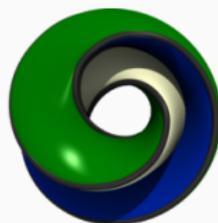


Une introduction à l'analyse topologique de données avec TTK

Pierre Guillou

Fontainebleau, 18 octobre 2021

CNRS & Sorbonne Université



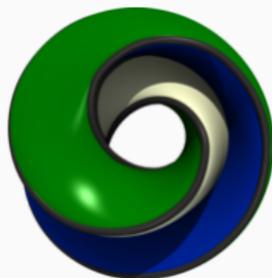
ERC-2019-COG TORI (ref. 863464, <https://erc-tori.github.io>)

TTK : The Topology ToolKit

The Topology Toolkit (TTK)

Une bibliothèque pour l'analyse topologique de données

- <http://topology-tool-kit.github.io>
- open-source, licence BSD
- ~125k lignes de C++, 5k commits
- ParaView, APIs : VTK C++, Python, C++
- 16 institutions contributrices
- paquets Ubuntu & installateurs Windows
- érosion, dilatation, ouverture, fermeture
- v1.0 imminente!
- TTK \subset ParaView 5.10!



Julien TIERNY et al. « The Topology ToolKit ». In : *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics (Proc. of IEEE VIS)* (2017).

<https://topology-tool-kit.github.io/>, Talha BIN MASOOD et al. « An Overview of the Topology ToolKit ». In : *TopoInVis*. 2019

The screenshot displays the ParaView (TTK 0.9.10) interface. The main window shows a 3D visualization of a surface with blue and green points. A central dialog box titled "About TTK ParaView" is open, displaying the TTK logo and version information (0.9.10, Version 3.8.0). The dialog also includes client information and connection details.

On the right side, two plots are visible:

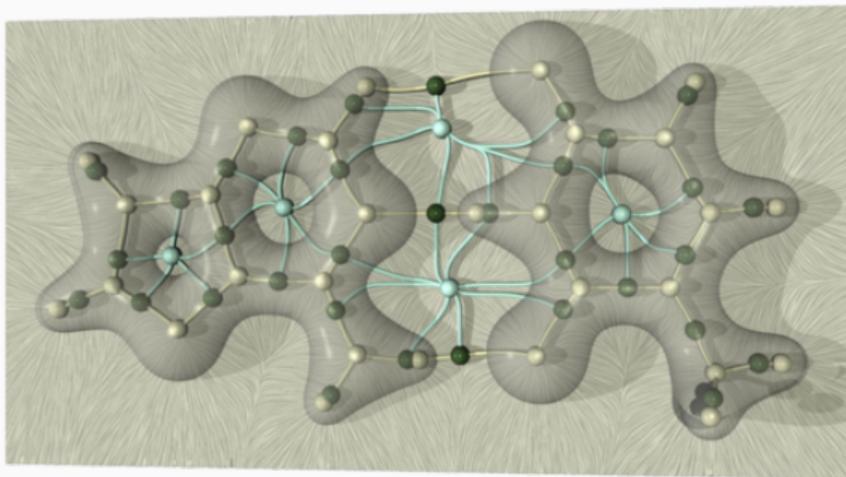
- PersistenceCurves:** A line graph showing the "Number of Paths (all pairs)" on the y-axis (log scale from 1 to 1000) versus "Persistence" on the x-axis (log scale from 1e-6 to 1). The curve starts at 1000 and decreases as persistence increases.
- PersistenceDiagram:** A scatter plot showing the relationship between birth and death times. The x-axis is labeled "birth" and the y-axis is labeled "Death". The plot shows a diagonal line with several points above it, representing persistent features.

The left sidebar shows the Pipeline Browser with a list of filters and the Properties panel for the selected filter.

- 1 TTK : The Topology ToolKit
- 2 Introduction à l'analyse topologique de données
- 3 Application : analyse d'ensembles
- 4 Application : quadrangulation de surface
- 5 Application : segmentation d'image
- 6 Conclusion

Introduction à l'analyse topologique de données

Analyse topologique de données (TDA)

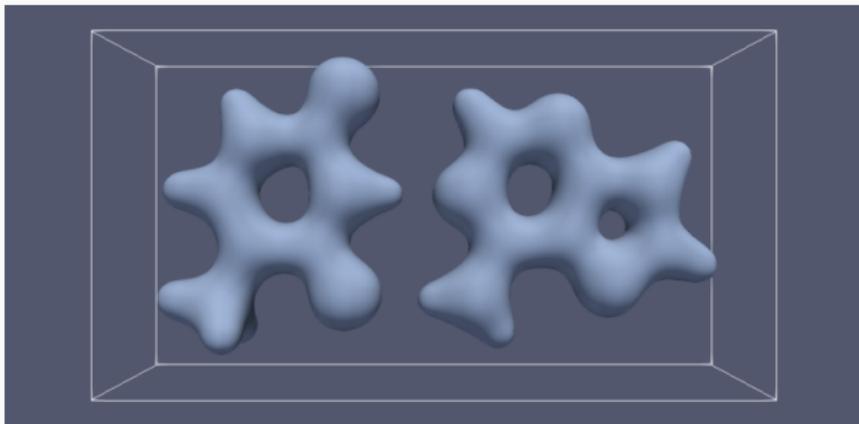


© Jules Vidal, « A Progressive Approach to Scalar Field Topology »

- champs scalaires définis sur des maillages (grilles régulières ou non structurées)
- caractéristiques topologiques : pics, vallées, cycles, bruit
- génération de signatures légères pour la réduction de données
 - diagrammes de persistance, arbres de contour, ...

Jeu de données d'exemple

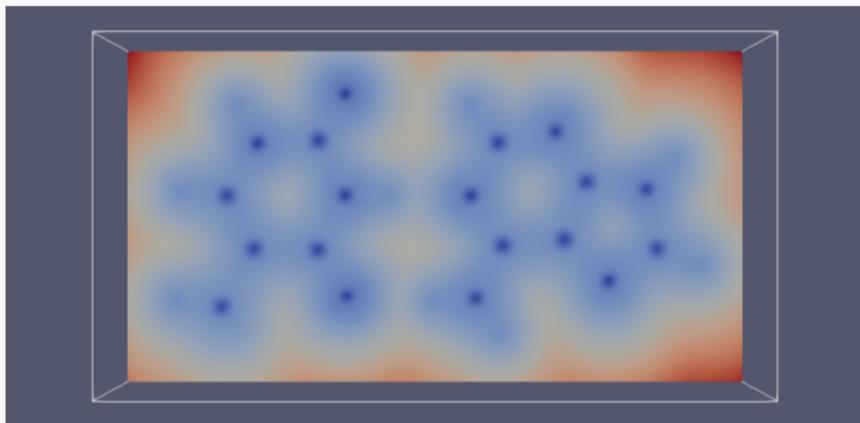
- liaison moléculaire adénine-thymine (bases A & T de l'ADN)
- simulation de densité de probabilité de présence électronique ($-\log()$)
- valeurs faibles \rightarrow noyaux, valeur fortes à l'infini
- grille régulière ($177 \times 95 \times 48$)



Ensemble de niveau

Jeu de données d'exemple

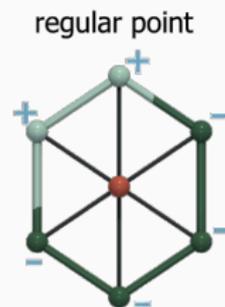
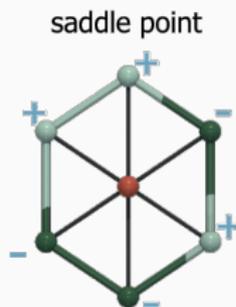
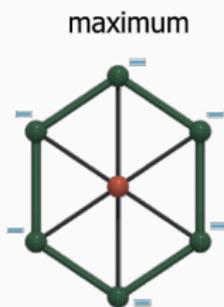
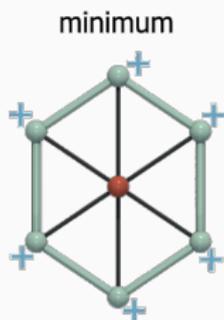
- liaison moléculaire adénine-thymine (bases A & T de l'ADN)
- simulation de densité de probabilité de présence électronique ($-\log()$)
- valeurs faibles \rightarrow noyaux, valeur fortes à l'infini
- grille régulière ($177 \times 95 \times 48$)



Tranche selon Z (bleu \nearrow rouge)

Points critiques

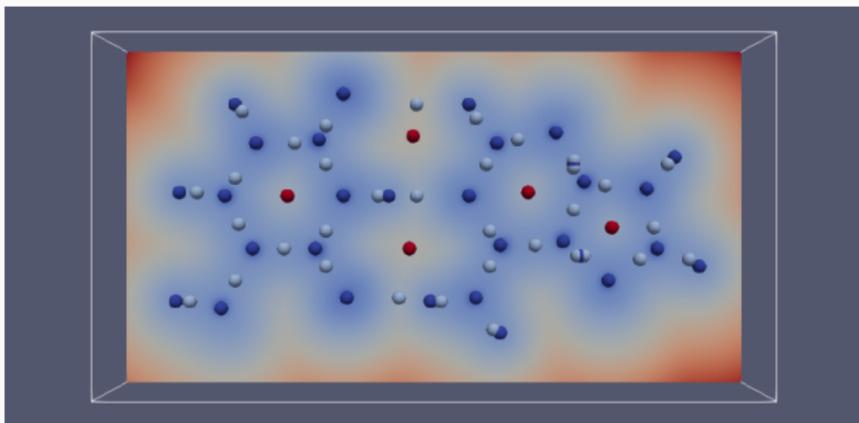
- minima, maxima, points selle
- caractérisation locale : composantes connexes des liens supérieur & inférieur



© Jules Vidal, « A Progressive Approach to Scalar Field Topology »

Points critiques

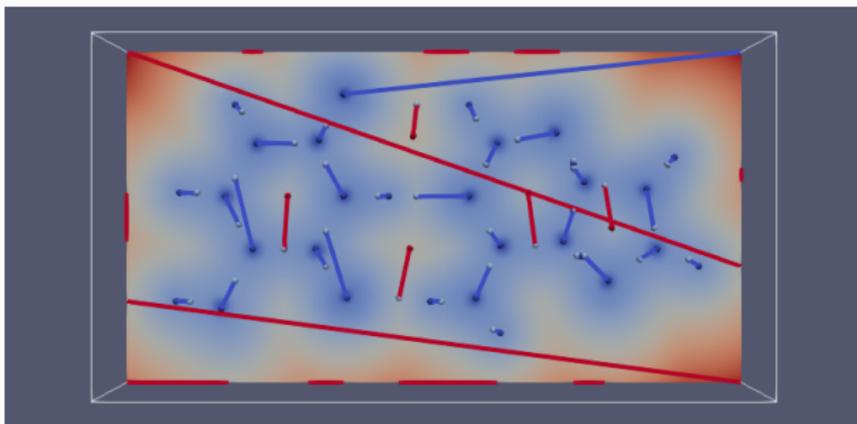
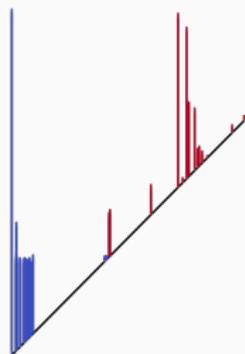
- minima, maxima, points selle
- caractérisation locale : composantes connexes des liens supérieur & inférieur
- liés au changement de topologie des sous-ensembles de niveau



