

МОДИФИКАЦИЯ АЛГОРИТМА ПОСЛОЙНОГО РИСОВАНИЯ ОРГРАФОВ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ КОМПАРТМЕНТАЛЬНЫХ ЭПИДЕМИОЛОГИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Аннотация. В данной статье рассматриваются алгоритмы для послойного рисования орграфа на основе стиля Сугиямы для получения изображения компартментальной модели публикационного качества, имеющей свою специфику отображения. В работе был выбран и модифицирован алгоритм представленный в библиотеки Graphviz на условиях исходного графа, узлы которого имеют порты, и с учетом требований к отображению компартментальных эпидемиологических моделей.

Ключевые слова: алгоритм послойного рисования графов, компартментальные эпидемиологические модели, стиль Сугиямы, модель SIR, послойно отрисованный ориентированный граф, компартмент, эпидемии, эпидемиологи, библиотека graphviz, блок-схема.

Введение. Одним из наиболее эффективных способов профилактики инфекционных заболеваний и борьбы с ними является эпидемиологическое моделирование, предполагающее использование математических моделей для понимания того, как распространяется заболевание и для прогнозирования будущих вспышек.

В 20 веке разработали широко применяемую модель SIR. Данная модель относится к компартментальным моделям, которые предполагают разделение популяции людей на такие группы как *восприимчивые, инфицированные, выздоровевшие*, и позволяют получить динамику численного изменения каждой группы людей в течение определенного промежутка времени. Данные группы именуется компартментами. Модели описываются набором дифференциальных уравнений, которые содержат параметры, влияющие на динамику численности людей в каждой группе [1]. Каждая компартментальная модель может быть представлена в виде ориентированного графа, узлы которого располагаются вертикально по столбцам, а ребра — слева направо, что соответствует поуровневой укладке дерева.

В современных реалиях отрисовка компартментальных эпидемиологических моделей имеет ряд вызывающих сложностей.

Одной из сложностей является учитывание специфических условий отображения компартментальных моделей, направленность перехода из одного компартмента в другой, а также масштабируемость отрисованного графа при изменении связей между компартментами. Учитывание специфики и получения рисунка модели публикационного качества, включая математические символы и формулы, влияет на временные ресурсы, которые тратят исследователи-эпидемиологи на моделирование в экспериментальных и/или полевых исследованиях [2].

Поскольку биологические системы по своей сути изменчивы, то принятие решений на основе эпидемиологических моделей требует быстрой подстройки под реальную ситуацию, лучше всего себя показывает сегментированное моделирование на основе ребер, которое имеет простую графическую интерпретацию в виде блок-схем [3].

Проблема исследования. Цель данной статьи — рассмотреть и сравнить алгоритмы послойного рисования графов для построения компартментальных эпидемиологических моделей. В свою очередь выбранный алгоритм и его доработка решит сложность визуализации и получения результатов моделирования в виде графика и рисунка компартментальной модели.

Для качественного сравнения, были поставлены следующие задачи:

1. Рассмотреть существующие способы отображения компартментальных моделей эпидемиологами-исследователями в своих статьях.
2. Изучить работы по алгоритмам послойного отображения орграфа.
3. Составить требования к отображению компартментальных эпидемиологических моделей.
4. Интерпретация выбранного алгоритма послойного отображения графа на поставленные требования отображения.

Данное сравнение и анализ существующих методов послойного рисования ориентированных графов позволит внедрить функционал отрисовки компартментальной модели в приложение позволяющее эпидемиологам-исследователям моделировать распространение эпидемии путем построения собственных компартментальных моделей и соединения «компартмент — поток — компартмент», разрабатываемое в рамках выпускной квалификационной работы.

Материалы и методы.

Формализация задачи

Дано: Пусть $G(V, E)$ — ориентированный граф представляемый множествами стадий и переходов $S, P \subseteq V$, и $v \in V$. Множество входящих ребер обозначается через $E_i(v)$ и множество исходящих $E_o(v)$, а множество портов через $H(v)$, соответственно исходные и целевые — $H_o(v), H_i(v)$. Исходный узел ребра $e = (v, v')$ определяет его конечный узел через $v_s(e) = v'$, а целевой узел ребра $v'_t(e) = v$, при этом обозначения исходного и целевого важны, так как $v(e) = v'$ описывает два ребра (v, v') или (v', v) . v описывается как $(s_i | p_j)$, а $v' — (p_j | s_k)$ соответственно, при этом s_i, s_k — i -ая, k -ая стадия представляющая компартмент эпидемиологической модели, p_j — это переход из s_a в каждую стадию некоторого $T \subseteq S$. Каждое ребро подключено к своему источнику и цели через определенные *порты* H . Набор портов подключенных к v обозначается $H(v)$.

