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

Тан Жуй, Научный руководитель - С. Н. Леонидовна

Университет МГУ-ППИ в Шэньчжэне
Факультет вычислительной математики и кибернетики

Конференция "Ломоносов - 2023"
Москва, Апрель 2023

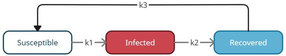
Введение

Эпидемии, такие как COVID-19, оказывают серьезное влияние на здоровье населения и экономику. По данным Всемирной организации здравоохранения (ВОЗ), на 2022 год количество заболевших COVID-19 превышает 400 миллионов человек по всему миру, а число смертей от заболевания превышает 5 миллионов. Пандемия также привела к ограничению движения и закрытию многих предприятий, что вызвало экономические проблемы.

Математическое моделирование играет важную роль в понимании и контроле инфекционных заболеваний, таких как COVID-19. Оно помогает ученым разрабатывать эффективные стратегии контроля и прогнозировать будущие тенденции.

Детерминированные модели

Агент-ориентированное моделирование являются одним из наиболее распространенных методов моделирования в эпидемиологии. Их развитие началось в середине 20-го века и продолжается по сей день. Большая часть научных статей по моделирование эпидемии основан на модели SIR ("Susceptible-Infected-Recovered") и различные её модификации. Модель SIRS является расширением модели SIR.



- **Уравнение детерминистическая модель SIRS**

$$\begin{cases} \dfrac{d\theta_I}{dt} = k_1\theta_I\theta_S - k_2\theta_I \\ \dfrac{d\theta_R}{dt} = k_2\theta_I - k_3\theta_R \\ \theta_S + \theta_I + \theta_R = 1 \end{cases}$$

θ_S - концентрация восприимчивых людей (которые могут заразиться)
θ_I - x - концентрация инфицированных
θ_R - концентрация выздоровевших и имеющих иммунитет.
Рассматривается задача Коши с начальными условиями $\theta_I(0)$, $\theta_R(0)$.
k_1 – скорость заражения, k_2 – скорость выздоровления, k_3 – скорость потери иммунитета $[..^{-1}]$. Смертность не учитывается.

- **Преимущество** детерминистической модели SIRS - ее точности и простота использования.
- **Недостаток** - в упрощенном подходе к описанию распространения инфекции.

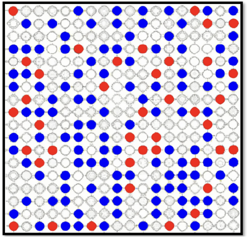
Решёточная агентно-ориентированная модель SIRS

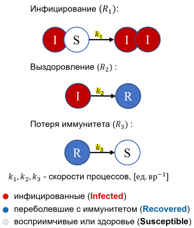
Наша задача

Исследование более сложных и контекстуализированных **стохастических моделей** пространственной эпидемиологии, основанные на динамике пространственной эпидемиологии. Рассмотрим местоположение инфицированных и восприимчивых популяций, а также взаимодействия между ними, а также подвижность (миграция) населения в модели.

- **Решёточная агентно-ориентированная модель распространения эпидемий SIRS**

Решёточная агентно-ориентированная модель 18 $\times 18$





Индивидуумы в модели могут находиться на узлах регулярной решетки или на связях в сети на графе.
Три возможных состояния узлов (индивидуумов) в решеточной агентно-ориентированной модели SIRS включают инфицированных (**Infected**), переболевших с иммунитетом (**Recovered**) и восприимчивых (**Suspectable**). Каждое состояние соответствует различным стадиям инфекционного процесса.
Инфицированные узлы могут передавать инфекцию восприимчивым узлам, а переболевшие с иммунитетом узлы могут иметь защиту от повторной инфекции.

Расширение кинетическая схема модели

При стохастическом моделировании рассматривается расширенная кинетическая схема модели SIRS, которая включает также и процессы миграции, то есть перемещения индивидуумов по узлам решетки:

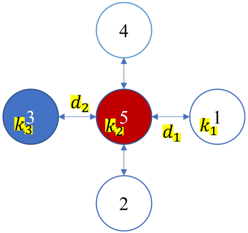
(1) $\mathrm{I_i + S_j \xrightarrow{k_1} I_i + I_j}$ (инфицирование)

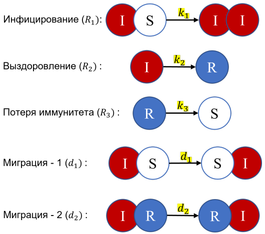
(2) $\mathrm{I_i \xrightarrow{k_2} R_i}$ (выздоровление)