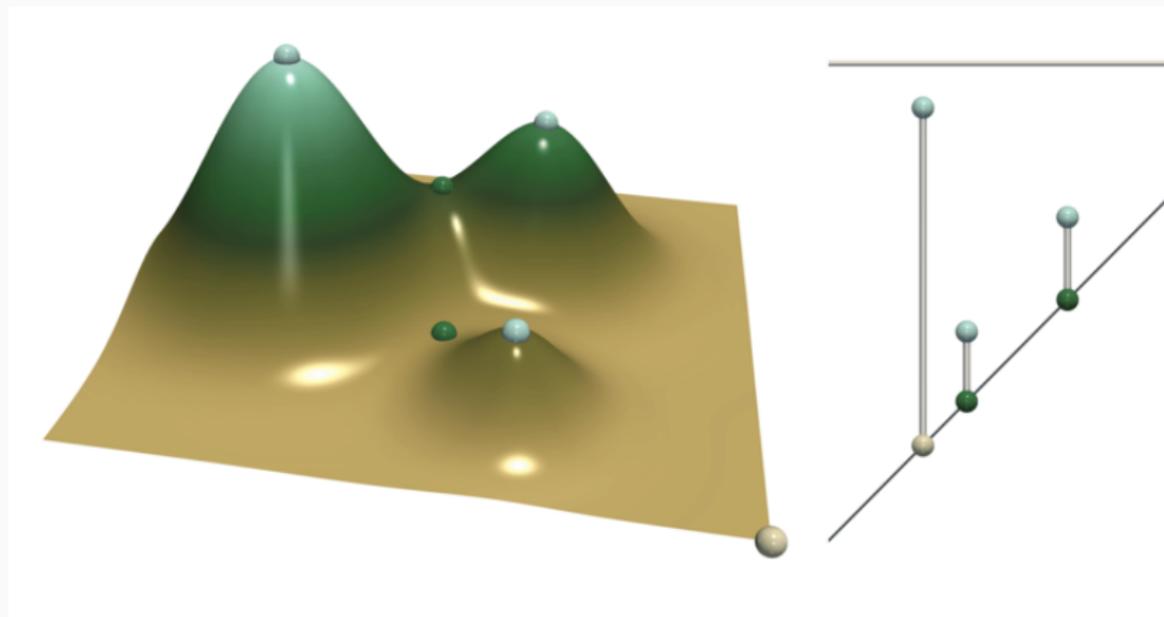
Minima, points selle, maxima

Diagrammes de persistance

- paires de points critiques
(min-selle, selle-max)
- une paire = une caractéristique topologique
- calculé par *Lower Star Filtration*

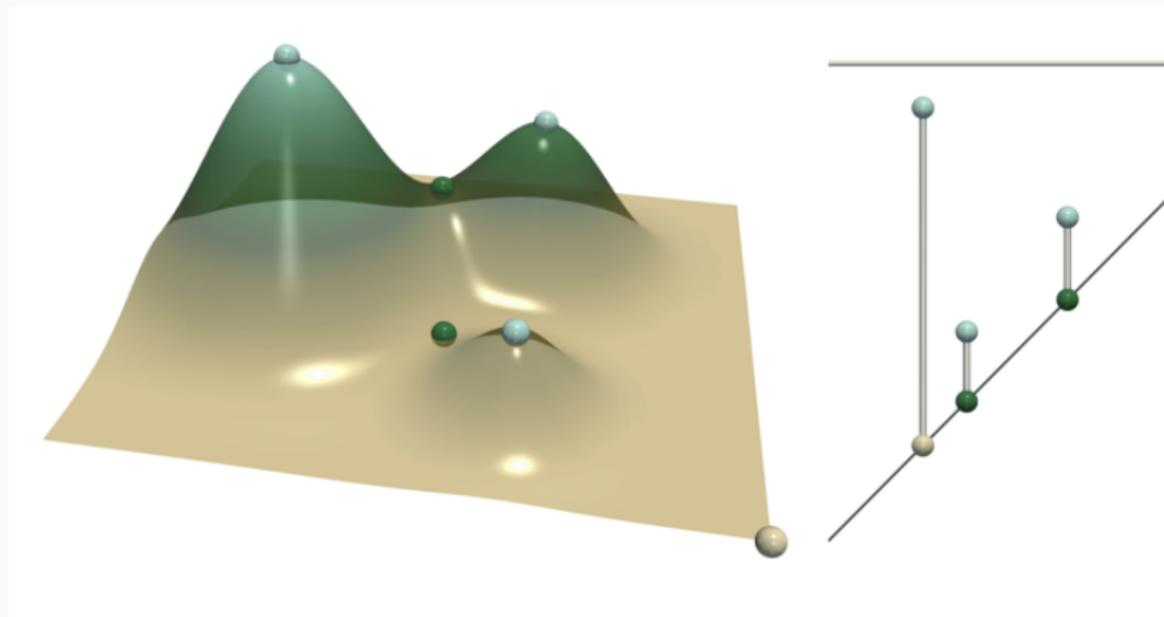


Lower Star Filtration et diagramme de persistance



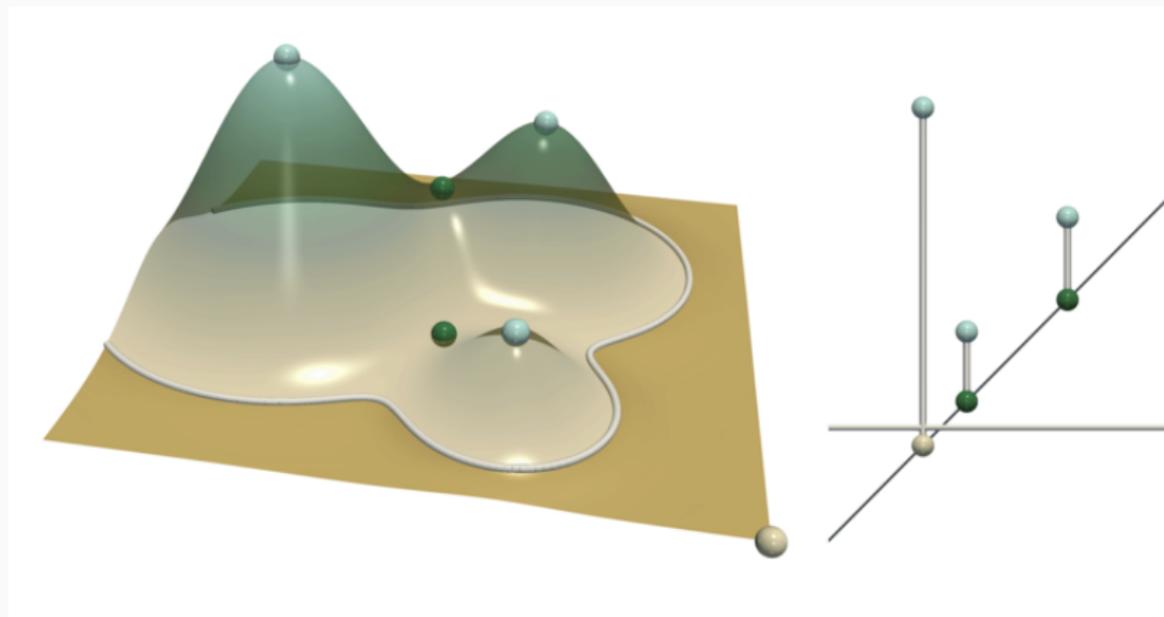
© Jules Vidal, « A Progressive Approach to Scalar Field Topology »

Lower Star Filtration et diagramme de persistance



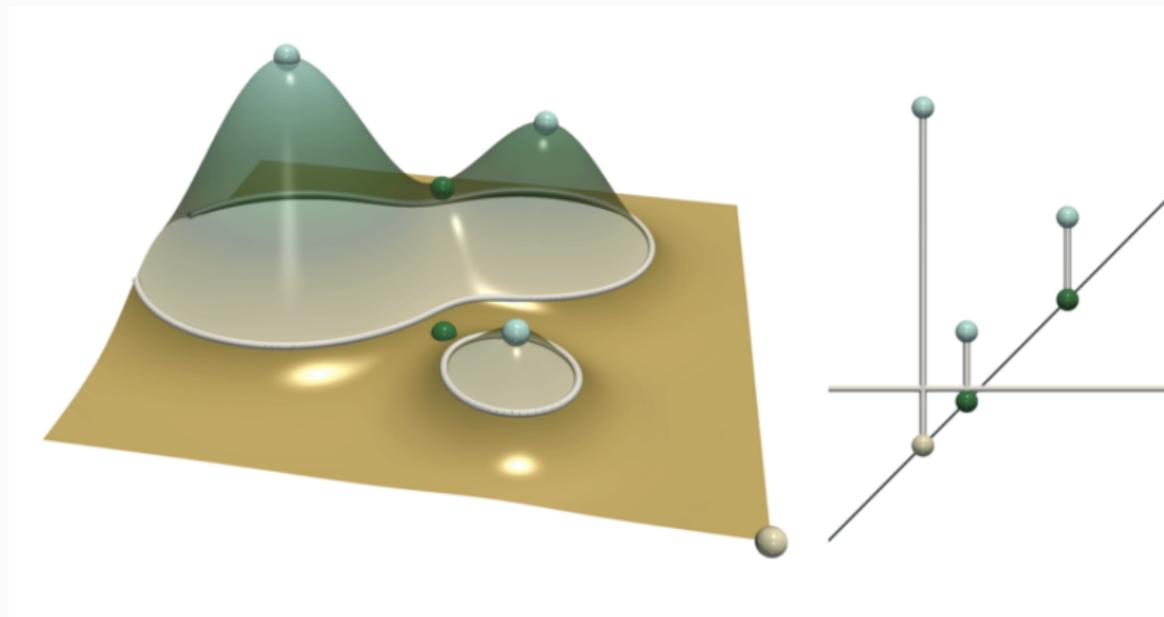
© Jules Vidal, « A Progressive Approach to Scalar Field Topology »

