



**МГУ имени М.В.Ломоносова  
факультет ВМК**



**Моделирование распространения эпидемии COVID-19  
с помощью решёточных моделей  
и кинетического метода Монте-Карло**

**Макеев Алексей Геннадьевич**

<https://istina.msu.ru/profile/amak/>

к.ф.м.н, лаборатория математического  
моделирования в физике

**Семендяева Наталья Леонидовна**

<https://istina.msu.ru/profile/Semendyaeva/>

к.ф.м.н, лаборатория математического  
моделирования в физике

Текущая пандемия коронавируса COVID-19 затронула практически весь мир, она стала причиной миллионов смертей и вызвала негативные социально-экономические последствия.



Источник: университет Джонса Хопкинса; 21.05.2021

Начиная с февраля 2020 г., было опубликовано огромное количество научных статей, в которых проводится математическое моделирование процесса распространения эпидемии COVID-19. Модели могут помочь спрогнозировать масштабы эпидемии, принять решение о проведении карантинных мероприятий, предсказать эффект вакцинирования населения. Большая часть научных статей по моделированию эпидемии COVID-19 использует так называемую модель SIR (“Susceptible-Infected-Recovered”, “Восприимчивый-Инфицированный-Выздоровевший”) и различные её модификации. Модель SIRS является расширением модели SIR.

### Уравнения макромоделей SIRS

$$(*) \begin{cases} \frac{d\theta_I}{dt} = k_1\theta_I\theta_S - k_2\theta_I \\ \frac{d\theta_R}{dt} = k_2\theta_I - k_3\theta_R \\ \theta_S + \theta_I + \theta_R = 1 \end{cases}$$

$\theta_S$  – концентрация восприимчивых людей (которые могут заразиться)  
 $\theta_I$  – концентрация инфицированных  
 $\theta_R$  – концентрация выздоровевших и имеющих иммунитет  
Рассматривается задача Коши с начальными условиями  $\theta_I(0)$ ,  $\theta_R(0)$ .  
Параметры:  $k_1$  – скорость заражения;  $k_2$  – скорость выздоровления;  $k_3$  – скорость потери иммунитета [ед. вр.<sup>-1</sup>]. Смертность не учитывается.

Если  $k_3 > 0$ , то выздоровевшие могут стать восприимчивыми, т.е. иммунитет существует лишь ограниченное время. При  $k_3 = 0$  модель SIRS переходит в модель SIR.

**Основное преимущество** этой модели – простота использования.

**Существенный недостаток** – модель пренебрегает корреляциями в расположении инфицированных и восприимчивых индивидуумов, не учитывает их возможные и невозможные контакты; здесь считается, что каждый инфицированный индивидуум может заразить любого восприимчивого.

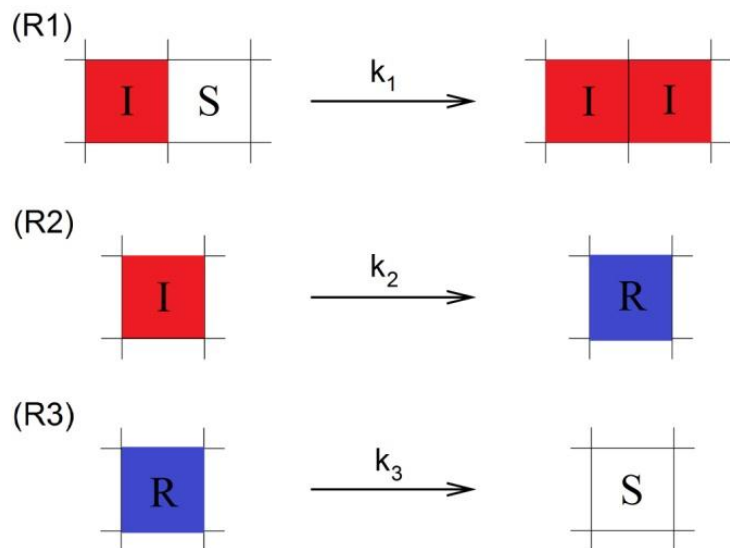
**Цель работы** – изучение более сложных пространственных “микроскопических” моделей, которые учитывают корреляции в расположении инфицированных и восприимчивых индивидуумов и явно учитывают подвижность (миграцию) отдельных индивидуумов.

