



CORSO DI *Sistemi Complessi*

Simulazione ad agenti di pandemie

Autore:
Davide TESTUGGINE

Docente:
Prof. Silvano CINCOTTI

Indice

1	Introduzione ai sistemi complessi	2
1.1	Il riduzionismo	2
1.2	Crisi del riduzionismo	2
2	Ipotesi di lavoro dei sistemi complessi	3
2.1	Un esempio pratico: i grafi	3
2.2	Le simulazioni ad agenti	4
3	Il paper in esame: analizzare le pandemie in questo paradigma	5
4	Conclusioni	7

Elenco delle figure

1	Un semplice grafo composto da 6 nodi (ABCDEF) e da 5 archi (in blu). A ha grado 3 mentre F, B ed E hanno grado 2. C ha grado 1 e D ha grado 0.	3
2	Uno sketch di come si comporta il semplice modello ad agenti dell'esempio	4
3	Uno sketch della catena di Markov che modella le interazioni di ogni individuo .	6
4	Output delle due versioni del modello.	8
5	Mappe prese a distanza di 6 giorni l'una dall'altra per ciascuna simulazione. A sinistra la popolazione infetta non cambia stile di vita, mentre a destra metà della popolazione decide di rimanere a casa. Le zone scure contengono più infetti.	9

1 Introduzione ai sistemi complessi

Per meglio inquadrare i sistemi complessi, è necessario fare un'introduzione al problema della complessità e al perché essa vada trattata con differenti strumenti.

1.1 Il riduzionismo

Il progresso scientifico nell'Ottocento è in larga parte dovuto al paradigma riduzionista, che si basava su un'estensione del principio di intelligenza della natura che arrivava a postulare che ogni sistema, non importa quanto complesso, potesse essere sempre “ridotto” a parti sufficientemente piccole da poter essere descrivibili da leggi matematiche semplici e che tutto il resto non contasse. Per esempio, la legge della gravitazione “riduce” un intero pianeta a un solo punto in cui tutta la massa viene concentrata, e tralascia l'intera complessità derivante dal contenuto del pianeta medesimo in quanto “non rilevante”. Rigorosamente, potremmo dire che l'ipotesi riduzionista sia quasi coincidente con quella di linearità (cioè che valga il principio di sovrapposizione), dove il “quasi” riguarda sistemi non lineari in cui comunque l'accoppiamento è molto basso - un tipico esempio è il problema dei tre corpi quando la massa di uno di essi è trascurabile (es. Terra - Sole - Luna quando la massa della Luna viene impostata a 0).

Il paradigma riduzionista ha all'attivo una quantità di successi fondamentali e vede probabilmente il suo vertice nella meccanica laplaciana: grazie alla potenza delle equazioni differenziali in meccanica razionale era possibile modellare matematicamente comportamenti anche molto complessi e questa potenza predittiva ha portato alla famosa citazione di Pierre Simon de Laplace, secondo cui l'unica differenza tra gli uomini e Dio era la conoscenza delle condizioni iniziali dell'universo. Le leggi erano quindi note ad entrambi.

1.2 Crisi del riduzionismo

Il riduzionismo non è più un paradigma attuale. Alcuni dei problemi fondamentali del secolo scorso hanno contribuito a demolirne l'ipotesi di lavoro. Alcuni esempi sono il problema dei tre corpi quando la massa di nessuno di essi è trascurabile e non si pongono limiti alle interazioni tra di essi: esso manca tuttora di una soluzione generale al caso tridimensionale¹ e le previsioni metereologiche a lungo termine: in questo caso c'è una forte dipendenza dalle condizioni iniziali e anche decimali apparentemente insignificanti (oltre la nona cifra ad esempio) possono causare cambiamenti macroscopi.

I sistemi che si comportano come il problema dei tre corpi sono i **sistemi complessi**² e la loro complessità nasce dalla natura delle interazioni fra le loro parti, che per quanto semplici singolarmente causano un comportamento generale non facilmente prevedibile.

