

Алгоритми за симулации на случайни процеси -
упражнения
Stochastic simulation algorithms (SSA)

доц. П. Рашков (ИМИ-БАН)

Химичен разпад

Синтез и разпад

Епидемиологичен модел

Химичен разпад

Разглеждаме следната химична реакция, която описва процес на химичен разпад



където A е дадено химическо вещество, а k е скоростта на реакцията.

Символът $\emptyset$ обозначава продукти, които не представляват по-нататъшен интерес за нас.

Ще моделираме протичането на реакцията във времето с помощта на алгоритъма на Гилеспи.

Предварителна подготовка

- ▶ Проверете с коя функция се извиква генераторът на случайни числа от равномерно разпределение в $(0, 1)$.
- ▶ Проверете с коя функция се пресмята естествения логаритъм $\ln$.
- ▶ Понеже алгоритъмът е адаптивен по времето, нарастванията във времето ще бъдат неравномерни за всяка от симулациите. Необходимо е получените от симулацията резултати да се интерполират във времето.

Интерполация

Избираме фина мрежа от точки, която ще използваме за интерполацията на резултатите:

$$\{0, \Delta t, 2\Delta t, \dots, n\Delta t\}, \quad n\Delta t = T_{\max}$$

Записваме интерполираните стойности във вектор (или масив, ако променливите са повече от една) A^{out} .

Ако t_i, t_{i+1} са два последователни момента във времето, в които се изменя състоянието на системата, полагаме

$$A^{out}(j\Delta t) \equiv A(t_i)$$

за всички j , такива че $t_i \leq j\Delta t \leq t_{i+1}$

GSSA-I за химичната реакция на разпад

Задаваме началните условия $t = 0$ и $A(0) = n_0$. Изпълняваме стъпки по t :

1. Теглим число ϱ от равномерно разпределение в $(0, 1)$.
2. Изчисляваме функцията на склонност, $\alpha_0(t) = A(t)k$.
Пресмятаме времето, когато ще протече следващата реакция (1) като $t + \tau$ по формулата за τ :

$$\tau = \frac{1}{\alpha_0(t)} \ln \frac{1}{\varrho}$$

3. Пресмятаме броя молекули в момента $t + \tau$, полагайки $A(t + \tau) = A(t) - 1$.
4. Продължаваме със стъпка (1) за време $t + \tau$ докато $A(t) > 0$.

Задача

Параметрите на модела са $k = 0.1 \text{ s}^{-1}$ и $A(0) = 20$.

- ▶ Направете десет реализации на GSSA-I.
- ▶ Интерполирайте резултатите от симулациите и изобразете промяната в броя молекули $A(t)$ като крива с различен цвят. Изобразете кривите на всички реализации на една фигура.
- ▶ Пресметнете средната стойност на броя молекули $\bar{A}(t)$ от всички реализации и я изобразете на същата фигура.

Забележка. Тъй като функцията $A(t)$ приема само целочислени стойности $\{0, 1, 2, \dots, 20\}$, не е изненадващо, че някои от изчислените криви $A(t)$ частично се припокриват. От друга страна пък е възможно всичките десет реализации да върнат различни стойности за $A(t)$.

Синтез и разпад

Разглеждаме система от две химични реакции



GSSA-II за синтез и разпад

Задаваме началните условия $A(0) = n_0$ и $t = 0$. Изпълняваме стъпки по t :

1. Теглим две случайни числа ϱ_1, ϱ_2 от равномерно разпределение в $(0, 1)$.
2. Пресмятаме функцията на склонност $\alpha_0(t) = A(t)k_1 + k_2$.
3. Пресмятаме момента $t + \tau$, когато ще протече следващата химична реакция

$$\tau = \frac{1}{\alpha_0(t)} \ln \frac{1}{\varrho_1} \quad (3)$$

4. Пресмятаме броя молекули в момент $t + \tau$ така:

$$A(t + \tau) = \begin{cases} A(t) + 1 & \text{ако } \varrho_2 < k_2/\alpha_0 \\ A(t) - 1 & \text{ако } \varrho_2 \geq k_2/\alpha_0. \end{cases} \quad (4)$$

След това продължаваме със стъпка (1) за времето $t + \tau$.

Задача

Параметрите на модела са $A(0) = 0$, $k_1 = 0.1 \text{ s}^{-1}$ и $k_2 = 1 \text{ s}^{-1}$.

- ▶ Направете десет реализации на GSSA-II.
- ▶ Интерполирайте резултатите от симулациите и изобразете промяната в броя молекули $A(t)$ като крива с различен цвят. Изобразете кривите на всички реализации на една фигура.
- ▶ Пресметнете средната стойност на броя молекули $\bar{A}(t)$ от всички реализации и я изобразете на същата фигура.
- ▶ Какво се случва с броя молекули (t) за период от 100 s?

моделът на Кормак и Макендрик

Как да опишем математически динамиката на заразно заболяване (грип, дребна шарка, заушка, туберкулоза, малария, чума) при хората или при животните?