## Решёточная агентно-ориентированная модель распространения эпидемий SIRS

Предполагается, что индивидуумы занимают узлы регулярной квадратной решётки. В более общем случае, возможные контакты индивидуумов определяются рёбрами графа (связями в сети) на котором определена модель. Такие модели называют сетевыми.

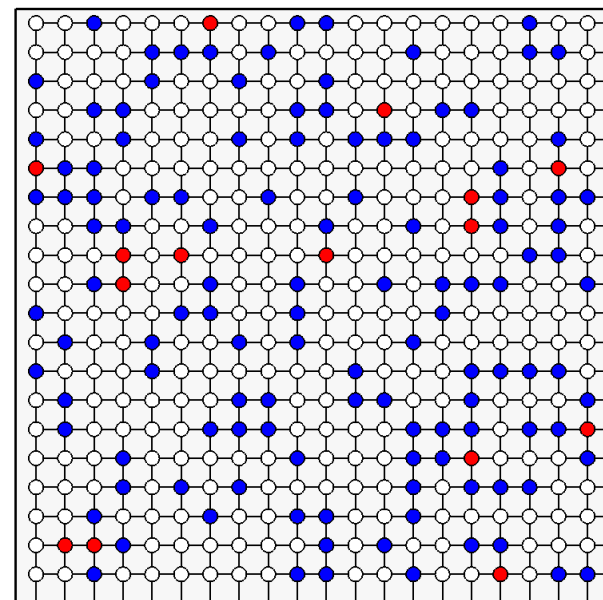
Три возможные состояния узлов (индивидуумов): инфицированные (“**I**nfected”); переболевшие, с иммунитетом (“**R**ecovered”); восприимчивые, здоровые (“**S**usceptible”).

### Основные элементарные стадии:



$k_1, k_2, k_3$  - скорости процессов, [ед.вр.<sup>-1</sup>]

Решётка 20×20:

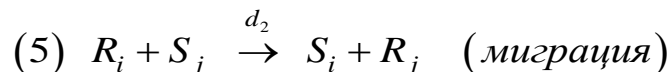
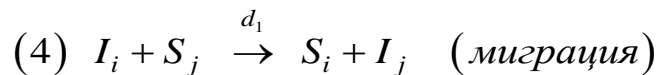
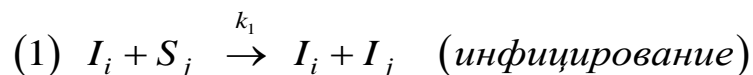


- инфицированные (“**I**nfected”)
- переболевшие, с иммунитетом (“**R**ecovered”)
- восприимчивые, здоровые (“**S**usceptible”)

Есть много различных факторов, влияющих на возможность контактов между инфицированными и восприимчивыми людьми. В первую очередь, на них влияют проводимые государством карантинные мероприятия. Подробно учесть все факторы при моделировании невозможно.

### Расширенная кинетическая схема микромоделей SIRS

Рассматривается регулярная квадратная решётка, содержащая  $N$  узлов. Три возможных состояния узлов : инфицированные (**I**), переболевшие, с иммунитетом (**R**), восприимчивые, здоровые (**S**).



Рассматриваются пять возможных элементарных событий, которые могут происходить с интенсивностями  $k_1, k_2, k_3, d = d_1 = d_2$ . Стадии (4)-(5) описывают процесс миграции по обменному механизму на ближайшие соседние узлы.

В рассматриваемой микромоделей учитывается ограниченное число контактов между людьми, для этого вводятся пространственная решётка и процесс миграции (перемешивания) отдельных индивидуумов. Это даёт возможность выделить один параметр ( $d$ ), который определяет скорость перемешивания в популяции и, тем самым, неявно учитывает всевозможные ограничительные факторы. Случай  $d=0$  соответствует строгим карантинным мероприятиям. Случай  $d \rightarrow \infty$  соответствует макромоделей SIRS и полному перемешиванию, которое реально никогда не выполняется.

Используем пространственную стохастическую агентно-ориентированную модель, в которой эволюция системы описывается марковским случайным процессом с дискретным множеством состояний и непрерывным временем, а потоки событий являются независимыми пуассоновскими потоками с заданными интенсивностями.