Ребро e имеет исходный порт

$$h_s(e) \in H_o(v) \equiv H(v_s) \subset H(v)$$

и целевой

$$h_t(e) \in H_i(v) \equiv H(v_t) \subset H(v).$$

Задача: Отрисовать ориентированный орграф (V', E') слева направо, где $v \in V'$ и $v \in S$, переходы P описывают ребра E' следующим образом: $e \in E', e = (v, v'), v$ ограничены прямоугольником с левым верхним углом на $pos(v) = (x, y) \in R^2$ и его нижний правый угол в $(x + w, y + h), h, w > 0$. При этом каждый порт $h \in H(v)$ отображается ортогонально на позицию $pos(h) \in R^2$, ограниченной границей прямоугольника v .

Результат: Послойно отрисованный ориентированный граф слева направо представляющий компартментальную эпидемиологическую модель с коэффициентами перехода популяций в момент времени t , отображаемые над ребрами переходов из компартмента s_a в s_b , где $s_a, s_b \in S$, где каждые сегменты линий выравниваются по горизонтали или вертикали, то есть с помощью применения ортогональной маршрутизации.

Специфика отображения компартментальных моделей. Рассматривая предметную область моделирования эпидемий, выделяются разные методы моделирования, в частности применение компартментальных моделей основанные на дифференциальных уравнений изменения популяции групп людей через коэффициенты переходов. Такие модели изображают в своих работах в виде блок-схем потокообразно [3], т. е. слева направо показывая движение популяции из групп в группы.

При программном получении таких изображений нужно минимизировать количество пересечений, отображать послойно каждые компартменты, все ребра представляют собой угловые линии, над линиями отображаются коэффициенты переходов, а также особенность эпидемий в том, что из популяций могут выходить ребра без целевого узла, обозначающие убавление, зависящее от факторов не входящие в моделирование. Компартментам также присуща индуцированность, т. е. зависимость некоторого перехода от стадии не смежной с ним, такие ребра описывают циклы в исходных графах.

Так как входной граф является графом пользователя, сконструированный в приложении, где каждый узел имеет порты, представляющие собой смещение точек исходного и целевого узла ребра отображающийся на конечном изображении.

Обзор существующих методов. Существенный вклад в исследовании методов построения графов был внесен Сугиямой, так называемый: «стиль Сугиямы визуализации графов» или иерархическое рисование графов [4]. В последствии данный подход был не раз переопределен или расширен. Примеры можно найти в части серии книг Lecture Notes in Computer Science [5] или в статье [6] рассматривающей доказательство декомпозиции путей из одного узла в другой за линейное время, применяя радиальную поуровневую укладку.

В данной статье не берется во внимание использование радиальной укладки, так как отображение компартментальных моделей должно быть строго слева направо для представления перехода из одного компартмента в другой.

На основе существующих подходов к решению задачи отрисовки графов программной реализации разработана библиотека Graphviz, использующая технику отображения графа, описанную научными работниками институтом IEEE [7]. Данная техника также основана на алгоритме послойного отображения графа Сугиямы.

Все многоуровневые укладки графов состоят из 5 шагов:

1. Удаление циклов. Т. е. направленный входной граф $G = (V, E)$ становится ациклическим.
2. Назначение слоев. Все вершины назначаются слоям. При этом в модификациях [7] иногда встречается понятия Ранга, что эквивалентно номеру слоя. На этом же этапе, перед началом третьего этапа длинные ребра между вершинами не смежных слоев заменяются цепочками фиктивных вершин и ребер между соответствующими смежными слоями.
3. Минимизация пересечений. Порядок расположения вершин внутри слоя вычисляется таким образом, что количество пересечений ребер уменьшается. Частые вычисления на этом этапе это: Барицентр [4] или Медиана [7] узла относительно веса ребер (обычно вес ребер равен 1, если длинное ребро, то его вес равен сумме всех ребер находящиеся в смежных слоях).
4. Восстановление циклов. Для поддержания структуры изначального графа, на этом этапе возвращаются циклы, удаленные на 1 этапе, а также если существовали ребра, где исходящая вершина равна целевой, то они также возвращаются.
5. Присвоение координат. На этом этапе каждому узлу выдаются координаты. Каждому ребру выдаются координаты изгибов, представляющие фиктивные узлы, относительно выбранной методики, например, кривая Безье.

