

Population Modeler: программа для индивидуум-ориентированного моделирования сообществ взаимодействующих особей*

Б. Ю. Пичугин

ОФИМ им. С. Л. Соболева СО РАН

e-mail: bpichugin@mail.ru

11-14 октября 2011

Аннотация

В данном докладе рассказывается о программе Population Modeler, разработанной для проведения вычислительных экспериментов с вероятностными моделями сообществ особей. Формулируются базовые предположения, в рамках которых строятся модели. Описываются особенности реализации программы. Работа программы продемонстрирована на примере модели распространения туберкулёза органов дыхания и модели травления особей сообщества токсичным веществом.

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

- все сообщество поделено на несколько популяций;
- каждая особь сообщества охарактеризована своим набором параметров; количество и семантика параметров определяются популяцией, к которой принадлежит особь;
- изменение состояния сообщества (рождение и гибель особей, изменение параметров особей) происходит скачкообразно в случайные моменты времени;
- скачки состояния сообщества могут быть вызваны *взаимодействиями* или *переходами*;
- взаимодействия — это "незапланированные" изменения состояния сообщества:

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №09-01-00098-А) и СО РАН (интеграционный проект №26)

- моменты возникновения взаимодействий описываются пуассоновским потоком, интенсивность которого зависит от состояния сообщества;
- вероятность выбора особи в качестве участника взаимодействия и результат взаимодействия могут зависеть от параметров особей;
- переход — это «запланированное» изменение состояния сообщества:
 - 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 могут зависеть от параметров особей.

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.

Особенностями реализации программы Population Modeler:

- вычисления распараллеливаются по реализациям как в рамках одной ЭВМ, так и между несколькими ЭВМ, соединенными в локальную сеть;
- алгоритм поиска ближайшего момента перехода, построен на базе алгоритма сортировки кучей;
- алгоритм выбора особи для взаимодействия, построен на базе почти полного бинарного дерева, для представления которого использован линейный массив со специальной индексацией;
- использован мультипликативный датчик случайных чисел с модулем 2^{128} ;
- эффективное использование памяти позволяет рассчитывать сообщества в несколько миллионов особей;
- использован алгоритм накопления ошибки для представления моментов времени (фактически этот алгоритм дает 128-битную точность представления времени);
- программа реализована в виде библиотеки java-классов (интерфейса пользователя пока нет).
- кроссплатформенность.

Тестирование производилось на известных моделях, допускающих в некоторых случаях аналитическое выражение таких характеристик, как математическое ожидание, его асимптотика, вероятность вырождения и т.п. Например, в качестве тестовых моделей

были использованы ветвящийся процесс Беллмана–Харриса, модель процесса регулируемого размножения нейтронов. Результаты всех проведенных расчетов согласуются с аналитическими выражениями.

При помощи программы Populations Modeler было произведено исследование индивидуум-ориентированной модели распространения туберкулеза органов дыхания [5] и модели динамики популяций, развивающихся в условиях воздействия токсичных веществ [6].

Литература

[1] Б. Ю. Пичугин, Н. В. Перцев. Статистическое моделирование популяций взаимодействующих частиц с произвольным распределением времени жизни // Математические структуры и моделирование. — Омск: ОмГУ, 2001. Вып. 7. С. 67–78.

[2] N. V. Pertsev, B. J. Pichugin. Stochastic modeling of the individual's community with their transformation and interaction // Proceedings of the International Conference on Computational Mathematics. Part I. — Novosibirsk: ICM&MG Publisher, 2002. P. 249–253.

[3] Б. Ю. Пичугин. Стохастическая модель сообщества взаимодействующих особей, охарактеризованных набором параметров // Труды международной конференции по вычислительной математике МКВМ-2004. Ч. I / Под ред. Г. А. Михайлова, В. П. Ильина, Ю. М. Лаевского. Новосибирск: Изд. ИВМиМГ СО РАН, 2004. С. 303–309.

[4] Н. В. Перцев, Б. Ю. Пичугин. Применение метода Монте–Карло для моделирования динамики сообществ взаимодействующих индивидуумов // Вестник Воронежского государственного технического университета. Серия «Вычислительные и информационно-телекоммуникационные системы», Т. 2, № 5, 2006, С. 70–77.

[5] Н. В. Перцев, Б. Ю. Пичугин. Индивидуум-ориентированная стохастическая модель распространения туберкулеза // Сиб. журн. индустр. математики. 2008. Т. 12. № 2(38). С. 97–110.

[6] Н. В. Перцев, Б. Ю. Пичугин, К. К. Логинов. Статистическое моделирование динамики популяций, развивающихся в условиях воздействия токсичных веществ // Сиб. журн. индустр. математики. 2011. Т. 14, № 2. С. 84–94.