Агентно-ориентированное моделирование распространения эпидемий с помощью кинетического метода Монте-Карло

Тан Жуй

Студент, 2 курс магистратуры

e-mail: 2120210006@smbu.edu.cn

Факультет вычислительной математики и кибернетики, Университет МГУ-ППИ в Шэньчжэне, Шэньчжэнь, КНР

Научный руководитель – Семендяева Наталья Леонидовна

Агентно-ориентированные стохастические модели предназначены для детального описания поведения систем, состоящих из большого числа взаимодействующих элементов. Идеи агентного моделирования с использованием метода Монте-Карло высказывались ещё в конце 40-х годов XX века в связи с появлением ЭВМ, однако они не нашли широкого применения до 1990-х годов, поскольку их реализация требует значительных вычислительных затрат.

Основным преимуществом агентно-ориентированных моделей является возможность изучения взаимодействия отдельных агентов и их воздействия на систему в целом. Такая информация важна в задачах эпидемиологии; на ее основе могут приниматься решения о проведении карантинных мероприятий, введении ограничительных мер, распределении медицинской помощи по регионам, закупке медикаментов и оборудования и т.д.

В данной работе построена пространственная стохастическая агентно-ориентированная модель распространения эпидемий, в основе которой лежит известная схема SIRS [1,2]:

I + S → I + I (константа скорости ; *инфицирование*),

I → R (константа скорости ; *выздоровление*),

R → S (константа скорости ; *потеря иммунитета*).

Символами I, R, S обозначены, соответственно, инфицированные переносчики болезни, выздоровевшие особи, имеющие временный иммунитет, и здоровые особи, которые могут заразиться от соседних инфицированных. Каждой особи популяции ставится в соответствие вершина неориентированного графа; в качестве графа в работе рассматривается регулярная двумерная квадратная решётка. Принципиальная возможность заражения одной особи от другой определяется наличием ребра между соответствующими вершинами, а сам процесс заражения является стохастическим.

Эволюция популяции в марковском приближении подчиняется основному кинетическому уравнению, описывающему изменение во времени вероятностей наблюдения всех возможных дискретных состояний графа. Для модели SIRS основное кинетическое уравнение содержит 3N линейных обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Решать такую систему невозможно даже при использовании решёток малого объема. Например, для решётки размеров 10×10 система уже содержит более 1047 уравнений. Однако можно рассчитать отдельные траектории системы, используя кинетический метод Монте-Карло [3,4]. В качестве алгоритма выбора событий в работе использован эффективный метод из группы n-fold way [5], что позволяет рассматривать крупные популяции, сопоставимые по численности с населением крупнейших городов мира или целых стран.

Расчеты показали, что при определенных условиях в популяции может наблюдаться спонтанное зарождение спиральных и концентрических волн (Рис. 1), которое переходит в состояние, называемое «спиральным хаосом», при котором фрагменты спиральных волн вращаются, сталкиваются, частично аннигилируют, создают новые фрагменты. Состояние спирального хаоса сохраняется достаточно долго, при этом концентрация инфицированных особей остается низкой. Остановить циркуляцию вируса может вакцинирование. Для рассматриваемых условий, которые соответствуют достаточно жёстким ограничительным мерам, необходимо вакцинировать всего ≈20% населения, чтобы полностью остановить распространение вируса.

Иллюстрации

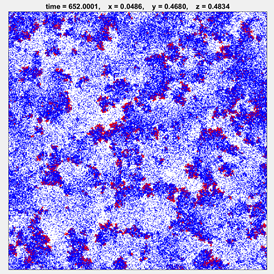


Рис.1. Мгновенный снимок состояния решетки. 500х500 узлов. Значения параметров: Синий цвет – особи с иммунитетом; белый цвет – особи, восприимчивые к болезни; инфицированные особи находятся на гребнях эпидемиологических волн.

Литература

1. *Мюррей Дж.* Математическая биология. Том 1: Введение. – М.: Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика: Ин-т компьютерных исслед., 2009, 774 с. Том 2: Пространственные модели и их приложения в биомедицине. – М.: Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика: Ин-т компьютерных исслед., 2011, 1104 с.
2. *De Souza D.R., Tomé T.* Stochastic lattice gas model describing the dynamics of the SIRS epidemic process // Physica A, 2010, Vol. 389, P. 1142–1150.
3. Chatterjee A., Vlachos D.G., An overview of spatial microscopic and accelerated kinetic Monte Carlo methods // J. Computer-Aided Mater Des., 2007, Vol. 14., P. 253–308.
4. Gillespie D.T., A general method for numerically simulating the stochastic time evolution of coupled chemical reactions // J. Comput. Phys., 1976, Vol. 22, P. 403–434.
5. *A.B. Bortz, M.H. Kalos, J.L. Lebowitz.* A new algorithm for Monte Carlo simulation of Ising spin systems // J. Comp. Phys., 1975, Vol. 17, P. 10-18.

Пусть индивидуумы являются вершинами некоторого графа из вершин, каждая из которых может находиться в одном из состояний; для модели SIRS. Принципиальная возможность заражения одного от другого индивидуума определяется наличием ребра графа между соответствующими вершинами, а сам процесс заражения является стохастическим.

