

NeoCovasim: агентная эпидемиологическая модель с учетом транспортных потоков и ускорением на GPU

Манолов А.^{1*}, Цуркис В.², Маслова И.¹, Козлов И.¹, Самойлов А.¹, Ильина Е.¹

¹ НИИ Системной биологии и медицины Роспотребнадзора, Москва, Россия

² ФГАОУ ВО «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», Москва, Россия

* a.manolov@sysbiomed.ru

Ключевые слова: агентное моделирование; вычислительная эпидемиология; COVID-19

Мотивация и цель: Недавняя пандемия COVID-19 ярко продемонстрировала недостаточность современных средств мониторинга, контроля и прогнозирования эпидемиологической ситуации в случае появления нового инфекционного агента. Это обуславливает необходимость дальнейшего развития подходов и методов, в том числе методов компьютерного моделирования, которые позволят лучше контролировать распространение эпидемии и при этом принимать сбалансированные и рациональные управленческие решения. Агентное моделирование активно применяется при симуляциях распространения эпидемий, поскольку позволяет учесть пространственную гетерогенность среды, индивидуальные особенности людей, демографические параметры и структуру контактов между людьми. При этом ограничивающим фактором их применения зачастую выступает большая вычислительная сложность данного подхода и трудность подбора параметров модели. Агентная модель Covasim стала популярной платформой для проведения агентного моделирования распространения SARS-CoV-2 [1]. К ее преимуществам можно отнести открытый исходный код, активную разработку, умеренный уровень сложности описания искусственной популяции и процесса передачи инфекционного агента. К ограничениям данной модели можно отнести невозможность моделирования нескольких населенных пунктов, связанных транспортными потоками, сравнительно большое время расчетов для крупных городов (с населением порядка миллиона человек и больше). Целью настоящей работы является разработка высокопроизводительной агентной модели, позволяющей моделировать популяцию, сравнимую по размеру и структуре с популяцией Российской Федерации и позволяющую учитывать региональные особенности и транспортные потоки между отдельными регионами.

Результаты: Нами был модифицирован код модели Covasim, что позволило моделировать множество отдельных населенных пунктов, которые связаны между собой транспортными потоками с заданной интенсивностью перемещения агентов. Вычисления по каждому отдельному населенному пункту проводятся параллельно, что позволяет эффективно использовать вычислительные ресурсы на многопроцессорных вычислительных кластерах. В графический интерфейс программы добавлена возможность независимо настраивать параметры отдельных населенных пунктов. Пользователь может загрузить файл с демографическими и статистическими показателями населенного пункта, на основе которых будет создана синтетическая популяция. Возможна настройка таких параметров, как половозрастная структура, распределение размера домохозяйств, школ и предприятий.

Также пользователь может задать интенсивность пассажиропотока между населенными пунктами. Вычислительные эксперименты выявили нелинейную связь между интенсивностью пассажиропотока и временной динамикой эпидемиологического процесса в населенных пунктах. Показано, что в случае связи транспортным потоком городов разного размера наблюдается сложная зависимость между размерами городов и временной динамикой эпидемического процесса. Эти результаты важны для интерпретации эмпирических данных по временной динамике количества инфицированных в различных населенных пунктах.

Для ускорения вычислений при моделировании крупных населенных пунктов нами реализовано ускорение расчетов за счет использования графического процессора (GPU). Было достигнуто 10–100-кратное ускорение (в зависимости от количества моделируемых агентов).

Нами была проведена оценка чувствительности модели к демографическим параметрам искусственной популяции на основе индексов Соболя. В качестве наблюдаемых значений использовалось суммарное количество инфицированных, количество умерших, пиковое количество инфицированных в день. Мы наблюдали, что наибольший вклад в эти значения вносят размеры домохозяйств, размеры классов в школах и размеры рабочих коллективов.

Выводы: На основе платформы с открытым исходным кодом Covasim нами была разработан программный комплекс NeoCovasim, позволяющий проводить параллельное моделирование нескольких населенных пунктов, связанных между собой транспортной сетью. Вычислительные эксперименты показали нелинейных характер связи между интенсивностью пассажиропотока и динамикой эпидемиологического процесса. Нами была реализована возможность проведения расчетов на GPU, что позволяет значительно ускорить процесс моделирования в случае крупных городов. Оценка чувствительности модели к параметрам показала, что наибольший вклад в поведение модели вносят размер домохозяйств, размер класса и размер рабочих коллективов.

