Population Modeler — программа для индивидуум-ориентированного моделирования сообществ взаимодействующих особей

Борис Юрьевич Пичугин, Омский филиал Учреждения Российской академии наук Института математики им. С.Л. Соболева Сибирского отделения РАН

Базовые предположения

Программа **Population Modeler** предназначена для проведения численных экспериментов с моделями сообществ особей, удовлетворяющих следующим предположениям:

- все сообщество поделено на несколько популяций;
- каждая особь сообщества может быть охарактеризована набором параметров;
- изменение состояния сообщества происходит скачкообразно;
- скачки состояния сообщества могут быть вызваны переходами или взаимодействиями.

Примеры параметров: пол, масса, стадия развития, ...

Переходы

- переход — это «запланированное» изменение состояния сообщества;
- переходы могут быть нескольких типов;
- моменты возникновения переходов описываются ветвящимся процессом типа Беллмана–Харриса с несколькими типами частиц, в котором тип частицы интерпретируется как тип перехода;
- цепь переходов может быть инициирована в момент рождения особи или в момент взаимодействия особей;
- распределение времени между переходами и результат перехода может зависеть от параметров особей, участвующих в переходах.

Примеры переходов: вступление в половозрелую стадию, производство потомства, гибель в результате старения, ...

Взаимодействия

- взаимодействие — это «незапланированное» изменение состояния сообщества;
- взаимодействия могут быть нескольких типов;
- моменты возникновения взаимодействий описываются пуассоновским потоком, интенсивность которого может зависеть от времени и состояния сообщества;
- каждой особи может быть сопоставлен набор весов, которые характеризуют интенсивность с которой особь принимает участие во взаимодействиях;
- в результате взаимодействия каждый участник может изменить свои параметры, или произвести потомство, или погибнуть;
- в результате взаимодействия может быть инициирована цепь переходов.

Примеры взаимодействий: конкуренция, хищничество, воздействие среды, ...

В частности, при помощи данной программы можно рассчитывать реализации широкого класса ветвящихся случайных процессов с взаимодействием частиц и марковских случайных процессов как с дискретным так и с непрерывным временем.

Особенности реализации

Первая версия программы

В 2000–2006 годах на языке C++ была написана первая версия программы, которая обладала следующими особенностями.

- модель описывается на специально разработанном языке;
- использован алгоритм накопления ошибки для представления моментов времени;
- эффективное нахождение момента ближайшего перехода (поиск в дереве);
- возможность расчета сообществ в несколько сотен тысяч особей;
- использование мультипликативного датчика псевдослучайных чисел $\mathbf{mod}\ \mathbf{2^{40}}$, с возможностью задавать начальный прыжок;

Скачать эту версию можно по адресу `http://iitam.omsk.net.ru/ pichugin/files/publication/pm.zip`.

Вторая версия программы

Работа над второй версией программы началась в 2009 году и продолжается до сих пор. Для второй версии в качестве языка программирования выбран язык Java. Особенности реализации второй версии следующие:

- кросплатформенность;
- более эффективный алгоритм поиска ближайшего момента перехода, построенный на базе алгоритма сортировки кучей;
- более эффективный алгоритм выбора особи для взаимодействия, построенный на базе почти полного бинарного дерева;
- использование мультипликативного датчика случайных чисел $\mathbf{mod}\ \mathbf{2^{128}}$, с возможностью задавать начальный прыжок и прыжок на каждую реализацию;
- эффективное использование памяти позволяет рассчитывать сообщества в несколько миллионов особей;
- параллельное вычисление реализаций как в рамках одного вычислительного узла (потоки), так и на нескольких вычислительных узлах, объединенных в сеть (используется технология RMI);
- программа реализована в виде библиотеки java-классов (интерфейса пользователя пока нет).

Эта версия программы публично пока не распространяется.

Пример 1. Ветвящийся процесс

Рассмотрим ветвящийся процесс, в котором каждая особь x популяции

- живет время $\ell_x \in \mathbf{U(0;1)}$;
- в возрасте $a_{x1}, a_{x2} \in \mathbf{U}(\frac{1}{3};\mathbf{1})$ производит по одному потомку, если $a_{xi} < \ell_x$;

Известно [1], что $\mathbf{E}Z(t) \sim e^{\alpha+\beta t}$, $\alpha = \mathbf{0.1164}$, $\beta = \mathbf{-0.7181}$.