Можно выделить большой класс пространственных стохастических агентно-ориентированных моделей, в которых эволюция системы описывается марковским случайным процессом с дискретным множеством состояний и непрерывным временем, а потоки событий являются независимыми пуассоновскими процессами с заданными интенсивностями. В рамках этого класса моделей, в настоящей работе мы рассматриваем пространственную эпидемиологическую модель SIRS. Предполагается, что все индивидуумы являются вершинами некоторого неориентированного графа (сети). Возможные контакты индивидуумов определяются рёбрами графа (связями в сети) на котором определена модель. Такие модели называют сетевыми [11]. Если сеть имеет фиксированную структуру, то сетевой подход плохо описывает поведение индивидуумов, поскольку в реальной жизни они могут перемещаться в пространстве и контактировать (на работе, в общественном транспорте, в магазине и т.д.) с большим числом других людей.

На микроуровне важно учесть пространственное положение агентов и их возможные контакты с другими агентами. Пусть индивидуумы являются вершинами некоторого графа из вершин, каждая из которых может находиться в одном из состояний; для модели SIRS. Принципиальная возможность заражения одного от другого индивидуума определяется наличием ребра графа между соответствующими вершинами, а сам процесс заражения является стохастическим. Простым примером графа является регулярная двумерная квадратная решётка. Если заданы периодические граничные условия, то каждый узел решётки () связан рёбрами с 4-мя ближайшими соседями (смежными вершинами). Такая структура позволяет инфекции распространиться на всю решётку за счёт взаимодействия с соседними узлами. Чтобы дать возможность индивидуумам контактировать с возможно большим, но ограниченным числом других индивидуумов, можно разрешить им мигрировать по решётке, меняясь местами с соседями.

Решёточная эпидемиологическая модель SIRS может рассматриваться и как модель химической реакции на поверхности катализатора. В процессе каталитических реакций молекулы/атомы реагентов находятся в узлах кристаллической решётки поверхности, при этом частицы могут мигрировать по поверхности и вступать во взаимодействия друг с другом. Для модели SIRS, кинетическая схема мнимой каталитической реакции запишется в виде:

(1) Ii + Sj → Ii + Ij, (константа скорости ; *инфицирование*)

(2) I → R, (константа скорости ; *выздоровление*)

(3) R → S, (константа скорости ; *потеря иммунитета*)

(4) Si + Ij → Ii + Sj, (константа скорости )

(5) Si + Rj → Ri + Sj, (константа скорости )

где узлы *i* и *j* являются ближайшими соседями на решётке. Тремя возможными состояниями каждого узла решётки являются: инфицированные переносчики болезни (“Infected”); выздоровевшие индивидуумы, имеющие временный иммунитет (“Recovered”); здоровые индивидуумы, которые могут заразиться от соседних инфицированных (“Susceptible”). Рассматриваются пять возможных элементарных событий, которые могут происходить с вероятностями переходов , , , ,, которые заданы в единицах обратного времени. Стадии (4)-(5) описывают процесс миграции по обменному механизму. Далее будем считать, что . Отметим, что для получения решёточной модели SIR следует задать , а для модели SIS – .

Эволюция рассматриваемой системы подчиняется основному кинетическому уравнению (“master equation”), описывающему изменение во времени вероятностей наблюдения всех возможных дискретных состояний решётки. Для моделей SIR/SIRS основное кинетическое уравнение содержит 3N линейных ОДУ первого порядка. Решать такую систему невозможно даже при использовании маленьких решёток, например, для решётки размеров 10×10 система уже содержит более 1047 уравнений. Однако можно рассчитать отдельные траектории эволюции системы, используя кинетический метод Монте-Карло (“Kinetic Monte Carlo”, KMC [6,7]). Существует несколько статистически эквивалентных вариантов реализации кинетического метода Монте-Карло (МК). Один из таких вариантов при имитации процесса реакции на решётке состоит из следующих этапов.

I. *Задание начального состояния решётки.*

II. *Вычисление скоростей элементарных событий.* На текущий момент времени  вычисляются скорости всех возможных элементарных событий, переводящих решётку в новое состояние; затем вычисляется суммарная скорость .

III. *Выбор события и изменение состояния решётки.*Случайно выбирается одно из возможных элементарных событий с вероятностью, пропорциональной его скорости. Изменяется состояние решётки в соответствии с выбранным событием.

IV. *Вычисление шага по времени.* Вычисляется момент времени  выхода системы из текущего состояния: , где  − случайная величина, равномерно распределённая на интервале . Осуществляется переход на следующий шаг к этапу II, если не достигнуто заданное максимальное значение времени.

Этот вариант кинетического метода МК называется прямым методом (“direct method” []) и относится к варианту алгоритмов “без отказов” (“rejection-free”). По нашему опыту, прямой метод является наиболее универсальным и эффективным, однако он требует написания достаточно сложных алгоритмов для работы с большими массивами данных. Обычно вычисление скоростей всех возможных элементарных актов (этап II) достаточно выполнить только в начальный момент времени, а в дальнейшем можно вычислять лишь те скорости, которые изменились в результате осуществления выбранного элементарного события. Наиболее затратным по времени счёта является этап выбора одного события (этап III). Если этот выбор правильно организован, то число арифметических операций на каждом временном шаге алгоритма практически не зависит от размеров решётки, что позволяет проводить расчёты на очень больших решётках. На обычном ноутбуке нами проводились расчёты для модели SIRS на решётках, содержащих до 1010 узлов.