Изменение во времени вероятностей наблюдения всех возможных дискретных состояний решётки описывается основным кинетическим уравнением (ОКУ, “master equation”) :

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

$P_i$  – вероятность состояния решетки с номером  $i$

$\lambda_{ij}$  – скорость перехода из состояния  $i$  в состояние  $j$  [ед. вр.<sup>-1</sup>]

Предположение о случайном перемешивании, которое реализуется при  $d \rightarrow \infty$ , позволяет получить из ОКУ макромодель SIRS (при  $N \rightarrow \infty$ ) или уравнения Фоккера-Планка при достаточно больших, но конечных размерах системы  $N$ .

Для решёточной микромоделю SIRS ОКУ содержит  $3^N$  линейных ОДУ первого порядка. Решать такую систему невозможно даже при использовании маленьких решёток. Например, для решетки размера  $10 \times 10$ ,  $N_{eq} \approx 5.2 \times 10^{47}$ . Однако можно рассчитать отдельные траектории эволюции системы, используя **кинетический метод Монте-Карло** (“Kinetic Monte Carlo”, КМС). Существует несколько статистически эквивалентных вариантов реализации метода КМС. Один из таких вариантов называется прямым методом (“direct method”) и относится к варианту алгоритмов “без отказов” (“rejection-free”).



### Прямой метод КМС

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

**Этап 1.** Инициализация.

**Этап 2.** Вычисление скоростей элементарных событий. На текущий момент времени  $t$  вычисляются скорости  $v_i$  всевозможных событий на решётке. Вычисляется суммарная скорость  $V$ .

**Этап 3.** Определение момента выхода системы из текущего состояния. Генерируется значение случайной величины  $\xi_1$ , равномерно распределённой на промежутке  $(0,1)$ . Вычисляется время пребывания системы в текущем состоянии:  $\Delta t = -\ln(\xi_1) / V$ .

**Этап 4.** Выбор и реализация события. Случайно выбирается одно из всевозможных элементарных событий с вероятностью, пропорциональной его скорости. Для этого генерируется случайное вещественное число  $\xi_2 \in (0,1)$  и определяется номер  $p$  такой, что

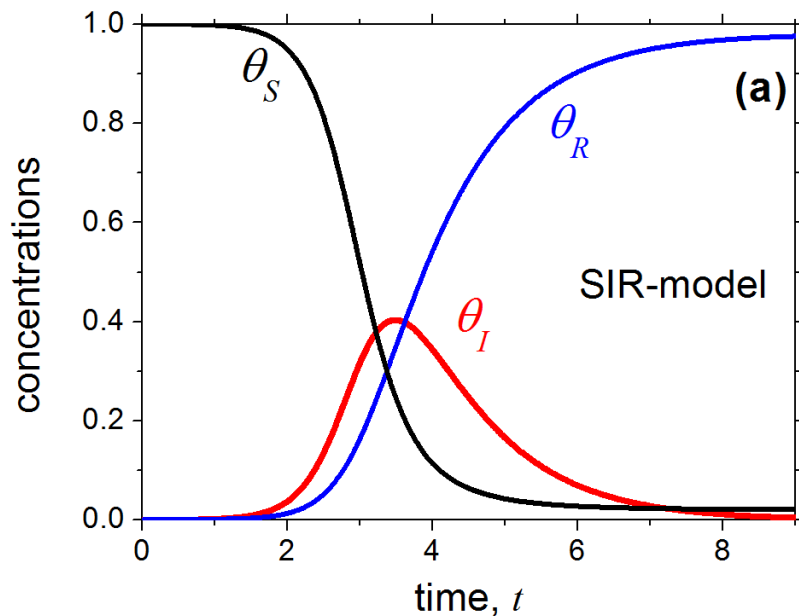
$$\sum_{j=1}^{p-1} v_j < \xi_2 V \leq \sum_{j=1}^p v_j.$$

Выбранное  $p$ -ое событие реализуется, состояние решётки изменяется.