При помощи **Population Modeler** были вычислены и осреднены $\mathbf{10^6}$ реализаций процесса $Z(t)$. В результате получена оценка $\mathbf{E}Z(t)$, из которой методом МНК получили оценки параметров

$$\alpha \in (\mathbf{0.0984;0.1213}), \quad \beta \in (\mathbf{-0.7193;-0.7171}), \quad \mathbf{95\%},$$

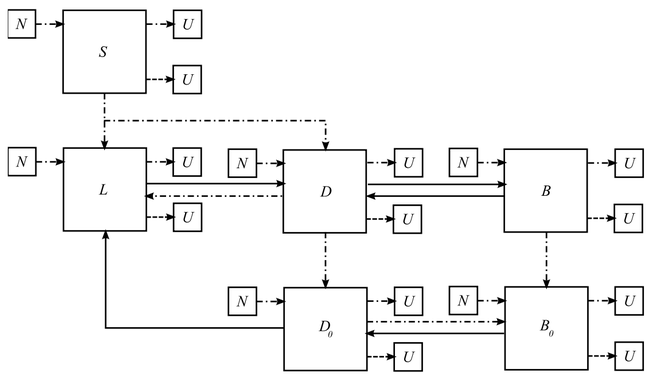
которые хорошо согласуются с теоретическими данными.

Пример 2. Модель распространения туберкулеза

В работе [2] была предложена детерминированная модель распространения туберкулёза в виде системы дифференциальных уравнений, в которой вся популяция поделена на 6 когорт:

- S — неифицированные (восприимчивые индивидуумы),
- L — индивидуумы, несущие латентную инфекцию,
- D — невыявленные больные ТБОД, без выделения микобактерий,
- B — невыявленных больне ТБОД, выделяющие микобактерии,
- D_0 — выявленные больные ТБОД, без выделения микобактерий,
- B_0 — выявленне больне ТБОД, выделяющих микобактерии,

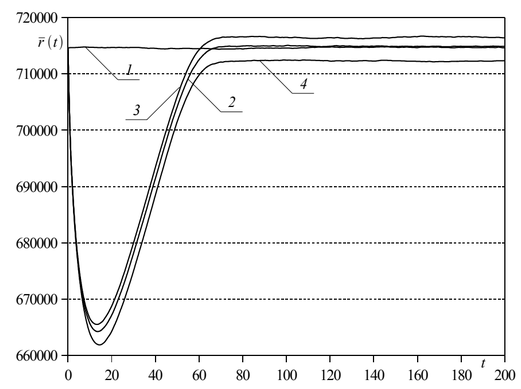
а потоки между когортами изображены на схеме



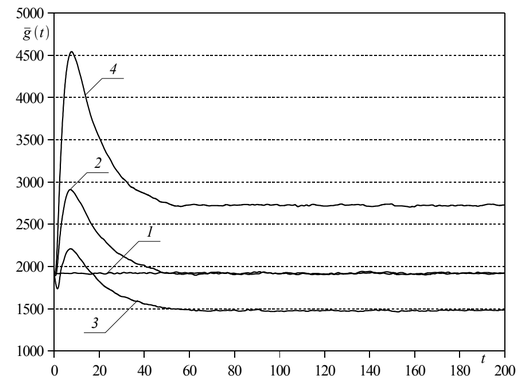
Здесь N — это новые индивидуумы, а U — ушедшие из популяции.

В работе [3] мы предложили стохастическую индивидуум-ориентированную модификацию этой модели, в которой использованы неэкспоненциальные законы распределения продолжительности жизни индивидуумов и времени их пребывания в когортах. В частности, для продолжительности жизни использовалось распределение Мейкхама-Гомперца. Для определения потоков индивидуумов между когортами с мы использовали *переходы*. Заражение индивидуумов происходило в результате *взаимодействий* пар здоровых и зараженных индивидуумов.

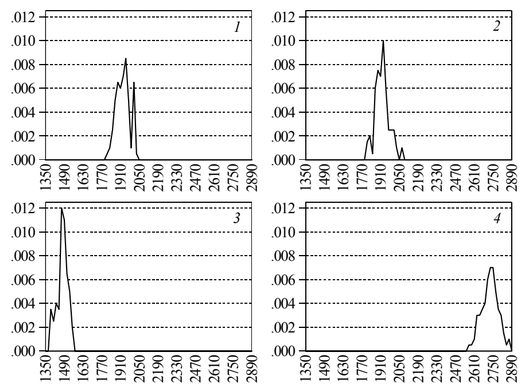
На графиках приведены результаты вычислений в программе **Populations Modeler** для четырёх разных наборов распределений и параметров модели. Наборы параметров обозначены числами 1, 2, 3, 4.



