanno effetto su di loro.
 - Di solito essi vengono posti sui vertici di un poligono convesso e si pone $|V_1| \geq 3$.

Algoritmi basati sulla ricerca del minimo delle forze (11)

SECONDO METODO (segue)

Risolviamo l'insieme delle equazioni:

$$\vec{F}(v) = \sum_{(u,v) \in E} \vec{d}(u,v) = 0$$

Proiettiamo sugli assi cartesiani:

$$F_x(v) = \sum_{(u,v) \in E} (x(u) - x(v)) = 0$$

$$F_y(v) = \sum_{(u,v) \in E} (y(u) - y(v)) = 0$$

La prima diventa:

$$F_x(v) = \sum_{(u,v) \in E} x(u) - \deg(v)x(v) = 0$$

$$x(v) = \frac{\sum_{(u,v) \in E} x(u)}{\deg(v)}$$

$$y(v) = \frac{\sum_{(u,v) \in E} y(u)}{\deg(v)}$$

metodo del baricentro

Algoritmi basati sulla ricerca del minimo delle forze (12)

SECONDO METODO (segue)

Le equazioni sono lineari, sono n ed hanno n incognite:

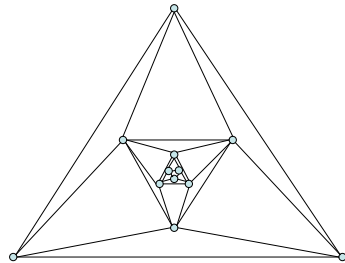
- $O(n^2)$ tempo (metodi di analisi num.)
- se G planare $O(n^{1.5})$ tempo [Lipton, Rose, Tarjan '79]

PROPRIETA': se il grafo in input è planare e 3-connesso, il disegno in output è piano e convesso, cioè ogni faccia è un poligono convesso [Tutte '60]

Algoritmi basati sulla ricerca del minimo delle forze (13)

SECONDO METODO (segue)

PROBLEMA del metodo del baricentro: produce disegni a bassa risoluzione



questa è una caratteristica di questo metodo: Eades e Garvan hanno mostrato che, per ogni $n > 1$ esiste un grafo per cui il metodo del baricentro produce un disegno di area esponenziale.

Generalizzazioni

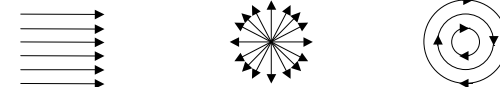
Generalizzazioni (1)

Gli algoritmi appena visti funzionano bene per certi aspetti, ma male per altri. In particolare, difficilmente i loro output tengono conto di convenzioni e criteri estetici. Per cercare di ovviare a questi problemi sono state proposte alcune generalizzazioni.

Generalizzazioni (2)

Generalizzazione di Sugiyama e Misue '95

- alcune o tutte le molle sono magnetizzate
- c'è un campo magnetico che agisce su di esse
- Il campo magnetico può essere usato per controllare l'orientamento degli archi e, quindi, per modellare e gestire dei criteri estetici.



Generalizzazioni (3)

Generalizzazione di Sugiyama e Misue (segue)

- Le molle possono essere magnetizzate in diversi modi:
 - unidirezionalmente (tendono ad allinearsi con il campo)
 - bidirezionalmente (come prima, ma in uno qualunque dei due versi)
 - nessuna magnetizzazione (il campo non influisce).
- Il campo magnetico induce sulle molle magnetizzate una forza rotazionale che si combina con le forze delle molle e con le forze elettriche

Generalizzazioni (4)

Generalizzazione di Sugiyama e Misue (segue)

- Magnetizzando le molle in modo unidirezionale, otteniamo un disegno **upward** (downward, leftward o rightward) se il campo è **parallelo**, outward se il campo è radiale, **antiorario** se il campo è **concentrico**.
- I campi magnetici possono essere combinati tra loro, e a seconda del campo magnetico in cui il modello viene immerso, si forza una certa convenzione:
Esempio:
campo orizzontale+verticale \Rightarrow disegno ortogonale.