I sistemi che si comportano come le previsioni metereologiche sono invece detti **sistemi caotici** e hanno ottenuto una certa popolarità mediatica con la famosa metafora del battito d'ali della

¹Nota personale: ho avuto modo di seguire un talk di Paternain durante la mia permanenza a Cambridge proprio su questo. Il meglio che si può fare è trattarlo in 2 dimensioni, perché aggiungendo la terza compare una componente ortogonale tipo campo magnetico.

²Qui l'accezione vuol dire “composti” e non “complicati”

farfalla che può generare una tromba d'aria. Per essi il problema non è l'interazione complessa tra tante parti, ma la fortissima non-linearità che fa sì che differenze minime di condizioni iniziali causino differenze macroscopiche nel risultato.

2 Ipotesi di lavoro dei sistemi complessi

L'idea di fondo dei sistemi complessi consiste nell'astrarre le relazioni dalla natura degli elementi di base: ciò che conta sono le interazioni e non che cosa le causa.

2.1 Un esempio pratico: i grafi

Molti sistemi reali che presentano complessità possono essere astratti con un grafo, che è un modello in cui contano solo nodi ed archi, ossia elementi e connessioni fra di essi. Che cosa siano esattamente i nodi e che cosa siano gli archi non è importante. Questa astrazione permette di dimostrare teoremi universalmente validi: per esempio, dato un teorema come:

“Ogni grafo $G(V, E)$ possiede un numero pari di vertici di grado dispari” (il grado è il numero di archi incidenti).

La dimostrazione di questa proprietà è semplice e si dimostra per induzione: detto m il numero di archi di G , per $m = 0$ la tesi è banalmente vera, e lo è anche per $m = 1$ dato che questo implica che ci siano solo due vertici connessi, entrambi di grado 1 (quindi un numero pari di vertici di grado dispari). Quelli sconnessi hanno grado 0 quindi non contano perché di grado pari.

Supponiamo che la tesi sia vera per un certo m (chiamiamolo $2k$ dato che è pari). Aggiungendo un arco, si tratterà di collegare due vertici u e v e abbiamo tre casi possibili a seconda del grado dei due vertici:

- Se sono entrambi di grado pari, entrambi diventeranno di grado dispari. Pertanto, se prima c'era un numero di oggetti di grado dispari $2k$, ora ce ne saranno $2k + 2$ e la proprietà è mantenuta.
- Se sono entrambi di grado dispari, entrambi diventeranno di grado pari. Pertanto si passerà da $2k$ a $2k - 2$ e la proprietà è rispettata.
- Se u ha un numero dispari di archi incidenti $2q + 1$ e invece v ha un numero pari di archi incidenti $2r$, aggiungendo un arco ad entrambi otteremmo $2q + 2$ vertici in u e $2r + 1$ vertici in v (quindi in sostanza i ruoli si scambiano). Se la proprietà era vera prima continua quindi ad essere vera ancora adesso.

QED

Questo semplice teorema può essere applicato a domini diversissimi e permette di dimostrare proposizioni apparentemente diversissime fra loro:

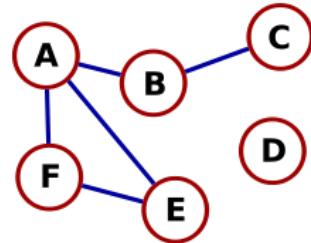


Figura 1: Un semplice grafo composto da 6 nodi (ABC-DEF) e da 5 archi (in blu). A ha grado 3 mentre F, B ed E hanno grado 2. C ha grado 1 e D ha grado 0.

- Ad un ricevimento, il numero di persone che hanno stretto la mano a un numero dispari di persone è pari.
- In un circuito elettronico, il numero di componenti connesso a un numero dispari di componenti è pari.
- In una casa il numero di stanze connesse a un numero dispari di stanze è pari.
- In una molecola il numero di atomi legati a un numero dispari di atomi è pari.
- Su Facebook, il numero di utenti che posseggono un numero dispari di amici è pari.

Astrarre dal dominio permette quindi di focalizzarsi solo sulla topologia delle interazioni, quasi come se si dimostrassero teoremi su una “forma” platonica sottostante.