Помимо всего общего, изображения графов классифицируются на разные требования. В частности, важно рассмотреть модификации, где упоминаются и используются порты узлов, например [8], так как использование портов является частью требований отображения. При этом порты помогают сместить ребра относительно позиции сторон узлов для читаемости изображения и минимизации пересечений.

Учитывая специфику отображения и рассмотренные статьи, для решения поставленной проблемы используется основа интерпретации стиля Сугиямы у библиотеки Graphviz, упомянутой ранее, так как их модификация используется повсеместно в современных программных реализациях и имеет общую сложность $O(VE)$. В рамках статьи данная интерпретация модифицирована в 2-х пунктах, а именно:

- Минимизация пересечений. В данном пункте помимо упорядочивания узлов внутри рангов, также упорядочиваются порты внутри узлов относительно всех портов, которые есть в ранге. Отсутствие упорядоченности портов может привести к увеличению количества пересечений при построении угловых ребер, которые представляют собой совокупность прямых под углом в 90 градусов.

- Присвоение координат. Ранее упомянуто, что фиктивные узлы превращаются в точки изгибов. Для решения проблемы угловых ребер была интерпретирована идея гиперребер [9] в виде создания пограничных линий и учитывания их координат при создании углов в отображаемых ребрах.

Более подробно модификации рассматриваются далее.

Результаты.

Модификация алгоритма послойного отображения компартментальной модели

В результате собственной модификации был добавлен новый этап алгоритма «Создание пограничных прямых» и сохранены все оставшиеся, помимо этапа минимизации, где были использованы идеи [8] упорядочивания портов. Пограничные прямые это прямые представляющие статическое значение координат, где должен происходить изгиб линии ребра.

Пусть L_i, L_{i+1} $i = 0 \dots n - 1$, где L — слой, а i — номер слоя. Тогда расстояние, доступное для размещения пограничных прямых (см. рис. 1) вычисляется:

$$\rho = x(L_{i+1}) - x(L_i) - w - 2\delta,$$

где x — метод получения координаты представления положения слоя в горизонтальном отображении, w — ширина узла, δ — значение смещения доступного расстояния.

Так как поток отображается слева направо, то представление является горизонтальным. Тогда каждая пограничная линия представляет набор точек (см. рис. 2):

$$p_0 = x(L_i)$$

$$p_j = p_0 + \frac{w}{2} + \delta + \rho \frac{j}{v_{\max}(up(L_{i+1}), down(L_{i+1})) + 1},$$

$$p_{v_{\max}} = x(L_{i+1}),$$

где v_{\max} — метод вычисления максимального количества портов из множества портов, которые выше и ниже значения $m(L)$, представляющего собой прямую среднего значения координаты у узлов слоя L . Данное пограничное разделение помогает понять в каком направлении распределить движение ребра, не расширяя целевое изображение в ширину.

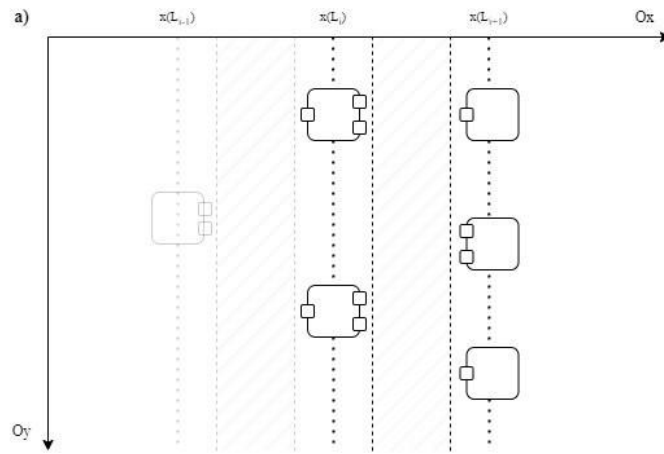


Рис. 1. Закрашенная площадь представляет собой возможное расположение пограничных прямых