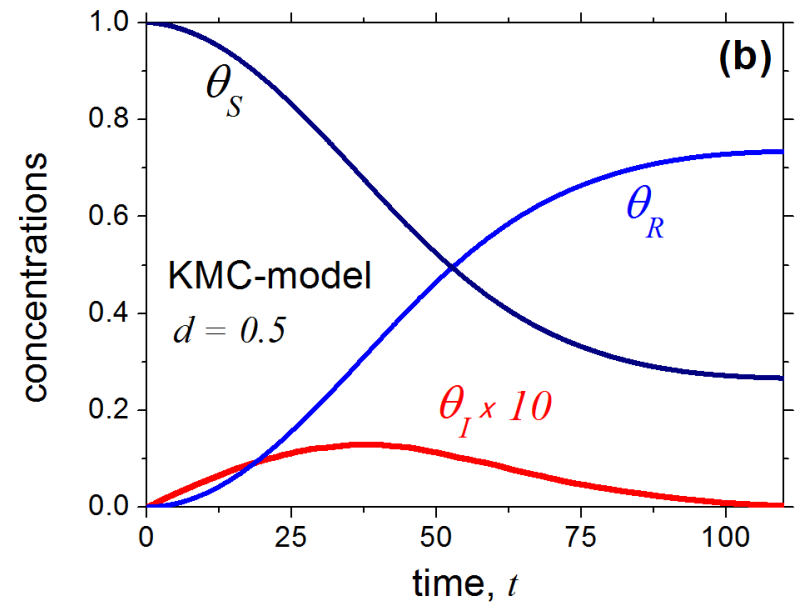
**Этап 5.** Проверка критерия окончания моделирования. Если критерий не выполнен, то осуществляется переход к этапу 2 при новом значении времени  $t = t + \Delta t$ .



Сравним результаты расчётов по стандартной макромодели **SIR** с результатами КМС-моделирования на решётке размеров 5000×5000 при одинаковых значениях параметров.



модель SIR



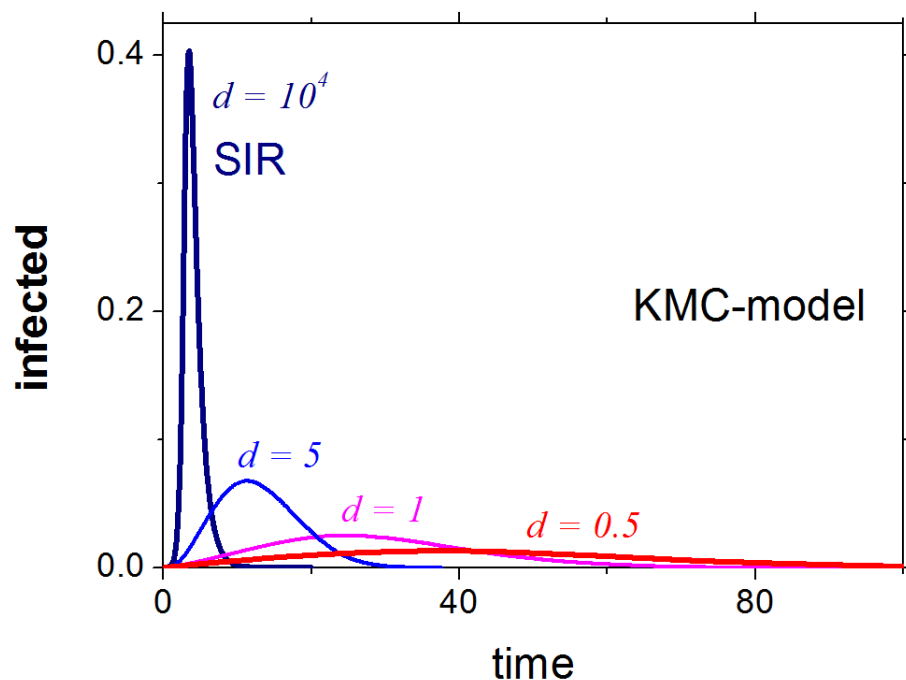
КМС-моделирование на решётке 5000×5000

Начальные концентрации:  $\theta_I(0) = 10^{-4}$ ,  $\theta_R(0) = 0$ .

Параметры:  $k_1 = 1$ ,  $k_2 = 1$ ,  $k_3 = 0$ ,  $d = 0.5$ .