2.2 Le simulazioni ad agenti

Le simulazioni ad agenti estendono questo paradigma ai sistemi dinamici: se è possibile astrarre le relazioni in un sistema statico, si può pensare di estendersi ad un sistema dinamico scaricando la complessità delle interazioni su una simulazione: nell’ipotesi che ciascun elemento che compone il sistema dinamico sia pienamente descrivibile in modo “semplice” (computazionalmente e/o matematicamente), si può evitare di modellare matematicamente le interazioni fra gli elementi istanziando una simulazione che vada a calcolare, per ogni elemento e per ogni istante, che cosa succede.

Un esempio semplicissimo potrebbe essere un sistema per il calcolo della costante π iterativamente. Si prenda un quadrato di lato l e si tracci all’interno di esso un quarto di cerchio di raggio l centrato in un vertice (come in figura 2). Dopodiché, si facciano “cadere” dei punti nella figura ad ogni istante secondo una distribuzione uniforme. In questo caso quindi i nostri “agenti” hanno come proprio comportamento solo quello di “estrarre” la propria posizione. A questo punto, il calcolo di π è presto fatto poiché è dato dal rapporto fra i punti che cadono dentro al settore circolare sul totale. Sappiamo infatti che l’area totale è l^2 mentre il settore ha area $\frac{1}{4}\pi l^2$ quindi le due aree stanno fra loro in un rapporto $1 : \frac{\pi}{4}$. Pertanto, se si fanno cadere N punti a caso nella figura, teoricamente $N\frac{\pi}{4}$ si troveranno all’interno del cerchio. Diciamo che nell’esperimento cadano dentro al settore circolare solo M punti su N , con $M \approx N\frac{\pi}{4}$. Si può quindi ottenere un’approssimazione³ di π da:

$$\pi \approx N \frac{M}{4}$$

Un agente può però essere molto più raffinato di questo semplice modello e tenere conto di più fattori e pertanto può rivelarsi adatto a sfide ben più complesse.

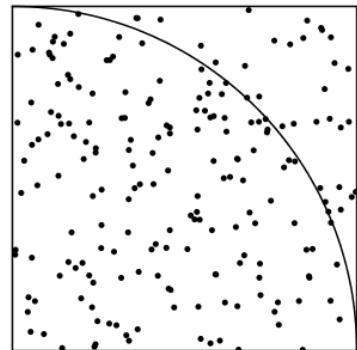


Figura 2: Uno sketch di come si comporta il semplice modello ad agenti dell’esempio

³Il teorema del limite centrale di Kolmogorov è sufficiente a garantire che l’errore converga al crescere di N , ma non lo dimostro.

3 Il paper in esame: analizzare le pandemie in questo paradigma

In questo quadro si colloca lo studio delle pandemie, che essendo basate sul contatto fra persone non sono modellabili matematicamente. In particolare, lo scoppio della SARS nel 2002-2003 ha dimostrato come la scienza fosse assolutamente impreparata a fare previsioni sul contagio per ottimizzare la risposta. In situazioni di crisi, infatti, le risorse sono limitate e pertanto vi è la necessità di allocarle con intelligenza. Altre sfide riguardano la gestione del carico degli ospedali, se chiudere le scuole o se mettere delle persone in quarantena. Non c'è una risposta specifica perché anche gli obiettivi possono essere molteplici: per esempio, si può scegliere di minimizzare le morti oppure di minimizzare il contagio, con scelte differenti. Per minimizzare le morti si potrebbero vaccinare le categorie più deboli come i bambini e gli anziani, mentre per minimizzare il contagio bisognerebbe vaccinare prima coloro che interagiscono con un grande numero di persone come ad esempio il personale sanitario.

Questo tipo di differenze è fuori dalla portata dei modelli matematici a causa delle assunzioni forti che sono ad esse necessarie. Il paper in esame ne cita tre:

1. La popolazione è omogeneamente distribuita e quindi le persone che vengono a contatto con gli infetti sono scelti uniformemente a caso tra la popolazione
2. Tutti gli individui hanno approssimativamente lo stesso numero di contatti
3. Tutti gli individui trasmettono la malattia con la stessa probabilità.