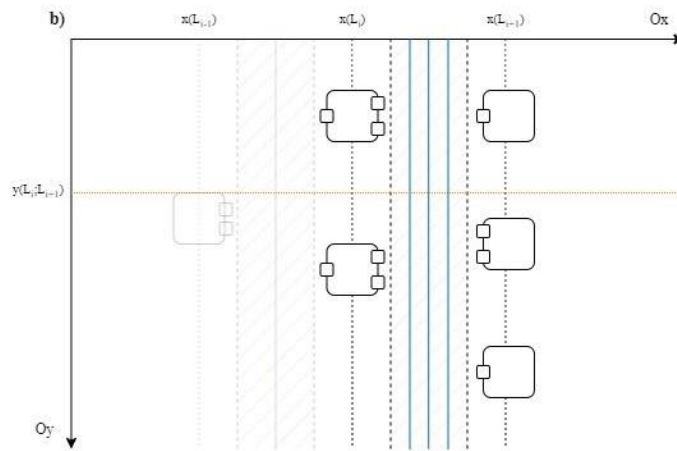


Рис. 2. Расположение пограничных прямых относительно портов

Для составления конечных точек каждого ребра на этапе «Присвоение координат» используются координата y узлов исходного и целевого порта. Всего точек для изгиба 4, каждому ребру выдается индекс пограничной прямой в соответствии с направлением и индексом порта. Если ребро направлено вниз, то с конца контейнера прямых, если вверх, то сначала (рис. 3).

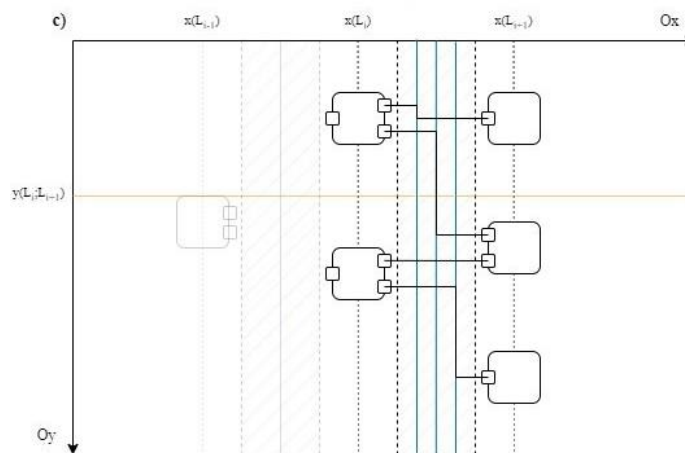


Рис. 3. Искривление ребер в соответствии с их пограничными прямыми

Заключение. Была проведена сравнительная оценка алгоритмов послойной отрисовки орграфов, основанных на стиле Сугиямы, и выбрана модификация, представленная в библиотеке Graphviz. В процессе сравнения были выделены также отдельные работы, посвященные идеям модификации через порты узлов, что было использовано в конечной модификации для отображения компартментальных эпидемиологических моделей через добавление в этап «Минимизации пересечения ребер».

На основе требований, был также добавлен этап создания прямых для изгиба ребер через интерпретацию пограничных прямых в виде изгибов.

В перспективе планируется рассмотреть решение отрисовки индуцированных компартментов, которые представляют собой циклы, через «Г» образные ребра, а также отображение ребер без целевого узла, описанное в спецификации отображения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bjørnstad O.N. Epidemics: models and data using R. — Springer Nature, 2022. — 387 p.
2. Mangan M., Jalvingh A., Nielen M., Mourits M., Dijkhuizen A.A. & Dijkhuizen A. (2001). — Spatial and stochastic simulation to compare two emergency- vaccination strategies with a marker vaccine in the 1997/1998 Dutch classical swine fever epidemic. *Prev. vet. Med.*, 48. — P. 177-200.
3. Miller J.C., Slim A.C., Volz E.M. Edge-based compartmental modeling for infectious disease spread // *Journal of the Royal Society Interface*. — 2012. — V. 9, № 70. — P. 890-906.
4. Sugiyama K., Tagawa S., Toda M. Methods for visual understanding of hierarchical system structures. In: *IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics*, SMC-11(2): 1981. — P. 109-125.
5. Eiglsperger M., Siebenhaller M., Kaufmann M. An efficient implementation of Sugiyama's algorithm for layered graph drawing // *International Symposium on Graph Drawing*. — Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2004. — P. 155-166.
6. Dujmović V. et al. On the parameterized complexity of layered graph drawing // *Algorithmica*. — 2008. — Vol. 52. — P. 267-292.
7. Emden R.G., Eleftherios K., Stephen C.N. A Technique for Drawing Directed Graphs // *IEEE Trans. Software Eng.* — 1993. — SMC-19(3):214-230.
8. Schulze C.D., Spönemann M., Von Hanxleden R. Drawing layered graphs with port constraints // *Journal of Visual Languages & Computing*. — 2014. — Vol. 25. — № 2. — P. 89-106.
9. Eschbach T., Guenther W., Becker B. Orthogonal hypergraph drawing for improved visibility // *J. Graph Algorithms Appl.* — 2006. — Vol. 10, № 2. — P. 141-157.