Lower Star Filtration et diagramme de persistance



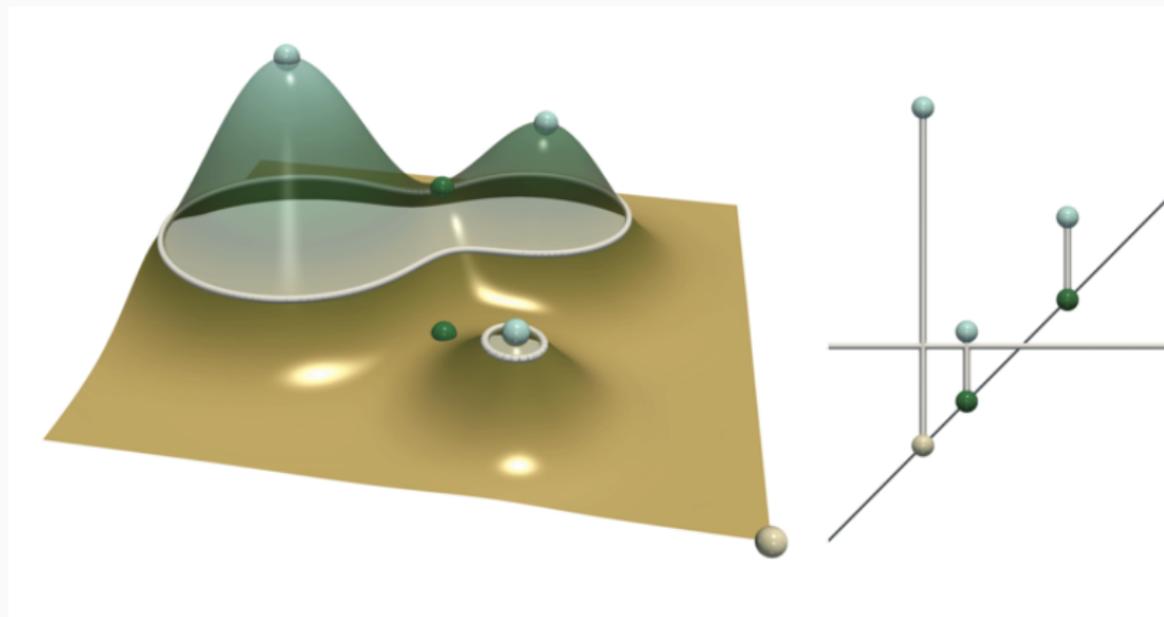
© Jules Vidal, « A Progressive Approach to Scalar Field Topology »

Lower Star Filtration et diagramme de persistance



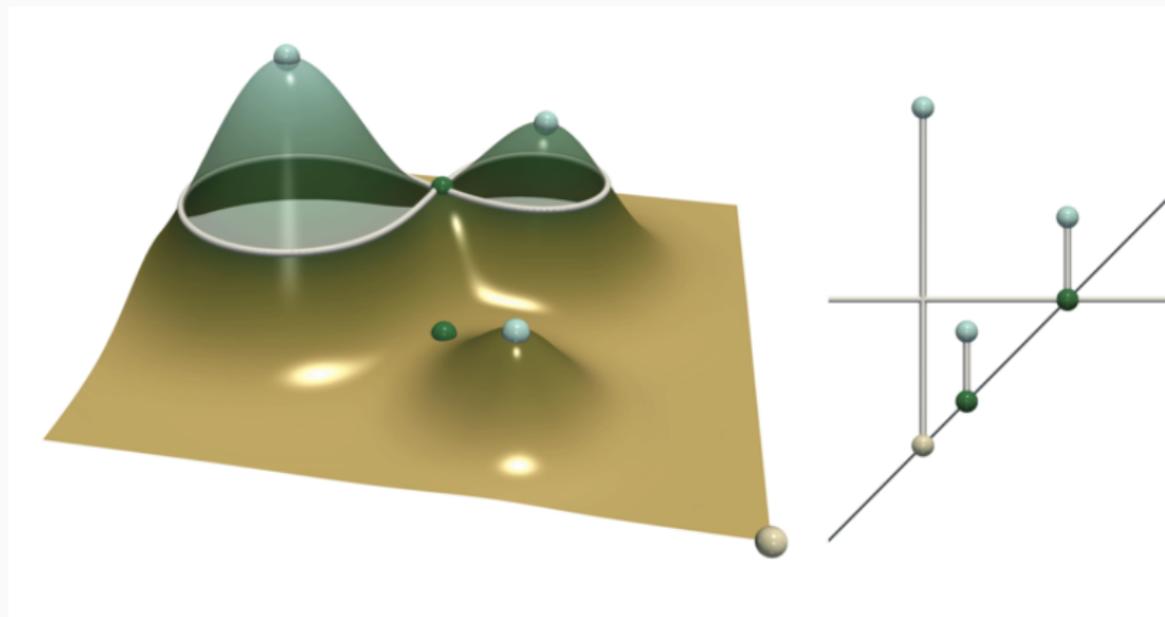
© Jules Vidal, « A Progressive Approach to Scalar Field Topology »

Lower Star Filtration et diagramme de persistance



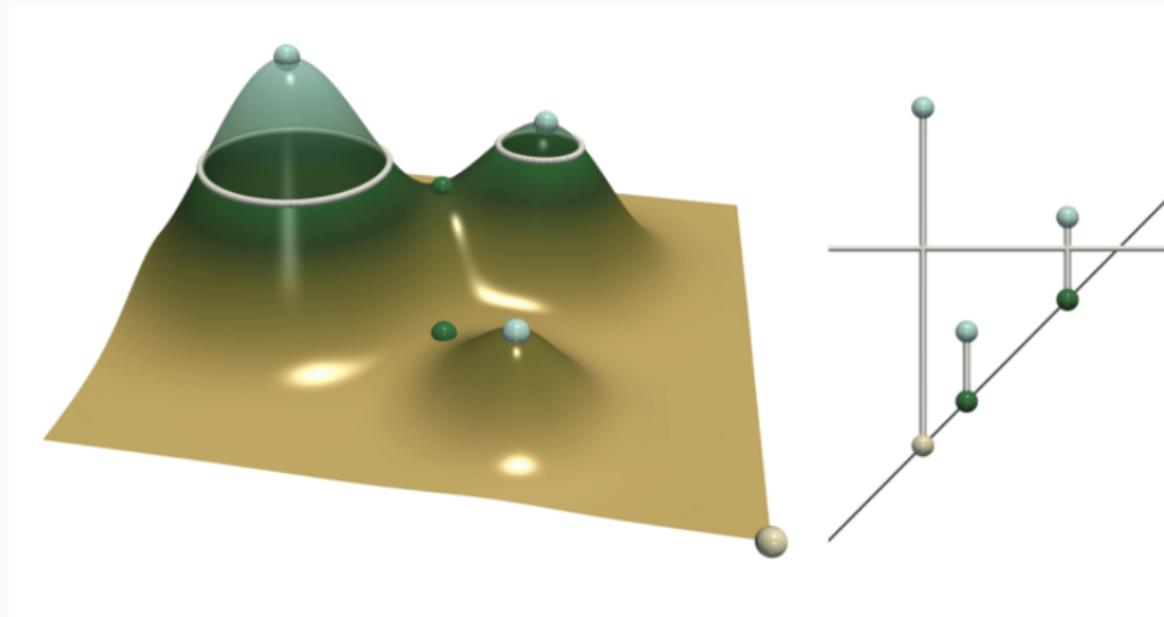
© Jules Vidal, « A Progressive Approach to Scalar Field Topology »

Lower Star Filtration et diagramme de persistance



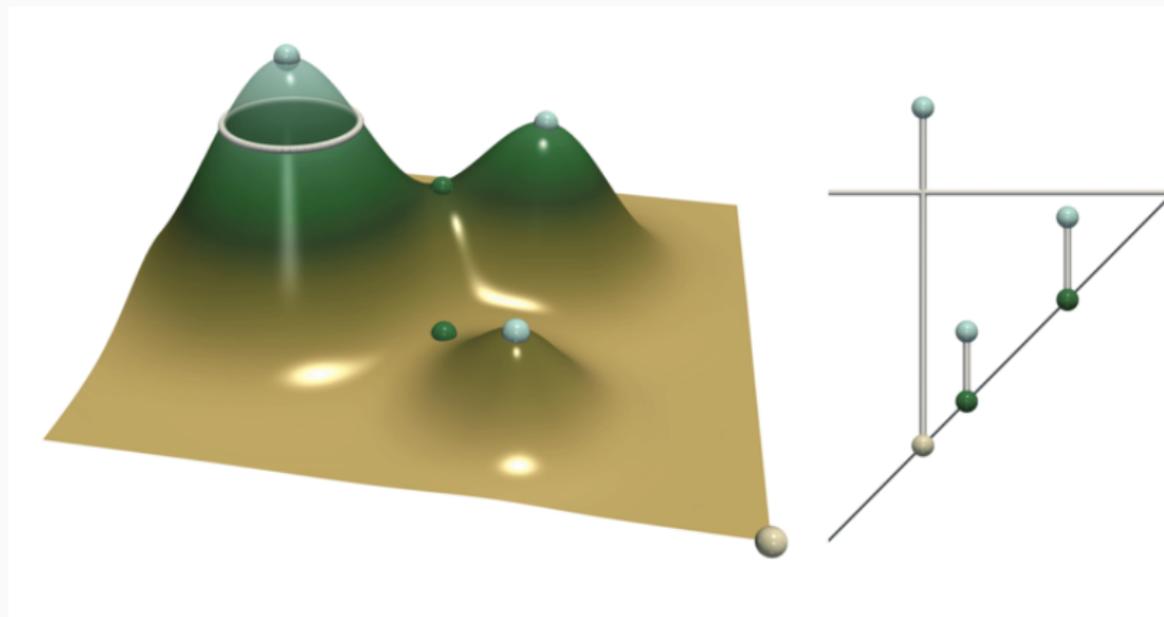
© Jules Vidal, « A Progressive Approach to Scalar Field Topology »

Lower Star Filtration et diagramme de persistance



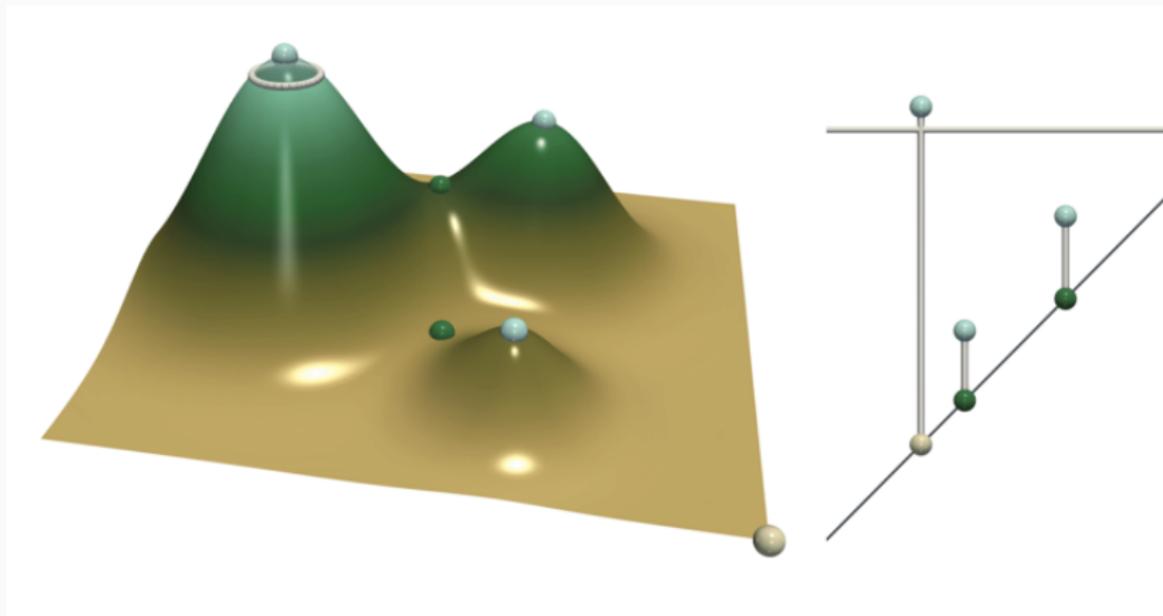
© Jules Vidal, « A Progressive Approach to Scalar Field Topology »