È facile vedere come queste ipotesi di lavoro impongano semplificazioni troppo forti in un modello in cui tener conto dei vicinati, delle differenti professioni e dei differenti sistemi immunitari di giovani e anziani è critico per poter elaborare una strategia.

Il paradigma della simulazione ad agenti permette di simulare una popolazione a livello di singolo cittadino, calcolando la probabilità che esso venga infettato in modo indipendente da quella di tutti gli altri. Questo permette di modellare ogni cittadino in modo diverso, e quindi di tener conto della differenza di abitudini e di risposte alle crisi che ciascun individuo possiede.

Il metodo presentato nel paper in esame⁴ assegna a ciascun individuo una catena di Markov a 3 stati. Il modello prende il nome da questi tre stati e si chiama S-I-R (Susceptible, Infectious, Removed). “Susceptible” vuol dire in salute (e quindi a rischio di contagio), “Infectious” vuol dire ovviamente malato e “Removed” è un individuo morto o uno guarito (quindi in entrambi i casi fuori dai giochi).

Riportiamo qui brevemente il modello per sottolineare la facilità con cui si può modellare un singolo agente ottenendo comunque un comportamento globale interessante.

La simulazione ad agenti è inevitabilmente a tempo discreto: si divide pertanto l'intervallo di interesse in istanti, e si calcola lo stato del sistema ad ogni istante. Chiameremo ciascuno di questi istanti n . Pertanto, ogni singolo istante c'è la possibilità che una nuova persona si ammali e che una persona ammalata muoia o guarisca. La probabilità che una persona sana si ammali è descritta dalla probabilità di transizione tra lo stato S e lo stato I ed è data da:

⁴I dati del paper si trovano in bibliografia

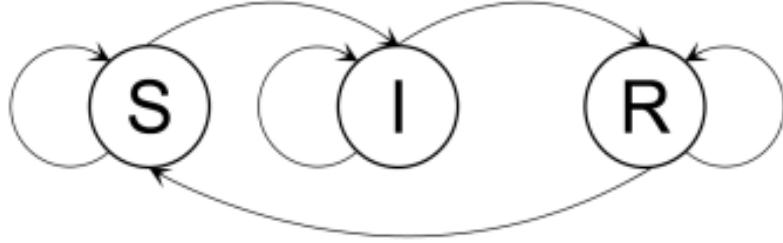


Figura 3: Uno sketch della catena di Markov che modella le interazioni di ogni individuo

$$Pr^n_j(S, I) = \sum_{i \in Infected} (t^n_{ij} b^n_{ij} + c^n_{ij}) \forall j \in Susceptible$$

La formula modella le diverse cause per le quali una persona può venir contagiata: il coefficiente b^n_{ij} è la probabilità di contagio dalla persona i alla persona j all'istante n . Esso quindi varia tra le persone, in modo da tener conto del differente sistema immunitario: se la persona q è un anziano e la persona r è un giovane, data una terza persona infetta p , la probabilità b^n_{pq} che l'anziano si ammali all'istante n sarà quindi maggiore della probabilità che ad ammalarsi sia il giovane, data da b^n_{pr} . In aggiunta, il coefficiente b viene moltiplicato per il tempo t durante il quale le due persone sono rimaste in contatto: questo permette quindi di modellare la differenza nelle probabilità di contagio fra soggetti estranei che si incontrano sporadicamente e i familiari che vivono a contatto con la persona infetta. Per concludere, gli autori hanno incluso nel modello un terzo coefficiente c che rappresenta la probabilità di ammalarsi per contagio indiretto (e quindi non ha dipendenza dal tempo). Per esempio, si può contrarre l'infezione toccando la maniglia di una porta precedentemente toccata da una persona infetta. Gli autori specificano che il parametro c è stato impostato euristicamente con l'aiuto di un epidemiologo.