(3) $\mathrm{R_i \xrightarrow{k_3} S_i}$ (SIRS) (потеря иммунитета)

(4) $\mathrm{I_i + S_j \xrightarrow{d_1} S_i + I_j}$ (миграция №1)

(5) $\mathrm{R_i + S_j \xrightarrow{d_2} S_i + R_j}$ (миграция №2)





Рассмотрим микромодель с пятью возможными элементарными событиями, происходящими с интенсивностями $\mathrm{k1, k2, k3, d = d_1 = d_2}$. В модели учитывается ограниченное число контактов между людьми, используя пространственную решётку и процесс миграции индивидуумов.
Параметр d определяет скорость перемешивания в популяции и учитывает различные ограничительные факторы. Случай $\mathrm{d = 0}$ соответствует строгим карантинным мерам, а $\mathrm{d \to \infty}$ приближается к макромодели SIRS с полным перемешиванием, которое на практике невозможно.

Марковский стохастический процесс

- **Марковский стохастический процесс**

В решеточной агентно-ориентированной модели SIRS, эволюция системы описывается марковским случайным процессом с дискретным множеством состояний и непрерывным временем. Потоки событий являются независимыми пуассоновскими потоками с заданными интенсивностями. При предположении случайного перемешивания, можем описать изменение вероятностей наблюдения всех возможных дискретных состояний решетки во времени с помощью основного кинетического уравнения (ОКУ, "master equation"):

$$\frac{dP_i(t)}{dt} = \sum_{j \neq i} (P_j(t)\lambda_{ji}(t) - P_i(t)\lambda_{ij}(t)), \quad i = 1, 2, \ldots, N_{eq} = 3^N$$

в уравнении, P_i - вероятность состояния решетки с номером i , λ_{ij} и λ_{ji} - скорость перехода из состояния i в состояние j [$..^{-1}$] и наоборот.
Для решёточной микромодели SIR/SIRS ОКУ содержит 3^N линейных ОДУ первого порядка. Решать такую систему **невозможно** даже при использовании маленьких решёток, например, для решётки размеров 10×10 система уже содержит приблизительно 5.2×10^{47} уравнений.

- Одно из решений заключается в том, что мы можем рассчитать отдельные траектории эволюции система, использув **кинетический метод Монте-Карло** ("Kinetic Monte Carlo", KMC).

Кинетический метод Монте-Карло (KMC)

Прямой метод KMC (алгоритм “без отказов”, алгоритм Гиллеспи для решёточной модели)

Кинетический метод Монте-Карло ("без отказов") - это вычислительный подход для моделирования стохастических систем, основанный на случайном выборе событий и изменении состояний системы. "Без отказов" означает учет всех возможных событий сразу, без повторного выбора.

Этап №1. *Задание начального состояния решётки.*
Этап №2. *Вычисление скоростей элементарных событий.* На момент t_1 вычисляются скорости всех элементарных событий, обновляющих решётку, и определяется суммарная скорость R.
Этап №3. *Выбор события и изменение состояния решётки.* Случайно выбирается элементарное событие с вероятностью, пропорциональной его скорости, и изменяется состояние решётки соответственно, и $\sum_{j=1}^{p-1} v_j < \xi_2 V \leq \sum_{j=1}^{p} v_j$.
Этап №4. *Вычисление шага по времени.* Вычисляется момент времени выхода системы из текущего состояния: $t_2 = t_1 - (\ln(\xi)/R)$, где ξ - случайная величина, равномерно распределённая на интервале $(0, 1)$.
Этап №5. *Проверка критерия окончания моделирования.* Осуществляется переход на следующий шаг к этапу II, если не достигнуто заданное максимальное значение времени.

Сравнение результатов вычислений детерминированных и стохастических моделей при одинаковых параметрах

Last bit of text

Сравнение результатов моделирования стохастической модели при различных скоростях диффузии

Last bit of text

Моделирование и анализ пространственных эпидемий на больших решетках

Last bit of text

Заключение и планы для дальнейших исследований

Last bit of text

Спасибо за внимание!

References I

Список литературы

1. *Мюррей Дж.*, Математическая биология. Том 1: Введение. – М.: Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика: Ин-т компьютерных исслед., 2009, с. 1104. Том 2: Пространственные модели и их приложения в биомедицине. – М.: Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика: Ин-т компьютерных исслед., 2011, с. 1104.
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.