Lower Star Filtration et diagramme de persistance



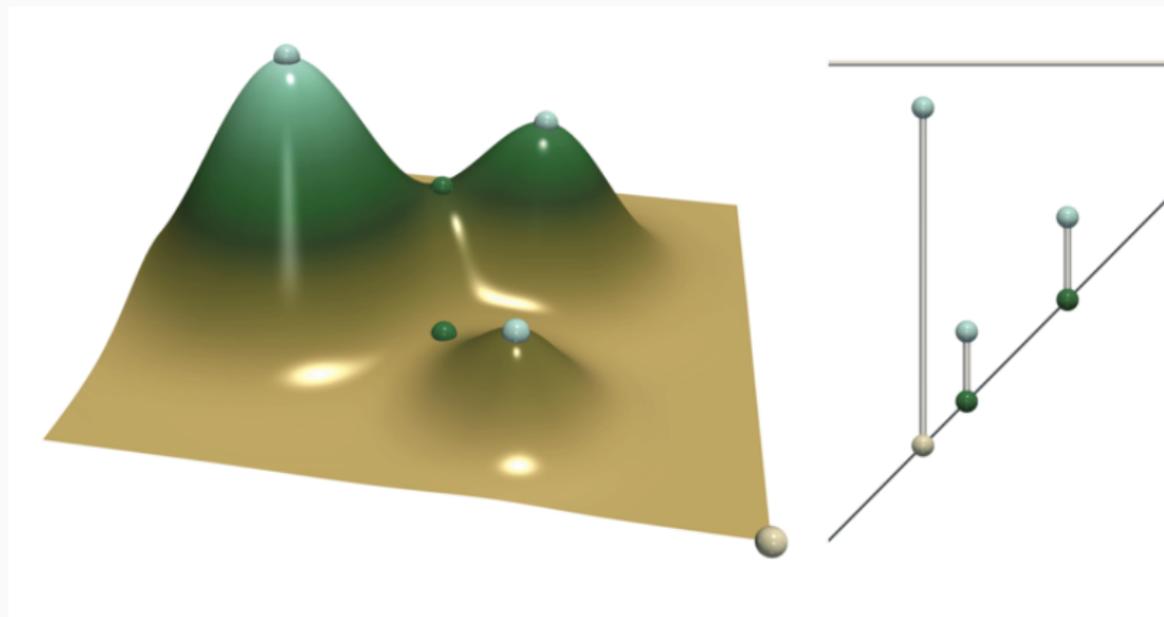
© Jules Vidal, « A Progressive Approach to Scalar Field Topology »

Lower Star Filtration et diagramme de persistance



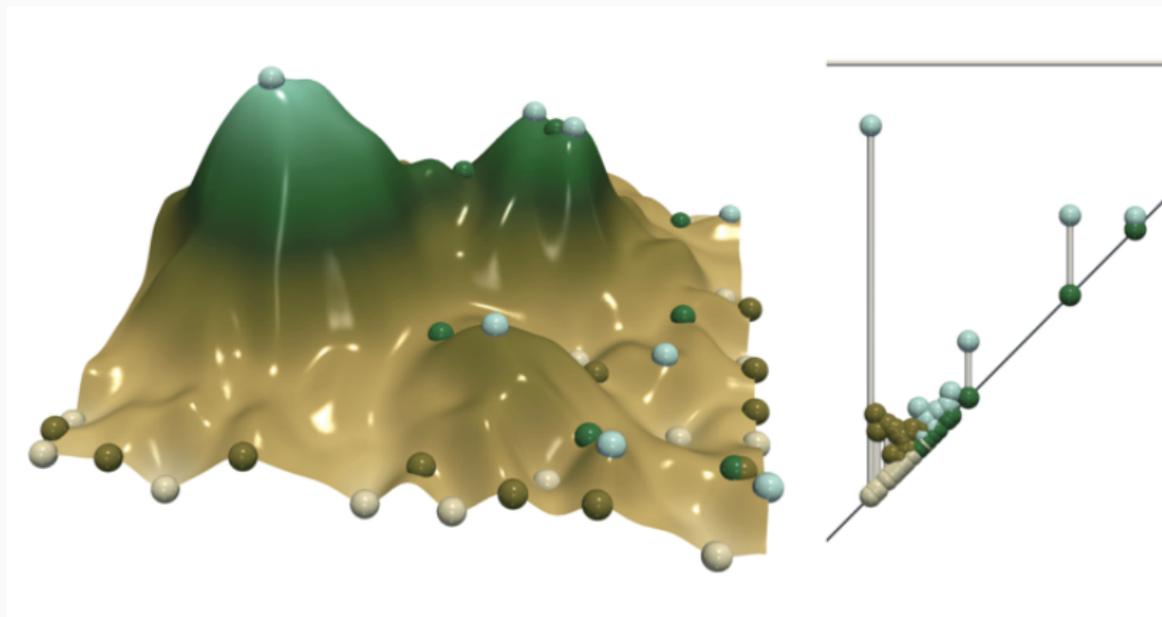
© Jules Vidal, « A Progressive Approach to Scalar Field Topology »

Lower Star Filtration et diagramme de persistance



© Jules Vidal, « A Progressive Approach to Scalar Field Topology »

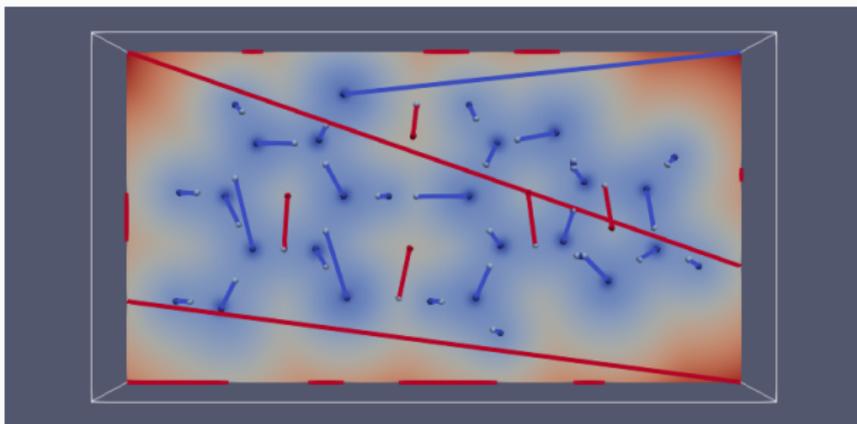
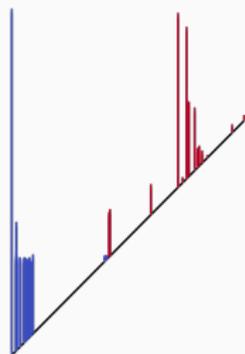
Lower Star Filtration et diagramme de persistance



© Jules Vidal, « A Progressive Approach to Scalar Field Topology »

Diagrammes de persistance

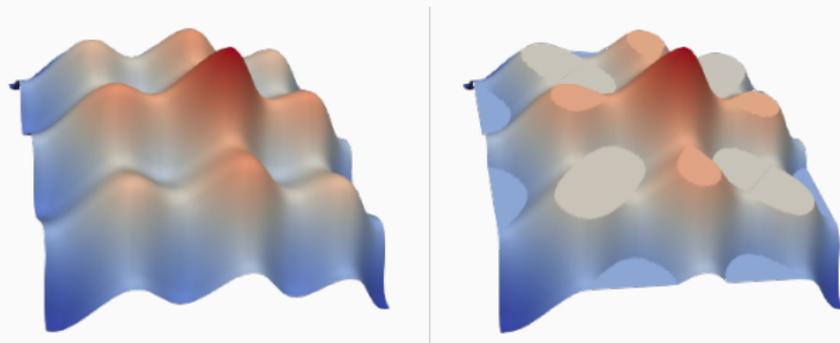
- paires de points critiques
(min-selle, selle-max)
- une paire = une caractéristique topologique
- calculé par *Lower Star Filtration*
- représentation stable (filtrage par persistance)
& légère



Application : Simplification Topologique

À partir d'un champ scalaire donné :

1. on calcule le diagramme de persistance
2. on enlève les paires qui ont la plus petite persistance
3. on génère un nouveau champ scalaire "nettoyé" qui correspond à la topologie simplifiée (nivellement)

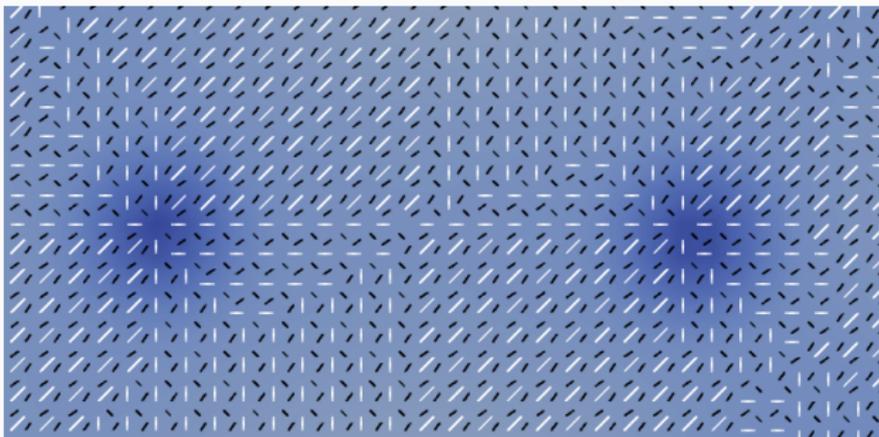


Julien TIERNY et Valerio PASCUCCI. « Generalized Topological Simplification of Scalar Fields on Surfaces ». In : *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics* (déc. 2012). URL : <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01206877>, Jonas LUKASCZYK et al. « Localized Topological Simplification of Scalar Data ». In : *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics* (oct. 2020). URL : <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02949278>

Gradient discret

Dans un complexe (cubique, simplicial), chaque cellule est appairée

- soit avec une de ses faces
- soit avec une de ses co-faces (sommet \rightarrow arête du plus bas voisin)
- sinon c'est une cellule critique (le plus haut sommet est critique)