La seconda transizione che viene modellata è quella che riguarda chi muore ad ogni istante. Anche questa non richiede calcoli complicati: l'assunto fondamentale è che una persona j , quando si ammala, resta malata per un massimo di m_j giorni (il numero viene generato da una distribuzione che tiene conto dell'età). Dato il tasso di mortalità della malattia d^* estraibile dalle statistiche definito come la probabilità di morire ogni giorno, la probabilità di sopravvivere alla giornata è chiaramente $(1 - d^*)$. Supponendo che la probabilità di morire al giorno k sia indipendente da quella di morire il giorno $k - 1$, si ottiene che la probabilità di rimanere vivi al termine dei m_j giorni è data da:

$$Pr^n_j(I, I) = (1 - d^*)^{\frac{1}{m_j}}$$

Pertanto, la probabilità che l'agente j non arrivi in fondo agli m_j giorni di malattia a cui era stato predestinato è data da:

$$Pr^n_j(I, D) = 1 - (1 - d^*)^{\frac{1}{m_j}}$$

Per concludere, il modo in cui il modello gestisce le guarigioni è semplice: al termine degli m_j giorni di malattia, tutti i sopravvissuti si considerano guariti, andando dallo stato I allo stato R con probabilità 1 (quindi di fatto la probabilità di guarigione è assorbita nel calcolo stocastico della durata della malattia in m_j giorni).

Il modello è inoltre facilmente estendibile a virus che mutano rapidamente e che impediscono ai soggetti di immunizzarsi: basta introdurre un collegamento tra lo stato R e lo stato S, ricordandosi di liberare gli agenti “defunti”. La probabilità che questo avvenga può essere discussa con gli epidemiologi e basata su dati reali, e il modello consentirebbe anche di tener conto del fatto che chi si è ammalato già una volta è, se non immunizzato, quantomeno più resistente a una nuova infezione: basterebbe infatti moltiplicare le probabilità di transizione (S, I) per un fattore minore di 1 in tutti questi soggetti.

Ogni agente è quindi completamente determinato dalla catena di Markov (e quindi ogni agente è un automa a stati finiti). La simulazione ha fatto girare 5 milioni di automi, e gli autori riportano che il loro modello permette di simulare un singolo giorno in un paio di secondi, e due mesi possono essere calcolati in meno di due secondi. Tuttavia, il paradigma prevede di girare un gran numero di simulazioni dello stesso fenomeno per far sì che il teorema del limite centrale faccia il suo corso, ossia per far convergere le statistiche campionarie con quelle teoriche. In questo caso, gli autori riportano che 1000 simulazioni richiederebbero circa 24h di tempo di computazione. Per aggirare la limitazione, gli autori hanno utilizzato MPI in un cluster Beowulf di 32 nodi con 256 CPU totali e il tempo totale per il calcolo di 1000 simulazioni di quei 60 giorni di infezione è sceso a 13 minuti circa.

4 Conclusioni

La nota dolente di questo paper è la valutazione: come valutare l'accuratezza di un modello pensato per eventi che sono per loro natura rari? L'intera idea dell'uso di una simulazione ad agenti nasce dalla necessità di avere un modello affidabile della realtà su cui testare l'esito di varie decisioni e policy sulle quali non si hanno abbastanza dati in letteratura.

Pur comprendendo questa complicazione, il lato di valutazione di questo paper è debole: l'unica valutazione che ci viene offerta è che l'esito della simulazione appare “ragionevole” con quanto ci aspetteremmo intuitivamente. Gli autori infatti generano le distribuzioni di persone in ciascuno degli stati della catena di Markov al termine della simulazione, differenziando in due casi. Nel primo, i malati continuano a lavorare normalmente e a mantenere le stesse interazioni che avevano prima. Nel secondo, il 50% dei malati resta a casa e quindi mantiene le stesse interazioni di prima solo con i familiari, mentre riduce a zero quelle con l'esterno. Si può vedere dalle distribuzioni presentate (riportate in figura 4 per completezza) che la distribuzione delle morti cambia nei due casi, mostrando che il numero di simulazioni in cui muoiono più di 10 individui sono molto più rare quando gli automi restano a casa rispetto a quando continuano con la loro vita solita.