Оценка средней численности популяции.



Оценка средней численности выявленных больных.



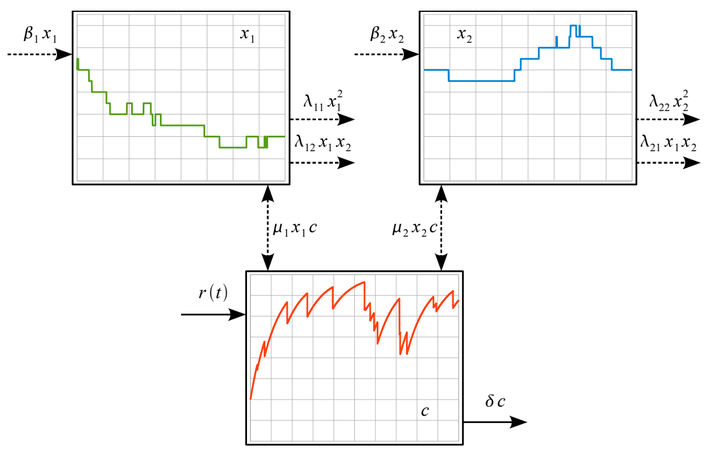
Гистограммы распределений численности выявленных больных в момент $t = 200$.

Пример 3. Модель травления сообщества

В работе [4] нами была предложена модель сообщества особей в условиях непрерывного поступления токсичных веществ (ТВ) в среду обитания. Особенностью этой модели является то, что динамика сообщества описывается в виде случайного ветвящегося процесса с несколькими типами частиц и взаимодействием, а поступление токсичных веществ — в виде дифференциального уравнения. Предположения модели:

- сообщество поделено на несколько популяций (типов частиц);
- особи дают потомство с постоянной интенсивностью;
- особи погибают вследствие парной конкуренции с другими особями сообщества (взаимодействие);
- приток особей извне и миграция особей отсутствуют;
- в среду обитания особей поступает токсичное вещество (ТВ): $\dot{c} = r - \delta c$.
- интенсивность взаимодействия особи с ТВ пропорциональна объему ТВ;
- при взаимодействии особи с ТВ расходуется случайное количество ТВ и, если это количество болше некоторого порога, то особь погибает.

Схема модели для двух популяций

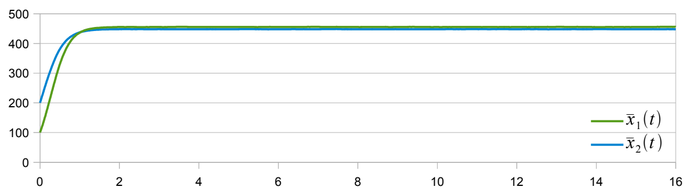


$$\dot{c} = r(t) - \delta\, c(t)$$

Здесь x_1 — численность первой популяции сообщества, x_2 — численность второй популяции, c — количество ТВ, r — скорость притока ТВ, остальными буквами обозначены положительные константы — параметры модели.

Ниже приведены результаты численных экспериментов, проведенных при помощи **Populations Modeler**.

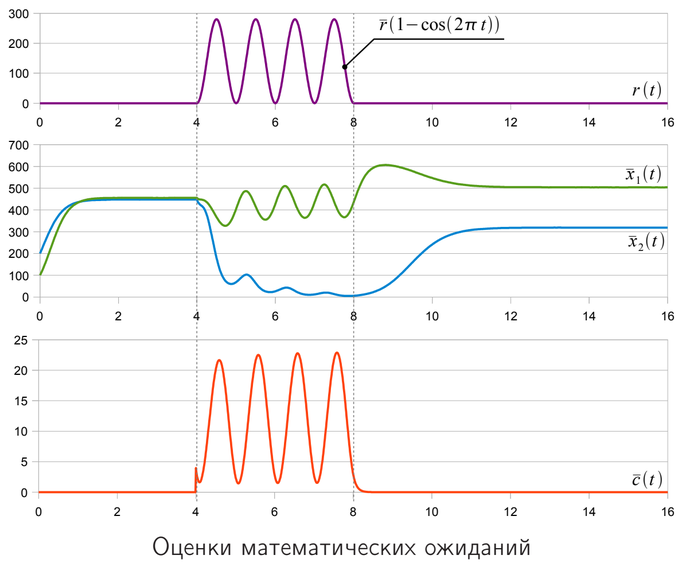
Случай $r(t) \equiv 0$: токсичного вещества нет