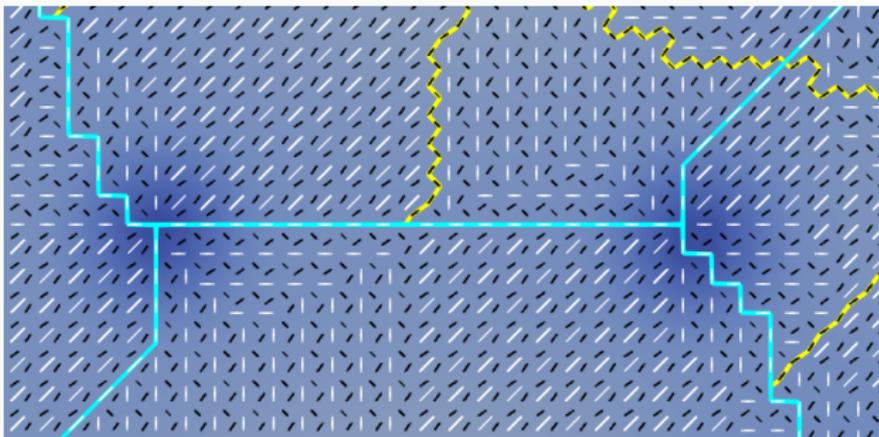


Vanessa ROBINS, Peter John WOOD et Adrian P. SHEPPARD. « Theory and Algorithms for Constructing Discrete Morse Complexes from Grayscale Digital Images ». In : *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 33.8 (2011), p. 1646-1658. DOI : [10.1109/TPAMI.2011.95](https://doi.org/10.1109/TPAMI.2011.95)

Gradient discret

Dans un complexe (cubique, simplicial), chaque cellule est appairée

- soit avec une de ses faces
- soit avec une de ses co-faces (sommet \rightarrow arête du plus bas voisin)
- sinon c'est une cellule critique (le plus haut sommet est critique)

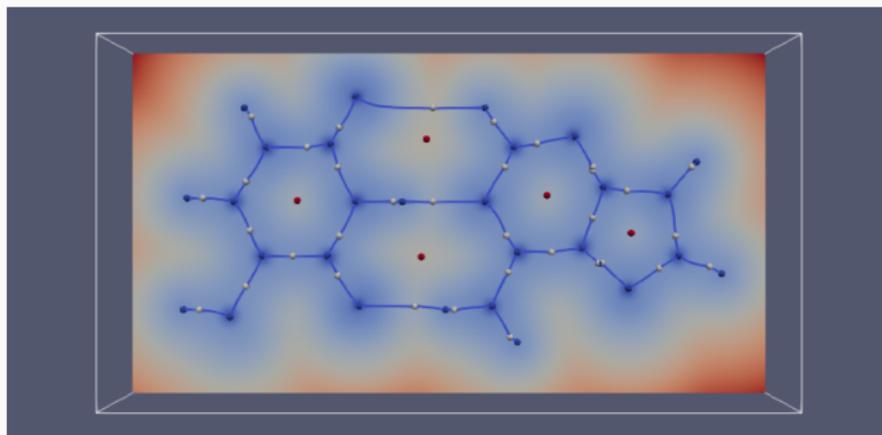


Vanessa ROBINS, Peter John WOOD et Adrian P. SHEPPARD. « Theory and Algorithms for Constructing Discrete Morse Complexes from Grayscale Digital Images ». In : *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 33.8 (2011), p. 1646-1658. DOI : [10.1109/TPAMI.2011.95](https://doi.org/10.1109/TPAMI.2011.95)

Complexe de Morse-Smale

cellules critiques du gradient discret

1-séparatrices descendantes suivre le gradient depuis les selles



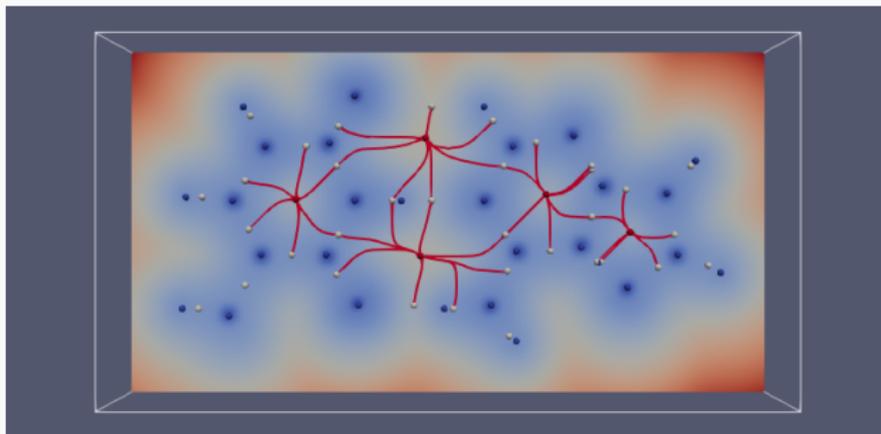
1-séparatrices descendantes

Complexe de Morse-Smale

cellules critiques du gradient discret

1-séparatrices descendantes suivre le gradient depuis les selles

1-séparatrices ascendantes remonter le gradient depuis les selles



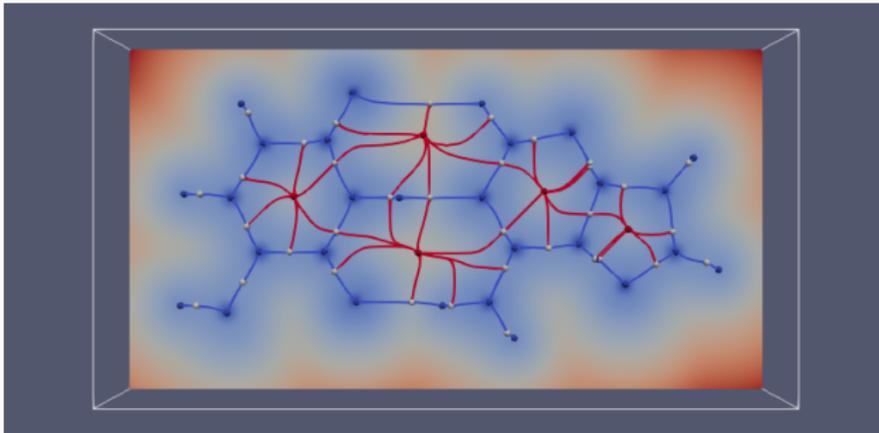
1-séparatrices ascendantes

Complexe de Morse-Smale

cellules critiques du gradient discret

1-séparatrices descendantes suivre le gradient depuis les selles

1-séparatrices ascendantes remonter le gradient depuis les selles



1-séparatrices ascendantes + descendantes

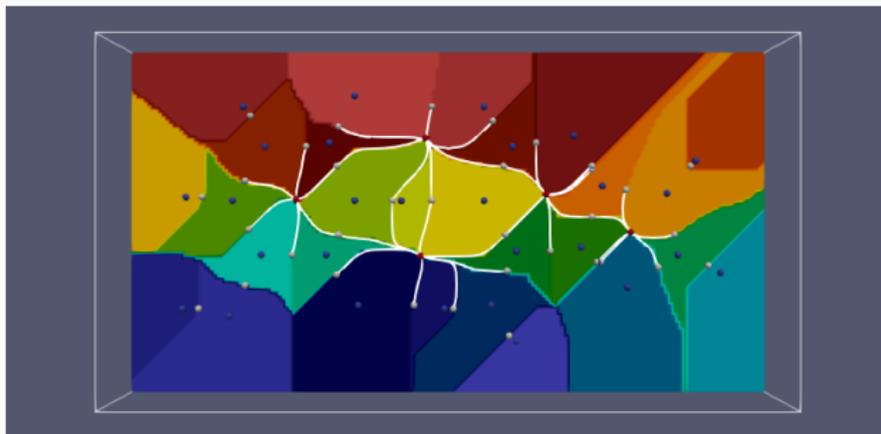
Complexe de Morse-Smale

cellules critiques du gradient discret

1-séparatrices descendantes suivre le gradient depuis les selles

1-séparatrices ascendantes remonter le gradient depuis les selles

segmentation descendante zone d'influence de chaque minimum



Segmentation descendante

Complexe de Morse-Smale

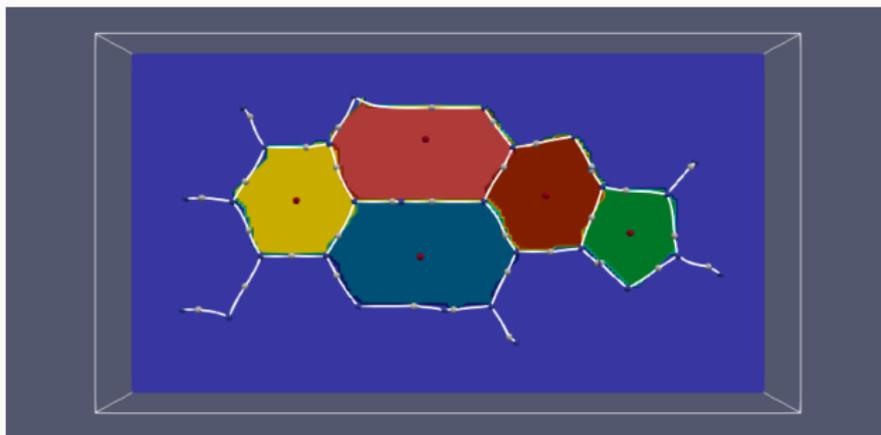
cellules critiques du gradient discret

1-séparatrices descendantes suivre le gradient depuis les selles

1-séparatrices ascendantes remonter le gradient depuis les selles

segmentation descendante zone d'influence de chaque minimum

segmentation ascendante zone d'influence de chaque maximum



Segmentation ascendante

Complexe de Morse-Smale

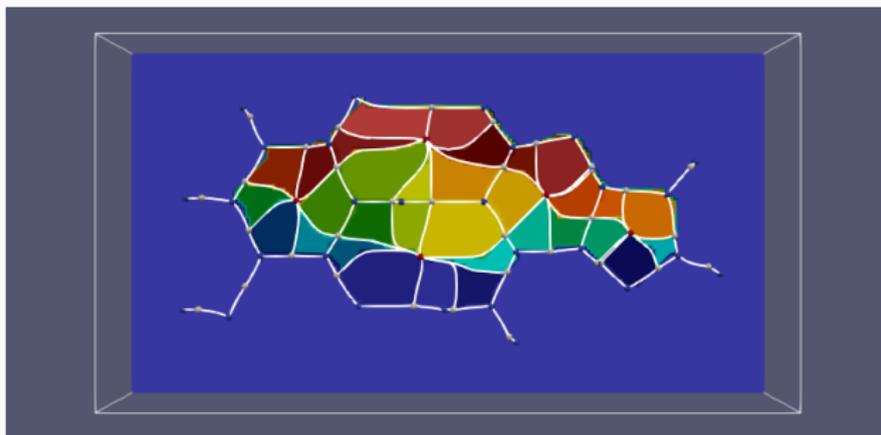
cellules critiques du gradient discret

1-séparatrices descendantes suivre le gradient depuis les selles

1-séparatrices ascendantes remonter le gradient depuis les selles

segmentation descendante zone d'influence de chaque minimum

segmentation ascendante zone d'influence de chaque maximum



Segmentation ascendante \otimes descendante

Complexe de Morse-Smale

cellules critiques du gradient discret

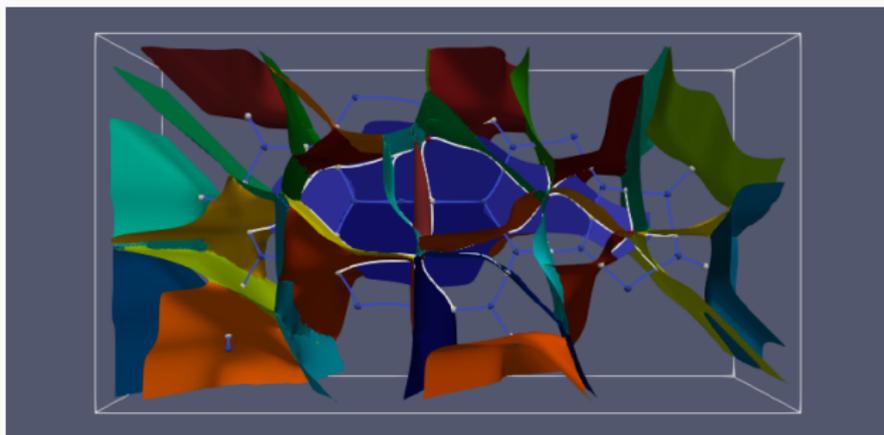
1-séparatrices descendantes suivre le gradient depuis les selles