Il secondo grafico presentato, visibile in figura 5, rappresenta la distribuzione dei malati nello spazio nei due casi. Non vengono tuttavia forniti dettagli sulla mappa e che cosa essa rappresenti: non viene detto se la città è Toronto, né se gli agenti sono stati distribuiti nella Toronto virtuale seguendo la distribuzione di popolazione di quella reale (e se sì, dove hanno preso i

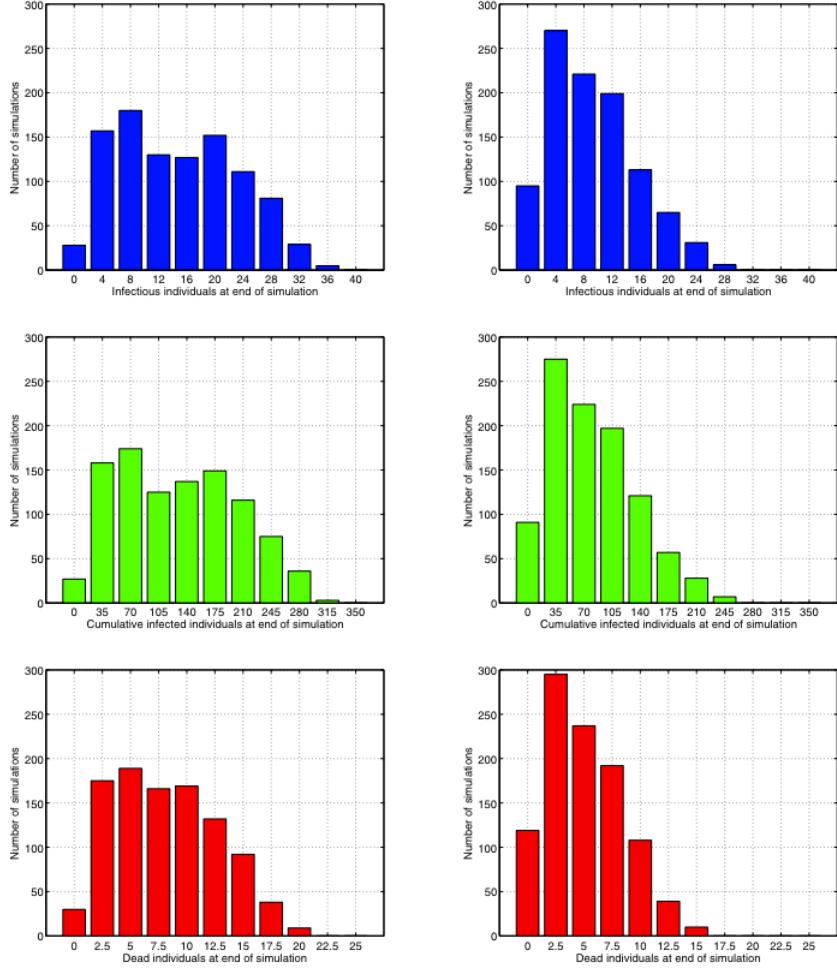


Figura 4: Output delle due versioni del modello.

dati e che semplificazioni sono state fatte?). Soprattutto, ciò che manca è il confronto con la heatmap della Toronto reale al termine dei 60 giorni di epidemia reale. Tutto ciò che questi risultati sembrano dirmi è “potete vedere che quando la gente sta in casa ci sono meno malati”.

Trovo quindi il paper interessante per quanto riguarda la semplicità dell’approccio, facilmente implementabile e non eccessivamente pesante computazionalmente soprattutto perché scalabile (non vedo problemi a implementarlo in un’ottica di MapReduce) e ho anche la buona fede di credere che rappresenti un modello plausibile della realtà, ma penso che un decision-maker che voglia sfruttare un simile tool in una reale situazione di emergenza abbia bisogno di prove reali e falsificabilità per potersi fidare.