Generalizzazioni (5)

Generalizzazione di Davidson e Harel '96

- PROBLEMA:** Nei metodi descritti, la funzione di energia è una funzione semplice e continua delle coordinate dei nodi. Tuttavia, molti criteri estetici (come il numero di incroci) non sono continui. Includendo funzioni di energia discrete, è possibile allargare la classe dei criteri estetici da considerare.
- SOLUZIONE:** Definiamo su tutto il disegno una funzione energia che sia combinazione lineare di misure, che rappresentano i vari criteri estetici:

$$\vec{F}(v) = l_1 \vec{F}_1(v) + l_2 \vec{F}_2(v) + \dots + l_k \vec{F}_k(v)$$

Generalizzazioni (6)

Generalizzazione di Davidson e Harel (segue)

$$\vec{F}(v) = l_1 \vec{F}_1(v) + l_2 \vec{F}_2(v) + \dots + l_k \vec{F}_k(v)$$

- forze=misure dei vari criteri estetici
- l_i costanti che indicano il peso del criterio estetico
- forza risultante=grado di "bruttezza" del disegno: più il suo modulo è grande e meno i criteri sono soddisfatti.

$$\vec{F}_1 = \sum_{u,v \in V} \frac{1}{d(u,v)^2} \quad \vec{F}_2 = \sum_{u \in V} \left(\frac{1}{s(u)^2} + \frac{1}{d(u)^2} + \frac{1}{a(u)^2} + \frac{1}{b(u)^2} \right) \quad \vec{F}_3 = \sum_{(u,v) \in E} \overrightarrow{d(u,v)}^2$$

repulsione elettrica:
impedisce ai nodi di essere troppo vicini

$s(u)$, $d(u)$, $a(u)$, $b(u)$ =dist. di u dai lati del disegno: impedisce che i nodi siano troppo vicini ai bordi

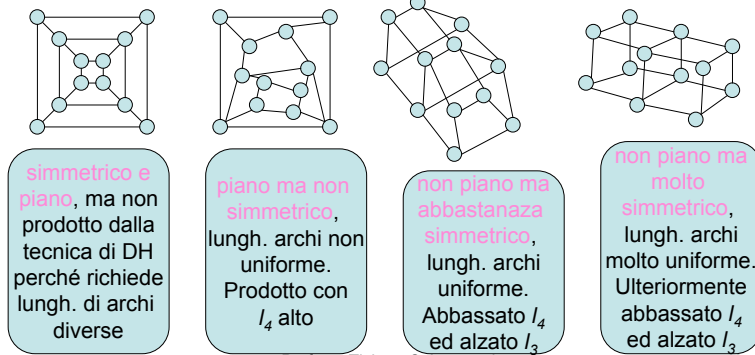
impedisce che gli archi diventino troppo lunghi

F_4 (scalare): # di incroci

Generalizzazioni (7)

Generalizzazione di Davidson e Harel (segue)

Modificando i valori di l_i si predilige un criterio estetico o un altro



Prof.ssa Tiziana Calamoneri
Algoritmi per la visualizzazione

25

Generalizzazioni (8)

Generalizzazione di Davidson e Harel (segue)

PROBLEMA: questo metodo è computazionalmente dispendioso: il sist. di equazioni va minimizzato e non più risolto!

SOLUZIONE: tecniche come il SIMULATED ANNEALING (meccanica statistica, anni '80)

- simile al greedy
- diverso perché consente mosse "uphill"
- punto di forza: capacità di gestire l'ottimizzazione in uno spazio discreto troppo grande per la ricerca esaustiva
- punto di debolezza: molto lento (DH ok solo per grafi tra 30 e 50 nodi). Se più nodi, bisogna partire da una sol. già buona

Prof.ssa Tiziana Calamoneri
Algoritmi per la visualizzazione

26

Generalizzazioni (8)

Generalizzazione di Davidson e Harel - SIMULATED ANNEALING (segue)

Il simulated annealing è basato sul processo fisico di raffreddare i liquidi molto lentamente (annealing) per raggiungere la forma cristallina, cioè quella con minimo energetico.

- Un raffreddamento rapido non conduce alla cristallizzazione, e quindi neanche al minimo dell'energia;
- un raffreddamento lento porta a raggiungere un equilibrio termico ad ogni temperatura
- il sistema obbedisce alla distribuzione di Boltzman:

$$p(E) \approx e^{-E/(kT)}$$

$p(E)$ è la distribuzione di probabilità dei valori di energia, come funzione della temperatura e della costante di Boltzman k .

Prof.ssa Tiziana Calamoneri
Algoritmi per la visualizzazione

27

Generalizzazioni (9)

Generalizzazione di Davidson e Harel - SIMULATED ANNEALING (segue)

Il processo fisico dell'ANNEALING può essere simulato con una serie di passi sequenziali:

- si parte da una configurazione arbitraria dei nodi;
 - ad ogni fissata temperatura T_i , si impongono il raggiungimento dell'equilibrio termico, portandosi in uno stato ad energia minima: il sistema si sposta da uno stato con energia E_1 ad uno stato con energia E_2 con probabilità $e^{-(E_2-E_1)/(kT)}$. Cioè, se $E_2 < E_1$ il sistema si sposta, altrimenti il passaggio è probabilistico; nel caso dell'algoritmo di DH E è la funzione di energia da essi determinata, ed il numero di iterazioni richieste per raggiungere il minimo energetico (o una sua buona approssimazione) è circa 30 per ogni temperatura fissata;
 - la funzione di raffreddamento è definita dalla seguente formula: $T_{p+1} = g T_p$, dove g appartiene all'intervallo $[0.6, 0.95]$.
- La complessità computazionale dell'algoritmo è $O(n^2m)$.