1-séparatrices ascendantes remonter le gradient depuis les selles

segmentation descendante zone d'influence de chaque minimum

segmentation ascendante zone d'influence de chaque maximum

2-séparatrices (3D) surfaces frontières des zones d'influence



2-séparatrices ascendantes + descendantes

Application : analyse d'ensembles

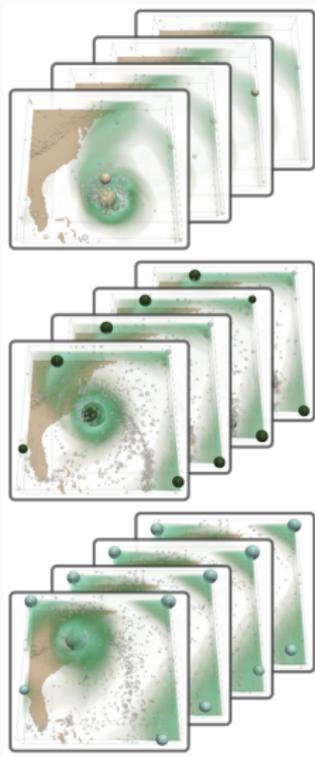


- financé par la commission Européenne
- 9 partenaires académiques & industriels (dont Sorbonne Université)
- construire des méthodes, infrastructures et interfaces pour l'Urgent Decision Making
- simulations d'ensembles sur des clusters HPC, applications de visualisation
- 3 Use-Cases
 1. Forest Fire
 2. Mosquito-Borne Diseases
 3. *Space Weather*

Simuler un phénomène physique sans en connaître tous les paramètres

1. on lance un grand nombre de simulations avec différents paramètres
2. on compare les résultats des simulations avec l'évolution du phénomène physique
3. on jette les paramètres de simulation non pertinents
4. on répète jusqu'à ce qu'on aie identifié les scénarii les "plus probables"

VESTEC : Réduire le temps passé dans cette boucle



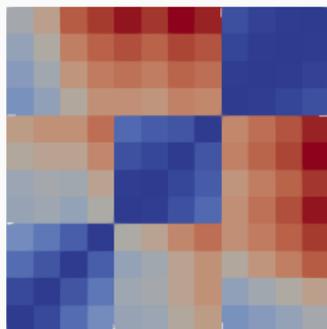
Cinema Database stocker, requêter des diagrammes de persistance

Réduction de Dimension vue planaire

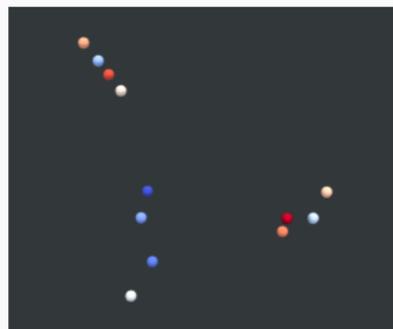
Distance & Clustering de diagramme de persistance

Calcul progressif de diagrammes de persistance

Réduction de Dimension

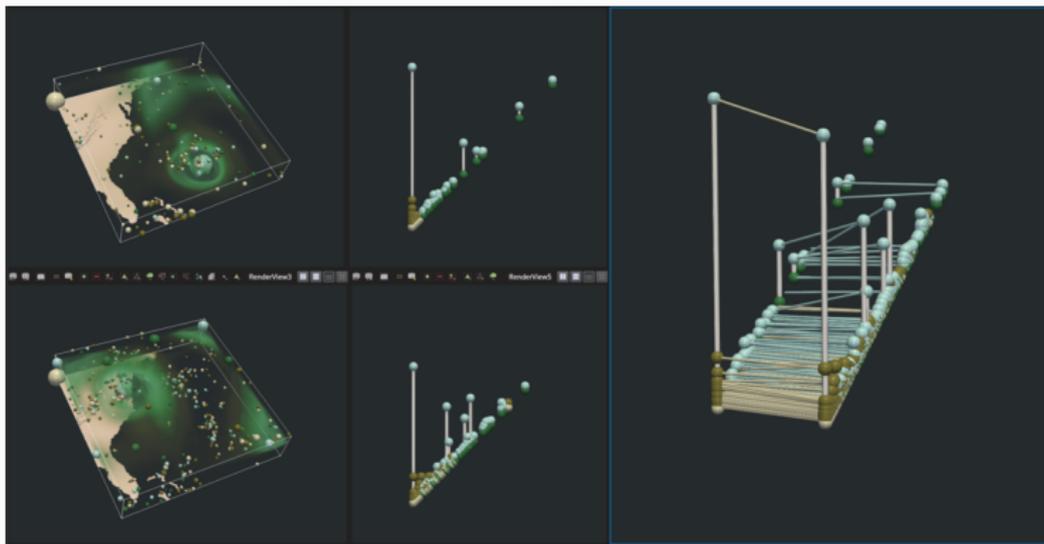


Matrice de distance



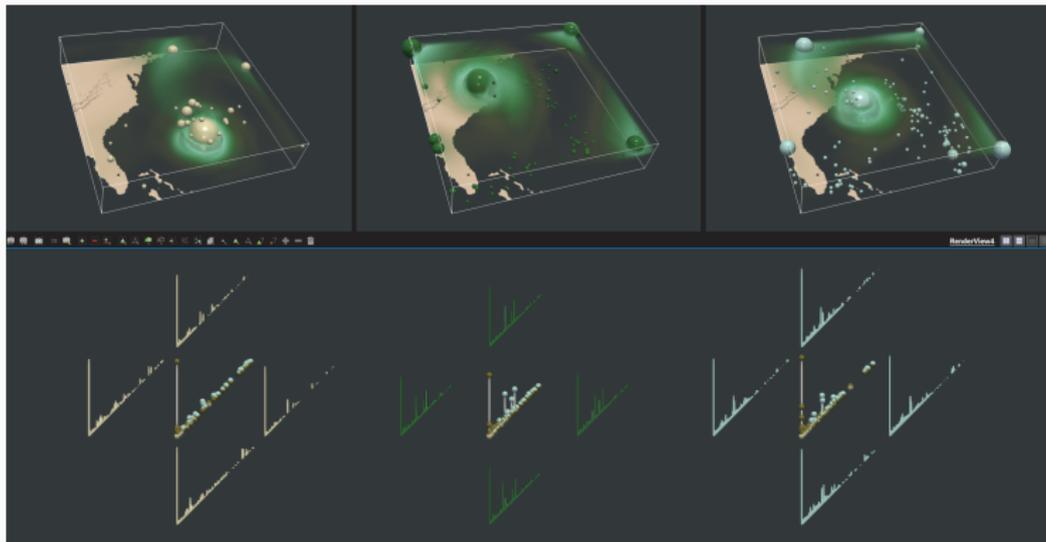
Nuage de points

Distance entre diagrammes de persistance



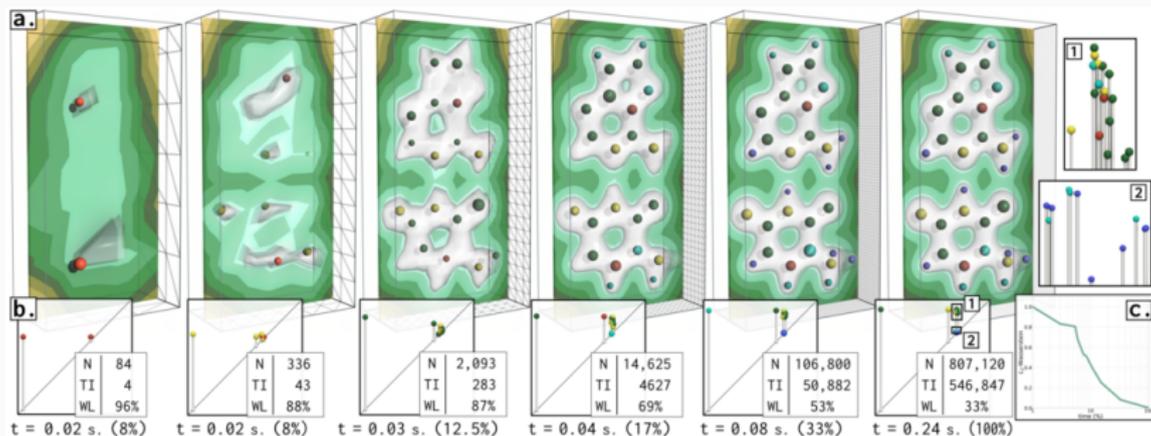
Jules VIDAL, Joseph BUDIN et Julien TIERNY. « Progressive Wasserstein Barycenters of Persistence Diagrams ». In : *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics* (oct. 2019). Accepted to *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics* (Proc. of IEEE VIS 2019). URL : <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02179674>

Clustering & Barycentres de diagrammes



Max KONTAK, Jules VIDAL et Julien TIERNY. « Statistical Parameter Selection for Clustering Persistence Diagrams ». In : *SuperComputing Workshop on UrgentHPC*. Denver, United States, nov. 2019. URL : <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02321869>

Calcul progressif de diagrammes



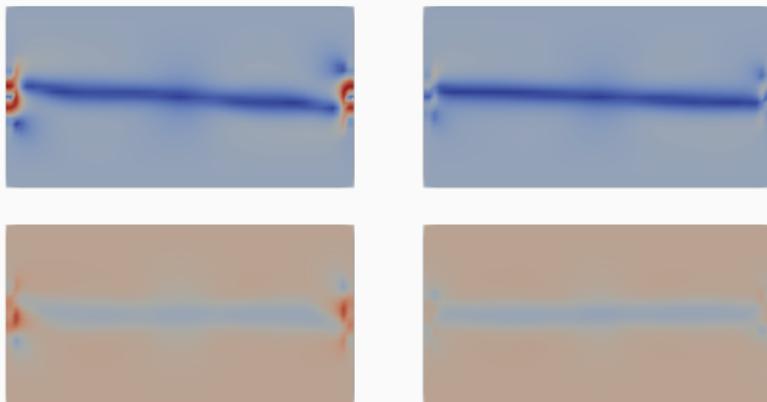
Jules VIDAL, Pierre GUILLOU et Julien TIERNY. « A Progressive Approach to Scalar Field Topology ». In : *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics* 27.6 (juin 2021), p. 2833-2850. ISSN : 2160-9306. DOI : [10.1109/tvcg.2021.3060500](https://doi.org/10.1109/tvcg.2021.3060500). URL : <http://dx.doi.org/10.1109/TVCG.2021.3060500>