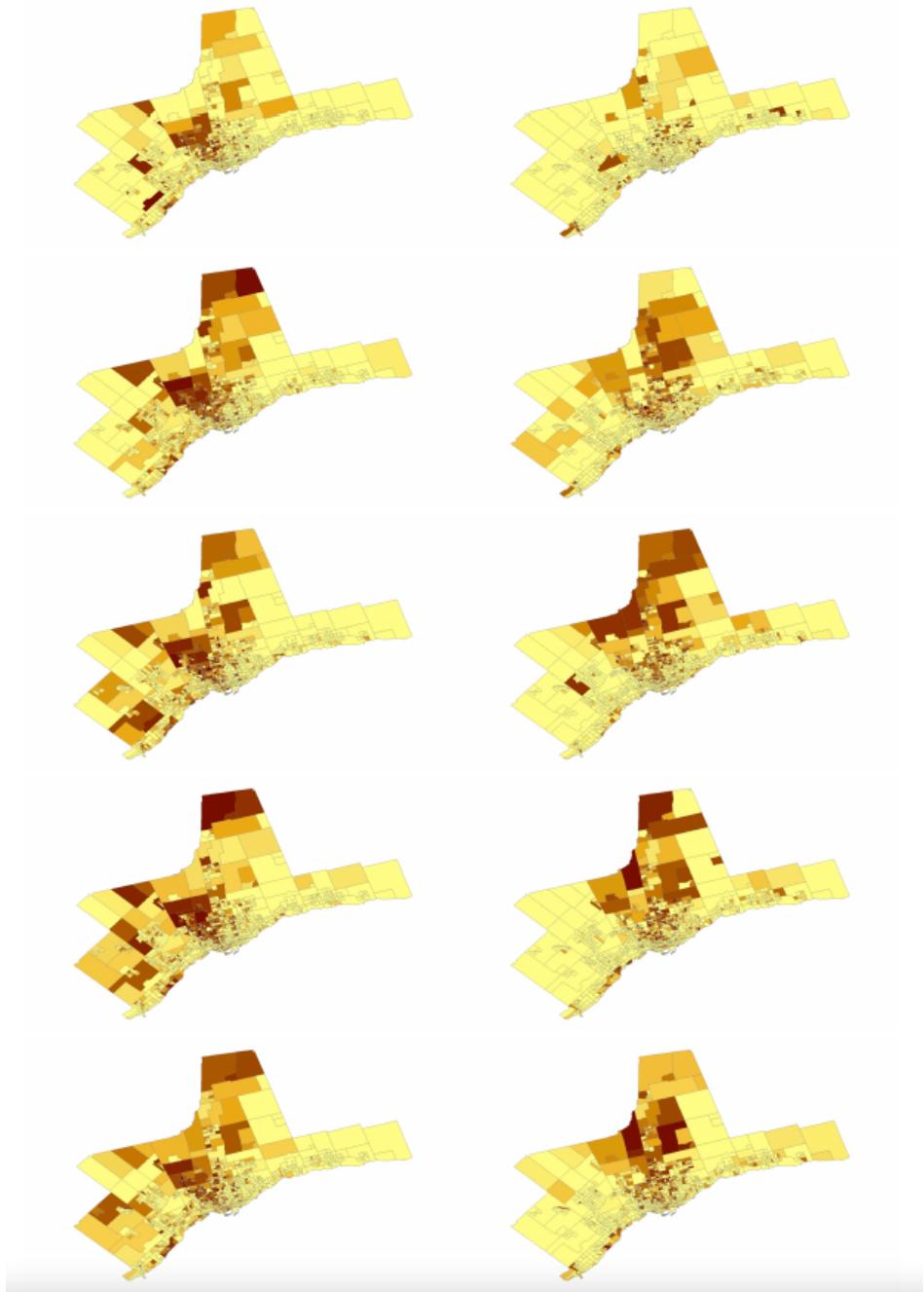


Figura 5: Mappe prese a distanza di 6 giorni l'una dall'altra per ciascuna simulazione. A sinistra la popolazione infetta non cambia stile di vita, mentre a destra metà della popolazione decide di rimanere a casa. Le zone scure contengono più infetti.

Riferimenti bibliografici

- [1] Aleman, Dionne M., Theodoras G. Wibisono, and Brian Schwartz. "Accounting for individual behaviors in a pandemic disease spread model." *Winter Simulation Conference*. Winter Simulation Conference, 2009.