Популацията е разделена на три класа:

- ▶ податливи S (Susceptible),
- ▶ заразени I (Infected),
- ▶ излекувани или премахнати R (Recovered/Removed),

откъдето идва означението на модела като *SIR модел*.

Параметри на модела

- ▶ m – естествена смъртност на индивида,
- ▶ β – коефициент на заболяемост,
- ▶ ν – коефициент на смъртност поради заболяването,
- ▶ a – скорост на излекуване

От уравнения на детерминистичния модел може лесно да бъде изведен *случайният SIR модел*.

При него непрекъснатите променливи се заменят с дискретни променливи и коефициентите на преходите между класовете се заменят от вероятностите на случаен процес.

Епидемиологичният модел може да бъде записан във формата на реакционна схема, подобна на онези, които вече разглеждахме.

Реакционна схема на модела

Събитие	Реакция
раждане на индивид	$\emptyset \rightarrow S$
смърт на податлив индивид	$S \rightarrow \emptyset$
смърт на заразен индивид	$I \rightarrow \emptyset$
смърт на излекуван индивид	$R \rightarrow \emptyset$
заразяване/заболяване	$S \rightarrow I$
излекуване	$I \rightarrow R$

Събития в случайния SIR модел: функции на склонност

Тъй като в модела настъпват много събития е добре да векторизираме алгоритъма.

Да обозначим функцията на склонност за i -тото събитие с $p_i(t)$.

Съвкупността от всички функции на склонност, $p(t)$ ще бъде вектор, чиято i -та компонента описва вероятността $p_i(t)\delta t$ i -то събитие да протече в безкрайно краткия интервал от време $[t, t + \delta t)$.

Сборът от компонентите на $p(t)$ е стойността α_0 , която се използва в алгоритъма на Гилеспи.

Събития в случайния SIR модел: функции на склонност

Събитие		Функция на склонност
раждане на индивид	$\emptyset \rightarrow S$	$p_1 = m(S + I + R)$
смърт на податлив индивид	$S \rightarrow \emptyset$	$p_2 = mS$
смърт на заразен индивид	$I \rightarrow \emptyset$	$p_3 = (m + \nu)I$
смърт на излекуван индивид	$R \rightarrow \emptyset$	$p_4 = aR$
заразяване/заболяване	$S \rightarrow I$	$p_5 = \beta SI$
излекуване	$I \rightarrow R$	$p_6 = aI$
α_0		$p_1 + \dots + p_6$

Събития в случайния SIR модел: функции на склонност

Например, ако в момент t , броят на податливите и на заразените индивиди е $S(t), I(t)$, то вероятността за заболяване на нов податлив индивид в интервала от време $[t, t + \delta t)$ е:

$$\mathbb{P}(\text{заболяване}) = p_5(t) \cdot \delta t = \beta S(t)I(t)\delta t$$

Ако той заболее, бройката в класа на податливите в момента $t + \delta t$, $S(t + \delta t)$, ще се намали с единица, а на заразените, $I(t + \delta t)$, ще се увеличи с единица.

Задача

- ▶ Запишете алгоритъма на Гилеспи за симулация на епидемиологичен модел.

Параметрите на модела са $m = 10^{-4}$, $\beta = 0.02$, $\nu = 0.1$, $a = 0.3$ и начални условия $S(0) = 50$, $I(0) = 1$, $R(0) = 0$. Изпълнявайте симулации в интервала от време $(0, 100)$ дена.

Ликвидация на заболяването

Една от основните разлики между детерминистичните и случайните епидемиологични модели е при *ликвидацията на заболяването*.

В детерминистичния SIR модел заболяването никога не изчезва за крайно време, тъй като броят заболели намалява експоненциално и достига стойност нула за безкрайно време.

За да се преодолее този недостатък на детерминистичния модел се приема, че заболяването изчезва, ако броят заболели има отрицателен растеж.

Базово число на възпроизводство

При случайния SIR модел заболяването може да изчезне в буквален смисъл, т.е. броят заболели може да стане нула за крайно време. Ще изследваме кои показатели влияят върху динамиката на заболяването. Въвеждаме базовото число на възпроизводство $\mathcal{R}_0$ в SIR модела по следния начин:

$$\mathcal{R}_0 = \frac{\beta N(0)}{m + \nu + a}.$$

С $N(0)$ означаваме първоначалния размер на популацията. В детерминистичните SIR модели ако $\mathcal{R}_0 > 1$, заболяването става ендемично и не може да бъде премахнато.

Задача

Проверете дали базовото число на възпроизводство може да бъде показател дали заболяването ще стане ендемично в случайния SIR модел.

1. За целта променяйте стойността на $\mathcal{R}_0$, като варирайте стойността на параметъра v и проверявайте дали се ликвидира заболяването. За да получите по-точни резултати, трябва да симулирате модела най-малко 100 пъти за всяка стойност на параметъра. При тези симулации оставете началните условия непроменени, а променяйте само параметъра v .
2. Напишете програма, която оценява вероятността от ликвидация на заболяването за различни стойности на $\mathcal{R}_0$. Определете вероятността като пресметнете в колко процента от симулациите за фиксирано $\mathcal{R}_0$ заболяването изчезва.