Analyser les simulations d'ensemble

1. générer des diagrammes de persistance à chaque cycle de simulation
2. une fois les simulations terminées, on calcule une matrice de distance entre les diagrammes
3. on utilise la Réduction de Dimension (MDS) pour obtenir un nuage de points
4. on visualise et manipule le nuage de points avec ParaView
5. (Opt.) on cluster tout ou partie des diagrammes

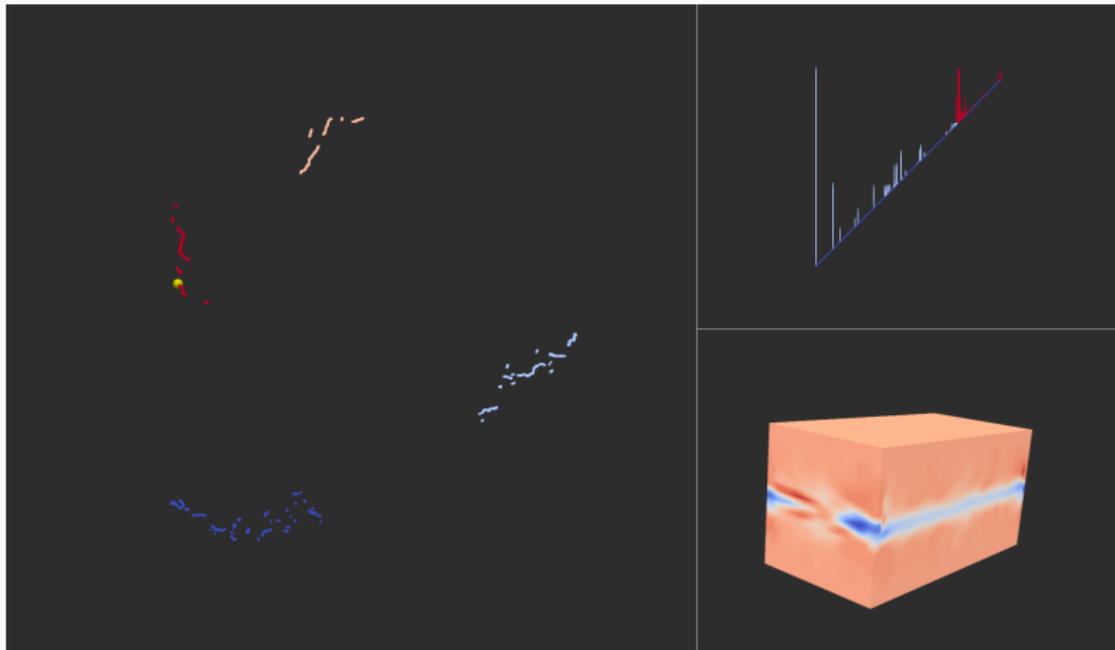
VESTEC Use-Case 3 : Space Weather

- simulateur Particle-In-Cell développé à KTH
- champ magnétique (vectoriel) dans la haute atmosphère
- phénomène à étudier : reconnexion magnétique
- un diagramme de persistance sur la magnitude du champ magnétique \times 2500 cycles \times 4 simulations



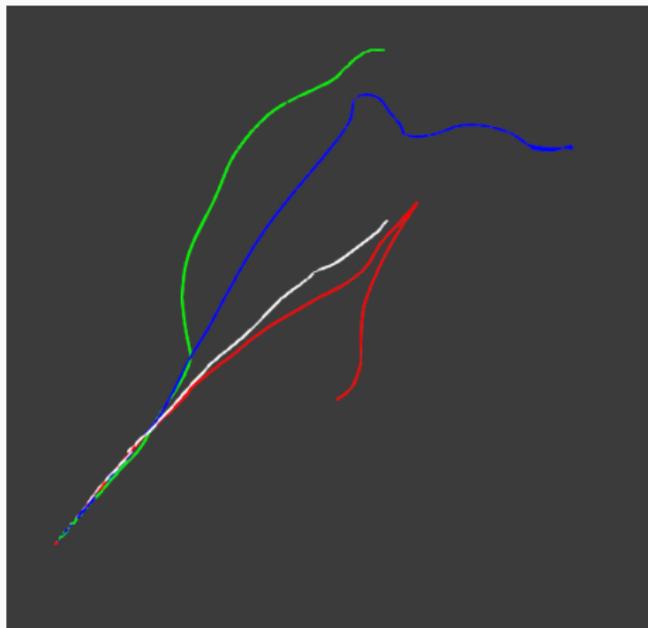
Quatre simulations, même cycle, différents paramètres

Manipulation & extraction des jeux de données





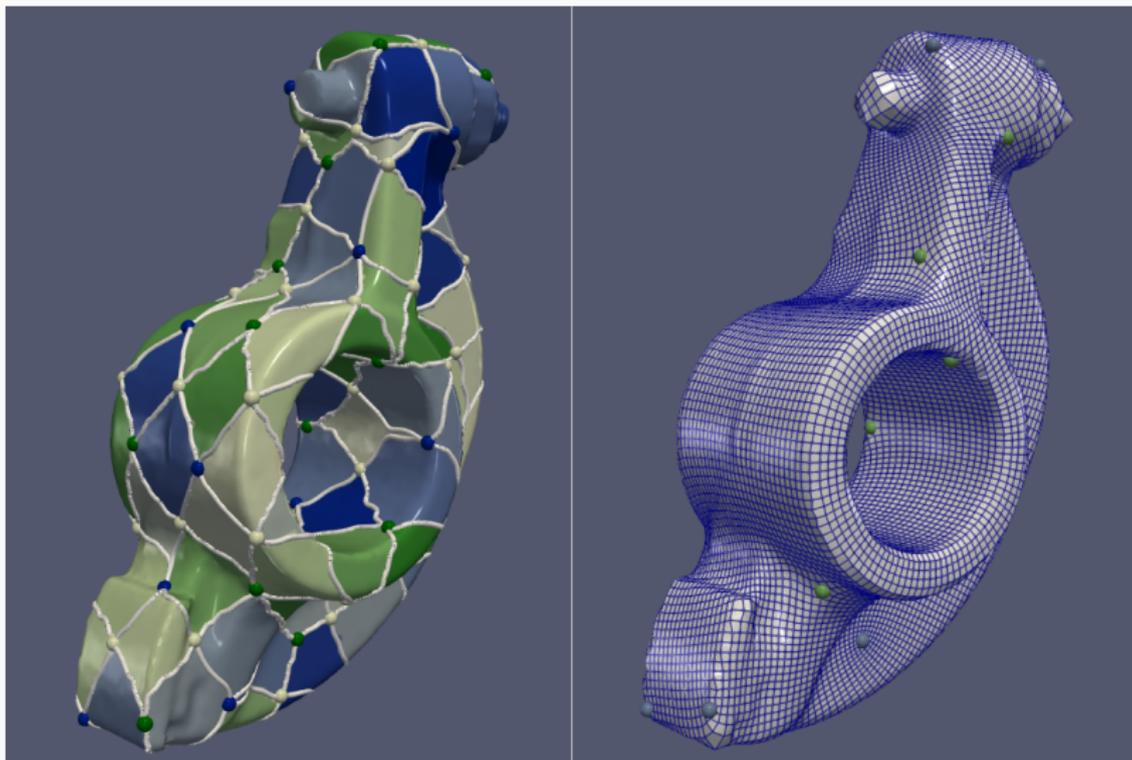
Couleur :
cycle de simulation
(de 0 à 2500)



Couleur :
paramètres de simulation
(4 simulations)

Application : quadrangulation de surface

Quadrangulation de surface avec le complexe de Morse-Smale



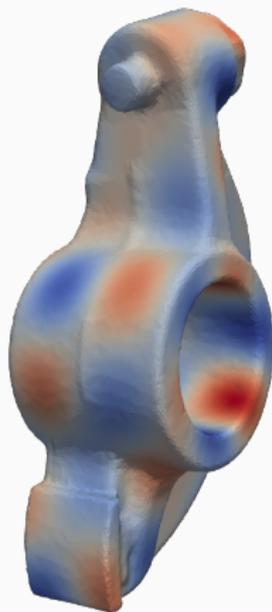
À partir d'une surface fermée triangulée



Shen DONG et al. « Spectral Surface Quadrangulation ». In : *ACM Trans. Graph.* 25.3 (juill. 2006), p. 1057-1066. ISSN : 0730-0301. DOI : [10.1145/1141911.1141993](https://doi.org/10.1145/1141911.1141993). URL : <https://doi.org/10.1145/1141911.1141993>

À partir d'une surface fermée triangulée

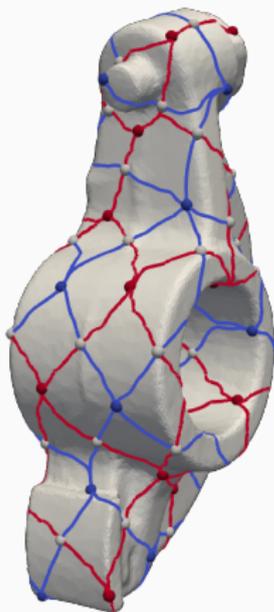
1. on utilise une fonction scalaire qui alterne minima et maxima sur la surface (fonction propre du laplacien de la triangulation)



Shen DONG et al. « Spectral Surface Quadrangulation ». In : *ACM Trans. Graph.* 25.3 (juill. 2006), p. 1057-1066. ISSN : 0730-0301. DOI : [10.1145/1141911.1141993](https://doi.org/10.1145/1141911.1141993). URL : <https://doi.org/10.1145/1141911.1141993>

À partir d'une surface fermée triangulée

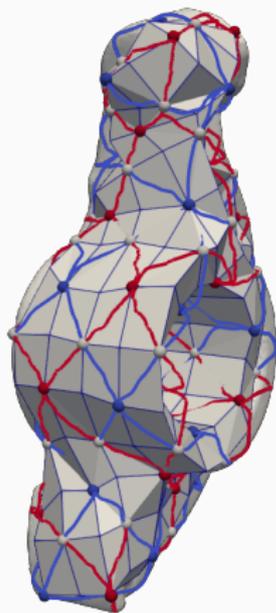
1. on utilise une fonction scalaire qui alterne minima et maxima sur la surface
(fonction propre du laplacien de la triangulation)
2. complexe de Morse-Smale



Shen DONG et al. « Spectral Surface Quadrangulation ». In : *ACM Trans. Graph.* 25.3 (juill. 2006), p. 1057-1066. ISSN : 0730-0301. DOI : [10.1145/1141911.1141993](https://doi.org/10.1145/1141911.1141993). URL : <https://doi.org/10.1145/1141911.1141993>