Prof.ssa Tiziana Calamoneri
Algoritmi per la visualizzazione

28

Generalizzazioni (10)

- NUOVO PROBLEMA: nodi non puntiformi ma di altre forme (ad es. rettangolari)
 - In un disegno qualunque si presentano molte intersezioni nodo-nodo e nodo-arco
1. nodi puntiformi
 2. nodi rettangolari (stesso grafo)
 3. disegno scalato



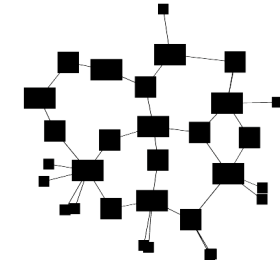
Prof.ssa Tiziana Calamoneri
Algoritmi per la visualizzazione

29

Generalizzazioni (11)

La scalatura non basta:

- si spreca spazio
- non è sufficiente!



...si ottiene tramite i metodi basati sulle forze!
ATTENZIONE: le forze vanno ridefinite (*campi ellittici*)

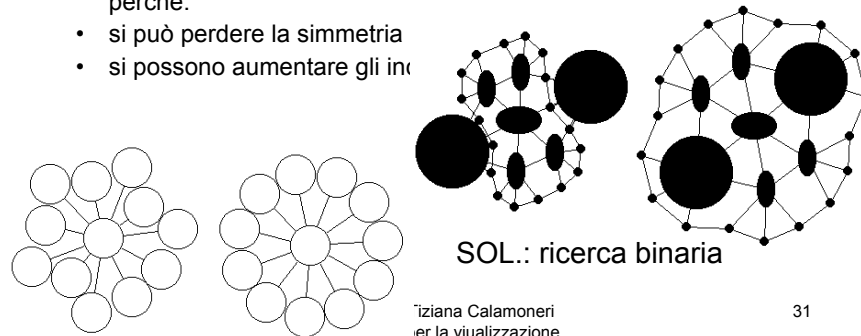
Prof.ssa Tiziana Calamoneri
Algoritmi per la visualizzazione

30

Generalizzazioni (12)

N.B. nel caso in cui i nodi siano puntiformi, ottenere un disegno con gli archi abbastanza corti è auspicabile per non avere sprechi di spazio. Nel caso in cui, invece, i nodi, siano dotati di area non nulla, non ha sempre senso minimizzare la lunghezza degli archi, perché:

- si può perdere la simmetria
- si possono aumentare gli inc



SOL.: ricerca binaria

Tiziana Calamoneri
per la visualizzazione

31

Vincoli

Vincoli (1)

Altra modifica all'idea di base: introdurre dei **vincoli**. I più comuni:

Fissare alcuni nodi su dei punti:

- Semplice generalizzare i metodi numerici affinché rispettino il vincolo che un nodo rimanga entro certi spazi (basta limitarne i movimenti).

Fissare la posizione relativa di alcuni punti:

- Bloccare dei nodi = assegnare un prefissato sottodisegno ad un certo sottografo;
 - metodo del baricentro (insieme di punti fissati): caso particolare di questo vincolo
 - il sottodisegno va trattato come un corpo rigido a cui siano applicate le forze; sottodisegno ruotato o traslato, ma non dilatato.

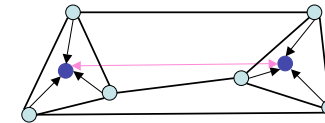
Vincoli (2)

Fissare un arco su una retta:

- Obbligare un certo arco a giacere su una retta=campo magnetico omogeneo nella direzione di quella retta.

Clusterizzare un insieme di nodi:

- per ogni insieme C di nodi da clusterizzare, si aggiunga un nodo ausiliario v_c che funga da "attrattore";
- si aggiungano delle forze attrattive tra v_c e ciascun nodo di C ;
- si aggiungano forze repulsive tra coppie di attrattori e tra attrattori e nodi di cluster diversi.



Conclusioni

Pro:

- * semplice da implementare
- * facile trovare euristiche migliorative
- * evoluzione continua del disegno (animazione)
- * estendibile al 3D in modo naturale
- * funziona bene, specie per grafi piccoli con struttura regolare
- * relativa capacità di soddisfare vincoli

Contro:

- * tempo di esecuzione lento
- * pochi risultati teorici sulla qualità del disegno
- * difficile da estendere al disegno ortogonale e polyline
- * relativa incapacità di soddisfare i vincoli