КМС-моделирование на решётке 5000×5000; влияние скорости миграции на результаты



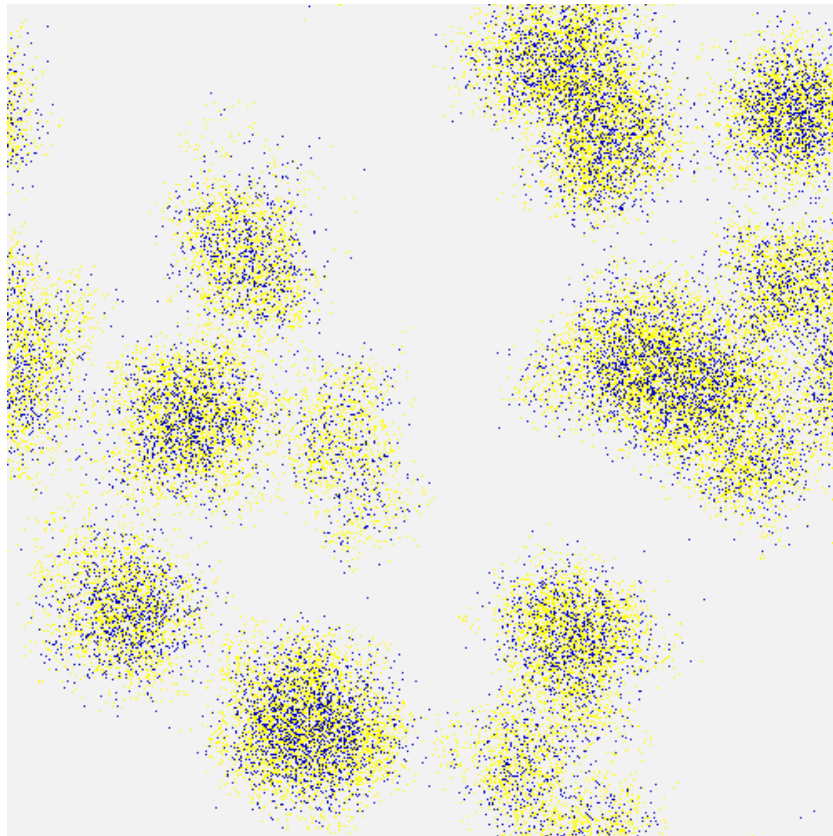
Начальные концентрации:  $\theta_I(0) = 10^{-4}$ ,  $\theta_R(0) = 0$ .

Параметры:  $k_1 = 1$ ,  $k_2 = 1$ ,  $k_3 = 0$

Рисунок демонстрирует существенные отличия между результатами моделирования при быстрой и медленной скорости миграции. По сравнению с микромоделью при  $d = 0.5$ , макромоделю SIR приблизительно в 10 раз уменьшает общее время эпидемии, но значительно увеличивает максимальное число одновременно болеющих индивидуумов, их становится почти в 30 раз больше.

**Вывод:** широко используемая модель SIR является слишком грубой. Более реалистичная микромоделю, учитывающая ограниченное число контактов между людьми, предсказывает результаты, которые сильно отличаются от предсказаний стандартной макромоделю SIR.

Медленная миграция  $d$  – следствие карантинных мероприятий.

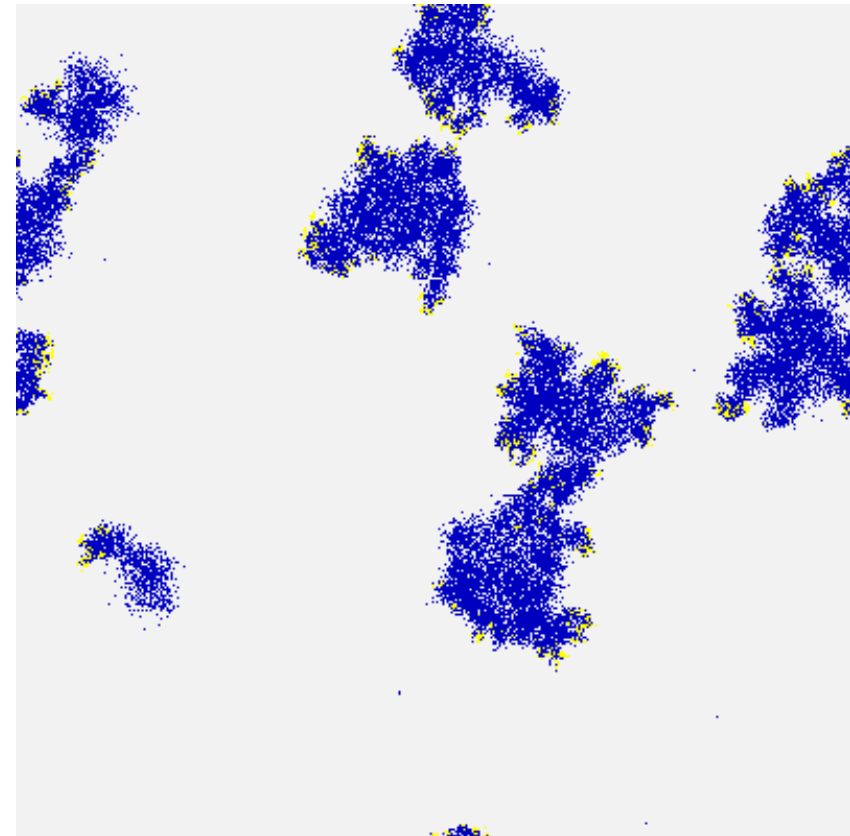


$d = 100$

SIR; КМС-моделирование на решётке  $400 \times 400$ .