Финансирование: Исследование поддержано субсидией Роспотребнадзора, номер 141-02-2023-208.

NeoCovasim: an agent-based epidemiological model with traffic flow and GPU acceleration

Manolov A.^{1*}, Tsurkis V.², Maslova I.¹, Kozlov I.¹, Samoilov A.¹, Ilina E.¹

¹ Research Institute of System Biology and Medicine, Rospotrebnadzor, Moscow, Russia

² Moscow Institute of Physics and Technology, Moscow, Russia

* a.manolov@sysbiomed.ru

Key words: agent-based modelling; computational epidemiology; COVID-19

Motivation and Purpose: The recent COVID-19 pandemic has clearly demonstrated the insufficiency of modern means of monitoring, controlling, and predicting epidemiological situations when faced with a new infectious agent. This necessitates the further development of approaches and methods, including computational modelling techniques, to better monitor the spread of epidemics and to make balanced and rational management decisions. Agent-based modelling is actively used in simulations of epidemic spread, as it allows for the consideration of spatial heterogeneity of the environment, individual

characteristics of people, demographic parameters, and the structure of contacts between individuals. However, the high computational complexity and the difficulty in selecting model parameters often limit its application.

The Covasim agent-based model has become a popular platform for modelling the spread of SARS-CoV-2 [1]. Its advantages include open-source code, active development, and a moderate level of complexity in describing the artificial population and the process of infectious agent transmission. However, limitations include the inability to model multiple settlements connected by traffic flows and relatively long calculation times for large cities (with populations of about or more than a million people).

The aim of this work is to develop a high-performance agent-based model that allows for the simulation of a population comparable in size and structure to the population of the Russian Federation, taking into account regional peculiarities and transport flows between individual regions.

Results: We modified the Covasim model to simulate a set of individual localities connected by traffic flows with a given intensity of agent movement. Computations for each settlement are performed in parallel, allowing efficient use of computing resources on multiprocessor clusters. The graphical interface of the program has been enhanced to allow independent configuration of parameters for individual settlements. Users can upload files with demographic and statistical indicators of a settlement, upon which a synthetic population is created. Parameters such as sex and age structure, household size distribution, schools, and enterprises can be configured. The intensity of passenger traffic between settlements can also be set.

Computational experiments revealed a non-linear relationship between the intensity of passenger traffic and the temporal dynamics of the epidemiological process in settlements. A complex dependence between city sizes and the epidemiological process dynamics was observed when cities of different sizes were linked by traffic flows. These results are crucial for interpreting empirical data on infection dynamics across different settlements.

To speed up calculations for large settlements, we implemented GPU acceleration, achieving a 10–100 times speed increase depending on the number of agents modelled. We evaluated the sensitivity of the model to demographic parameters of the artificial population using Sobol indices. The total number of infections, the number of deaths, and the peak number of infections per day were the observed values. Household size, class size in schools, and workforce size were found to contribute most significantly to these values.

Conclusions: Based on the open-source Covasim platform, we developed NeoCovasim, a software package that allows parallel simulations of multiple localities connected by a transport network. Computational experiments showed a non-linear relationship between passenger traffic intensity and epidemiological dynamics. GPU acceleration significantly speed up the modelling process for large cities. Sensitivity analysis revealed that household size, class size, and workforce size are important parameters influencing model behavior.

Funding: The study is supported by the subsidy of the Russian Federal Service for Surveillance on Consumer Rights Protection and Human Wellbeing No. 141-02-2023-208.

Список литературы/References

1. Kerr C.C., Stuart R.M., Mistry D., Abeyesuriya R.G., Rosenfeld K., Hart G.R., Núñez R.C., Cohen J.A., Selvaraj P., Hagedorn B., George L. Covasim: an agent-based model of COVID-19 dynamics and interventions. *PLoS Comput Biol.* 2021;17(7):e1009149