À partir d'une surface fermée triangulée

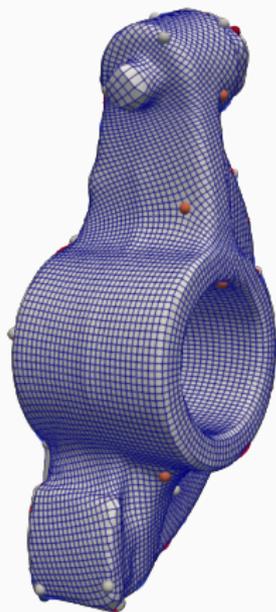
1. on utilise une fonction scalaire qui alterne minima et maxima sur la surface (fonction propre du laplacien de la triangulation)
2. complexe de Morse-Smale
3. quadrangulation grossière autour des points selle (valence 4)



Shen DONG et al. « Spectral Surface Quadrangulation ». In : *ACM Trans. Graph.* 25.3 (juill. 2006), p. 1057-1066. ISSN : 0730-0301. DOI : [10.1145/1141911.1141993](https://doi.org/10.1145/1141911.1141993). URL : <https://doi.org/10.1145/1141911.1141993>

À partir d'une surface fermée triangulée

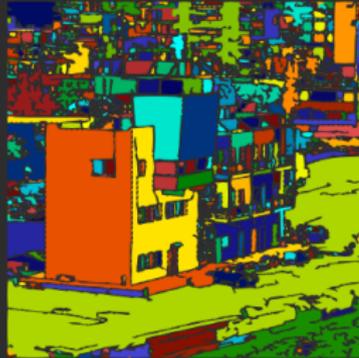
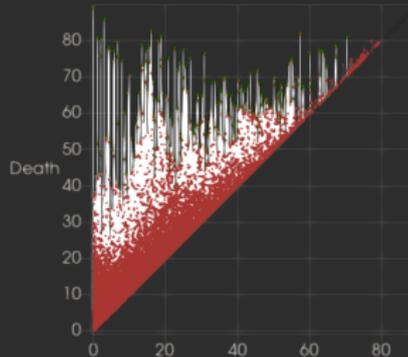
1. on utilise une fonction scalaire qui alterne minima et maxima sur la surface (fonction propre du laplacien de la triangulation)
2. complexe de Morse-Smale
3. quadrangulation grossière autour des points selle (valence 4)
4. subdivision suivie d'itérations de projection/relaxation pour affiner la quadrangulation



Shen DONG et al. « Spectral Surface Quadrangulation ». In : *ACM Trans. Graph.* 25.3 (juill. 2006), p. 1057-1066. ISSN : 0730-0301. DOI : [10.1145/1141911.1141993](https://doi.org/10.1145/1141911.1141993). URL : <https://doi.org/10.1145/1141911.1141993>

Application : segmentation d'image

Segmentation d'image avec le complexe de Morse-Smale

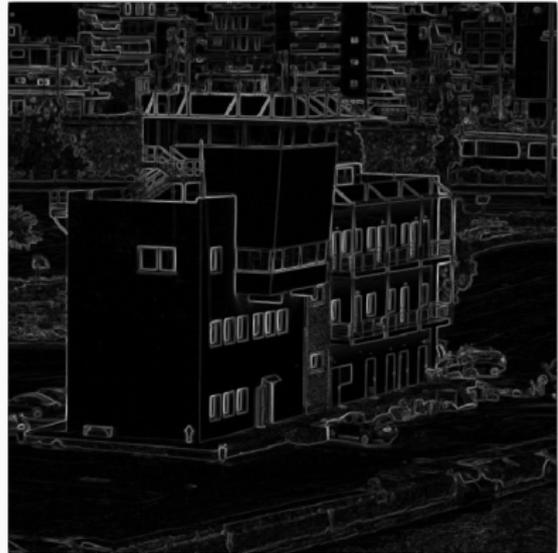


À partir d'une image PNG



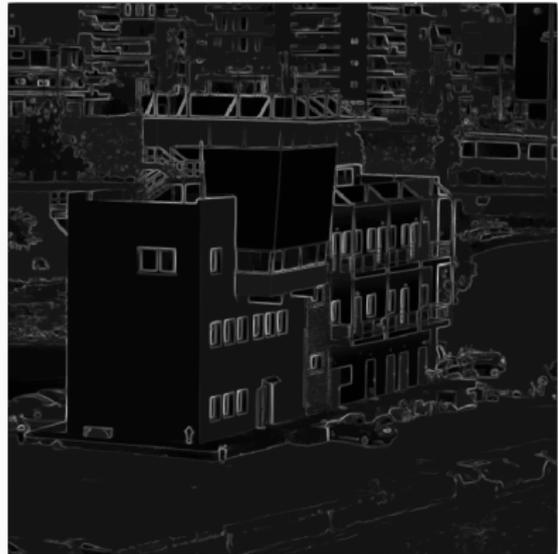
À partir d'une image PNG

1. ParaView calcule le gradient



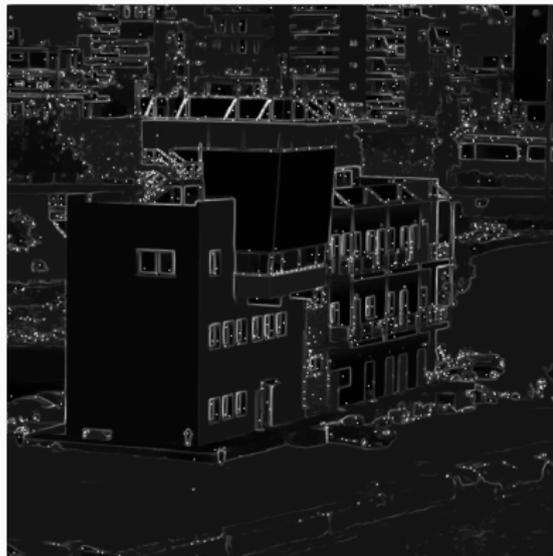
À partir d'une image PNG

1. ParaView calcule le gradient
2. simplification topologique



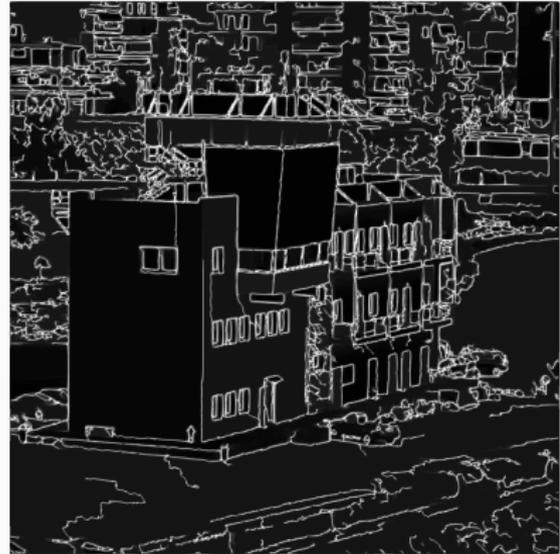
À partir d'une image PNG

1. ParaView calcule le gradient
2. simplification topologique
3. complexe de Morse-Smale
 - les minima sont les marqueurs



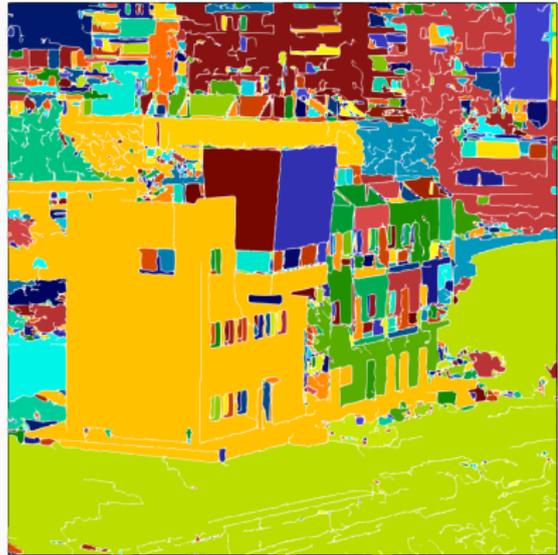
À partir d'une image PNG

1. ParaView calcule le gradient
2. simplification topologique
3. complexe de Morse-Smale
 - les minima sont les marqueurs
 - les séparatrices ascendantes sont les frontières



À partir d'une image PNG

1. ParaView calcule le gradient
2. simplification topologique
3. complexe de Morse-Smale
 - les minima sont les marqueurs
 - les séparatrices ascendantes sont les frontières
 - les zones d'influence des minima forment la segmentation



Conclusion

TTK (et l'analyse topologique de données en général) fournit des outils utiles à la compréhension de champs scalaires définis sur des maillages

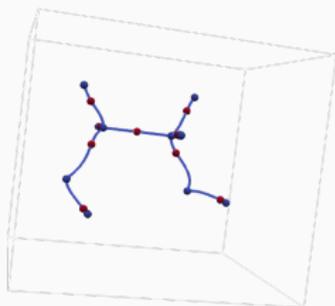
- représentations réduites et préservant la topologie (diagrammes de persistance)
- analyses statistiques sur ces représentations réduites (distance, clustering, réduction de dimension)
- intégration à ParaView pour manipuler plus facilement les jeux de données
- applications variées : analyse d'ensembles, quadrangulation, segmentation d'image
- segmentation du complexe de Morse-Smale \approx watershed ?

D'autres abstractions topologiques

Arbres de contour diagrammes de persistance “augmentés” avec des relations de parentalité entre paires : *distance*, *clustering*, *barycentres*

le graphe de Reeb encode l'évolution de la connexité des ensembles de niveau : *clustering*

Points critiques de champs **vectoriels** : *détection (en parallèle)*, *lignes de champ*, *échantillonnage & reconstruction*



Séparatrices
Morse-Smale

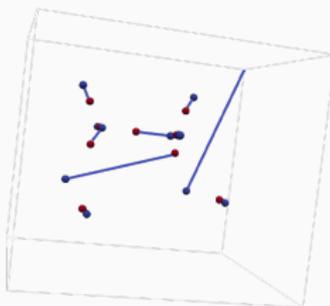
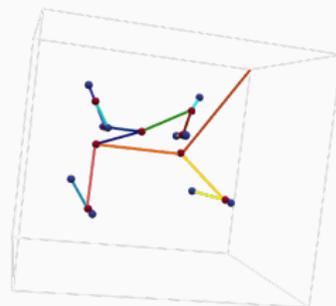
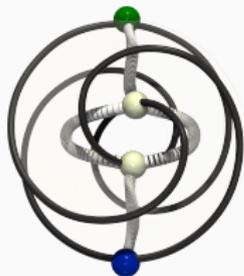


Diagramme de persistance
projeté



Join tree
(arbre de contour)



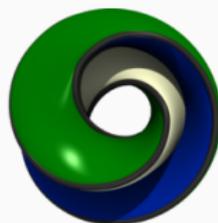
This work is partially supported by the European Commission grant ERC-2019-COG “TORI” (ref. 863464, <https://erc-tori.github.io>).

Une introduction à l'analyse topologique de données avec TTK

Pierre Guillou

Fontainebleau, 18 octobre 2021

CNRS & Sorbonne Université



ERC-2019-COG TORI (ref. 863464, <https://erc-tori.github.io>)