Начальные концентрации:  $\theta_I(0) = 10^{-4}$ ,  $\theta_R(0) = 0$

Параметры:  $k_1 = 1$ ,  $k_2 = 1$ ,  $k_3 = 0$



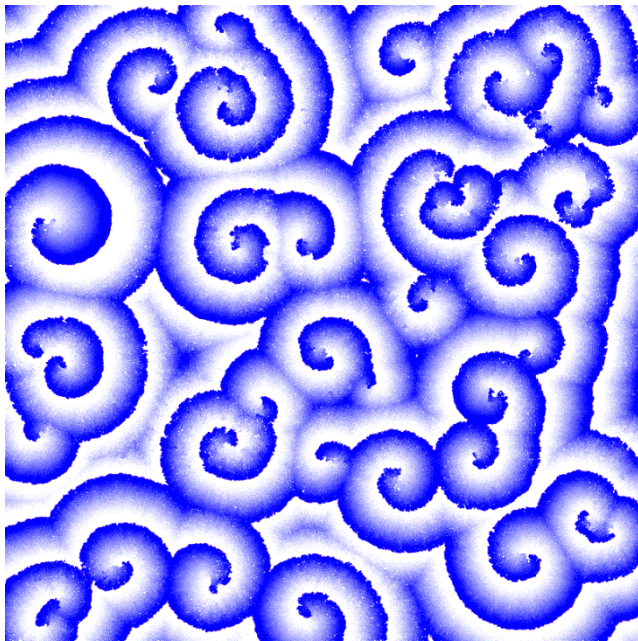
$d = 0.5$

- инфицированные ("Infected")
- переболевшие, с иммунитетом ("Recovered")
- восприимчивые, здоровые ("Susceptible")

Фильмы демонстрируют существенные отличия между результатами моделирования при быстрой и медленной скорости миграции. Отличается характерное время процессов (в 10 раз), число инфицированных индивидуумов и их пространственное распределение.

SIRS; KMC-моделирование на решётке 20000×20000 (400 млн. человек)

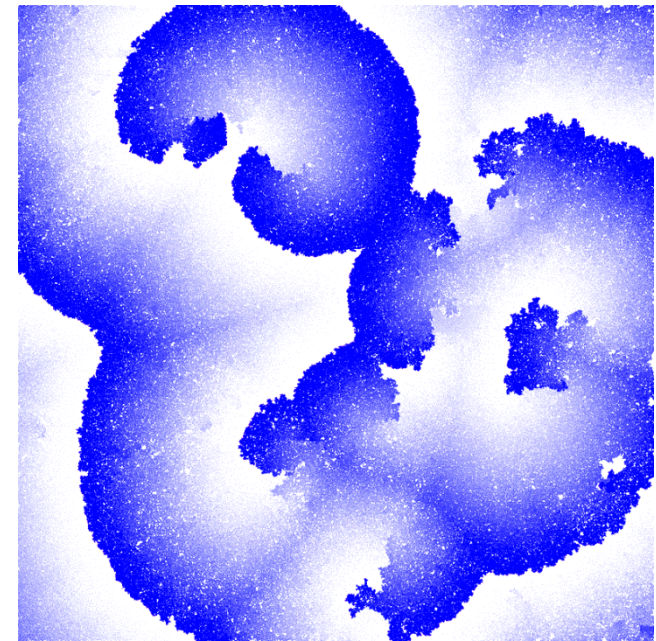
Условие  $k_3 > 0$  означает, что переболевшие люди со временем теряют иммунитет. В этом случае решёточная модель SIRS представляет собой так называемую возбудимую среду. Фильмы показывают состояние системы, называемое “спиральным хаосом” (“spiral chaos”). Наблюдаются фрагменты спиральных волн, которые вращаются, сталкиваются, частично аннигилируют, создают новые фрагменты. Синий цвет показывает тех людей, которые переболели и имеют иммунитет ( $\approx 50\%$  населения). Восприимчивым к болезни людям соответствует белый цвет (их тоже  $\approx 50\%$ ). Инфицированные индивидуумы не видны, поскольку их концентрация составляет всего около 0.05%. Они находятся на гребнях эпидемиологических волн, которые распространяются только на такие участки, где много восприимчивых к болезни людей (волны “инфицируют” светлые области).