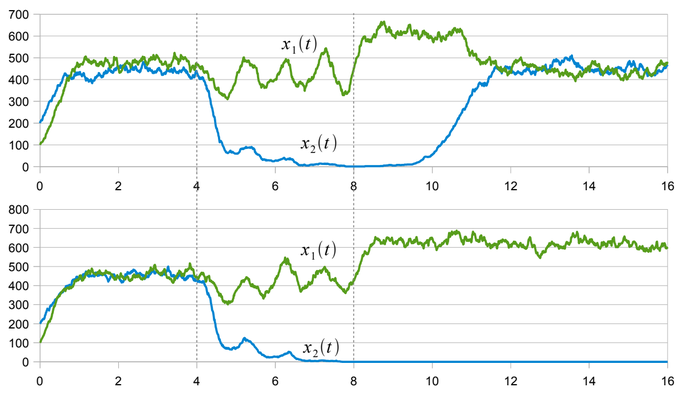
Оценки математических ожиданий

Добавим токсичное вещество

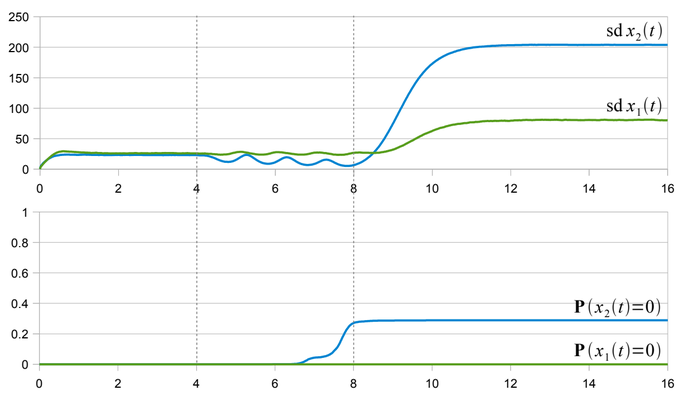
Положим $r(t) = r\,(1 - cos(2\,\pi\,t))\,\mathbb{I}(4 < t < 6)$ и сохраним значения всех остальных параметров из предыдущего случая.



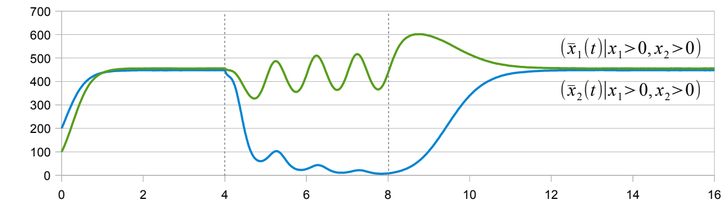
Оценки математических ожиданий



Типичные реализации



Стандартное отклонение и вероятность вырождения



Оценки математических ожиданий при условии невырождения

Литература

[1] Jagers P. Branching processes with biological applications, 1975.
[2] Perelman M.I., Marchuk G.I. et al. *Tuberculosis epidemiology in Russia: the mathematicalmodel and data analysis.* / Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 2004. Vol.19. No.4. P.305-314.
[3] Н. В. Перцев, Б. Ю. Пичугин. Индивидуум-ориентированная стохастическая модель распространения туберкулеза // Сиб. журн. индустр. математики. 2008. Т. 12. № 2(38). С. 97–110.
[4] Н. В. Перцев, Б. Ю. Пичугин, К. К. Логинов. Статистическое моделирование динамики популяций, развивающихся в условиях воздействия токсичных веществ. 2010.

Международная конференция «Современные проблемы математики, информатики и биоинформатики», посвященная 100-летию со дня рождения члена-корреспондента АН СССР Алексея Андреевича Ляпунова
11 - 14 октября 2011 г., Академгородок, Новосибирск, Россия, `http://conf.nsc.ru/Lyap-100`
Борис Юрьевич Пичугин <bpichugin@mail.ru>