$$k_3 = 0.005; \theta_I(t) \approx 0.0027, \theta_R(t) \approx 0.53$$

Параметры:

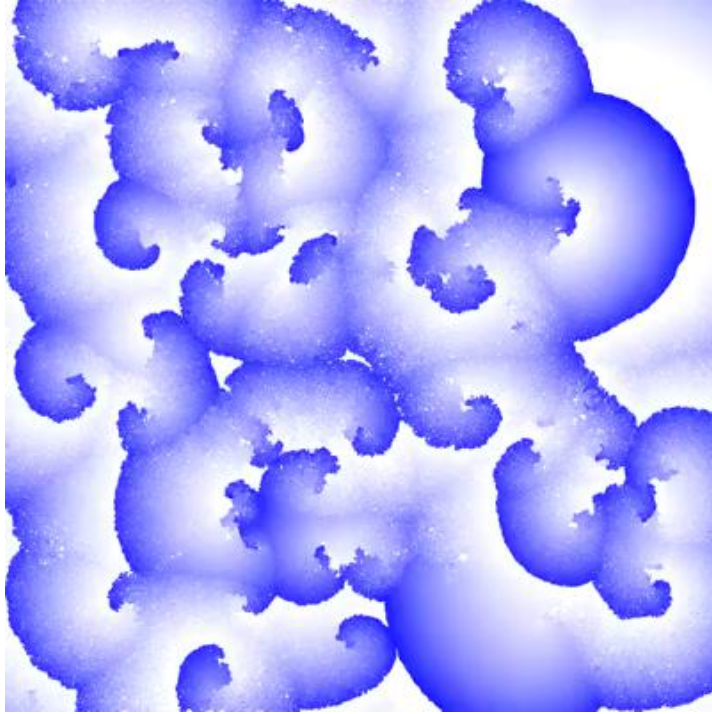
$$k_1 = 5, k_2 = 1, d = 0$$



$$k_3 = 0.001; \theta_I(t) \approx 0.0005, \theta_R(t) \approx 0.525$$



SIRS; KMC-моделирование на решётке 40000×40000 (1.6 млрд. человек)



Параметры:  $k_1 = 5$ ,  $k_2 = 1$ ,  $k_3 = 0.001$ ,  $d = 0$

$\theta_I(t) \approx 0.0005$ ,  $\theta_R(t) \approx 0.525$

Макромодель SIRS предполагает пространственно-однородное состояние системы. Микромодель показывает циркуляцию вируса в виде спиральных волн, характерный период вращения которых составляет 1-2 года. Состояние спирального хаоса можно наблюдать сколь угодно долго. Такое состояние наблюдается из-за того, что через длительное время пропадает иммунитет у переболевших вирусной инфекцией людей. Поэтому вирус сохраняется в популяции, несмотря на небольшое число одновременно болеющих индивидуумов (в данном случае, одновременно больны около 800 тыс. человек из 1.6 млрд. населения). Избежать такого пространственно-временного хаоса может помочь только **вакцинация** населения. Если не проводить вакцинацию населения, то создаются условия для вечной пандемии.

Моделирование может использоваться для оценки необходимого числа вакцинаций, которое способно остановить циркуляцию вируса. Для рассматриваемых условий, которые соответствуют достаточно жёстким ограничительным мерам, необходимо вакцинировать всего  $\approx 20\%$  населения чтобы полностью остановить распространение вируса.

Рассмотренная нами эпидемиологическая модель в качестве сети использует регулярную двумерную решётку и предполагает однородность параметров для всех индивидуумов, что значительно упрощает расчёты. Дальнейшая работа может быть направлена на построение более сложных сетевых моделей, учитывающих неоднородность различных групп населения и переменную/адаптивную структуру сети. Построение реалистичных сетевых агентно-ориентированных моделей является новой, интересной и практически значимой задачей.

