

# MODUS-COVID Bericht vom 22.02.2024

Hybride ABM-ODE Modelle für die Modellierung von Infektionsdynamik

Inan Bostanci<sup>1</sup>, Kristina Maier<sup>1</sup>,  
Sydney Paltra<sup>2</sup>, Christian Rakow<sup>2</sup>, Jakob Rehmann<sup>2</sup>,  
Christof Schütte<sup>1</sup>, Kai Nagel<sup>2</sup>, Tim Conrad<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Zuse-Inst. Berlin ("ZIB")

<sup>2</sup>Verkehrssystemplanung und Verkehrstelematik ("VSP"), TU Berlin

[nagel@vsp.tu-berlin.de](mailto:nagel@vsp.tu-berlin.de)

Available via TU Berlin repository: <https://doi.org/10.14279/depositonce-19869>

Date of this version: 22-february-2024

This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC BY 4.0) <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>

Website: <https://covid-sim.info>

## Zusammenfassung

Das MODUS-COVID Projekt zielt darauf ab, innovative Methoden und Modelle für die Vorhersage und Analyse der Ausbreitung von Infektionskrankheiten mit einem Fokus auf COVID-19 zu entwickeln. Ein wesentliches Element unserer Arbeit ist unser agentenbasiertes Modell *Episim*, welches individuelle Verhaltensweisen und Interaktionen innerhalb der Bevölkerung abbildet, um so die Infektionsdynamik zu simulieren. Allerdings stoßen agentenbasierte Modelle (ABMs) bei der Simulation großer Populationen oder Regionen oft an ihre Grenzen, insbesondere hinsichtlich der Rechenleistung und Skalierbarkeit.

Um diese Einschränkungen zu überwinden, haben wir einen neuen, hybriden Modellierungsansatz entwickelt. Unser Ansatz kombiniert die Vorteile von agentenbasierten Modellen mit Kompartimentmodellen. Durch diese Kombination ist es möglich, die detaillierte Simulation von individuellem Verhalten, die durch das ABM ermöglicht wird, mit der effizienteren Berechnung von Infektionsdynamiken auf größeren Skalen zu vereinen. In diesem Bericht präsentieren wir die grundlegende Architektur unseres hybriden Modells.

## Von ABMs zu hybriden Modellen

Unser agentenbasiertes Modell (ABM) *Episim* ermöglicht es, Populationen von großen Städten wie Berlin oder Köln in sehr hoher Detailauflösung zu modellieren. ABMs simulieren das

individuelle Verhalten und die Interaktionen einzelner Personen, woraus sich Zusammenhänge auf der Bevölkerungsebene ableiten lassen. Dabei erlauben sie sehr realitätsnahe Simulationen und lassen sich flexibel anpassen, beispielsweise um den Effekt neuer Eindämmungsmaßnahmen zu untersuchen. Allerdings stoßen agentenbasierte Modelle bei der Simulation von großen Gebieten mit sehr vielen Personen an ihre Grenzen, da für die Simulation erhebliche Rechenleistung benötigt wird und mit der Anzahl der simulierten Personen (=Agenten) wächst. Um diese Herausforderung anzugehen, entwickeln wir zusätzlich zu den ABMs sog. hybride Modelle, die die Vorteile mehrerer Modellierungsansätze kombinieren. In diesem Bericht stellen wir solch ein hybrides Modell vor, das ein ABM mit einem sog. Kompartimentmodell koppelt. Während in einem ABM jedes Individuum einer Bevölkerung individuell simuliert wird, berechnen Kompartimentmodelle die Infektionsdynamik einer Bevölkerung als eine aggregierte Einheit. Der benötigte Rechenaufwand dieser Modelle ist damit von der tatsächlichen Größe der simulierten Bevölkerungen unabhängig. Allerdings büßen sie dabei Detailgenauigkeit ein und sind dadurch gut für Fragestellungen auf der Makro-Ebene, aber nicht für Aussagen über die Mikro-Ebene geeignet.

Unser Hybridmodell zielt darauf ab, die Detailtreue von ABMs mit der rechnerischen Effizienz eines Kompartimentmodells zu verbinden, um ein besseres Verständnis der Ausbreitung von Krankheiten in verschiedenen Szenarien für größere Gebiete bzw. Bevölkerungen zu erlangen. Es verbindet beide Modelle räumlich, um eine konsistente Darstellung der Krankheitsdynamik auf der Makro-Ebene zu gewährleisten. Das Hauptziel ist dabei, ein Modell für die Gesamtbevölkerung zu erstellen, das für ausgewählte Regionen vergleichbare Ergebnisse wie ein detailliertes ABM liefert - allerdings bei signifikanter Einsparung von Rechenzeit. Im ersten Schritt entwickeln wir ein Modell, das eine beispielhafte Krankheit für eine synthetische Bevölkerung simuliert, sozusagen eine Epidemie unter Laborbedingungen. Dieses prototypische Hybridmodell und seine einzelnen Komponenten stellen wir folgend vor.

## Das hybride Modell: Agentenbasierter Teil

Das ABM im Hybridmodell simuliert das Verhalten einzelner sog. Agenten, die Individuen oder Gruppen von Menschen in der "echten Welt" repräsentieren. Dabei werden ihre Interaktionen, Bewegungen und Entscheidungsfindungsprozesse berücksichtigt. In der aktuellen Version des Modells bewegen sich die Agenten in einer abstrakten, zweidimensionalen Welt und können einen von drei (Krankheits-)zuständen annehmen: *anfällig (susceptible)*, *infektiös (infectious)* oder *genesen (recovered)*. In diesem Modell hängt die Infektionswahrscheinlichkeit eines *anfälligen* Agenten von seiner Nähe zu einem infizierten Agenten ab. Dies entspricht dem Grundprinzip der Krankheitsübertragung durch Aerosole oder Tröpfchen zwischen Personen am gleichen Ort, wobei die Wahrscheinlichkeit einer Infektion mit der Entfernung abnimmt. Infizierte Agenten erholen sich mit einer festgelegten Rate und werden dauerhaft immun gegen weitere Infektionen. Jede Simulation liefert prinzipiell leicht unterschiedliche Ergebnisse, da die Bewegungen, Infektionsereignisse und Genesungszeiten der Agenten eine zufällige Komponente enthalten.

## Das hybride Modell: Kompartiment-basierter Teil

Das von uns benutzte Kompartimentmodell ist ein klassisches SIR-Modell (Susceptible-Infectious-Recovered) [1], das auf folgenden Differentialgleichungen basiert:

$$\begin{aligned}\frac{dS}{dt} &= -\frac{\beta \cdot S \cdot I}{N} \\ \frac{dI}{dt} &= \frac{\beta \cdot S \cdot I}{N} - \gamma \cdot I \\ \frac{dR}{dt} &= \gamma \cdot I\end{aligned}$$

Das SIR Modell unterteilt die Bevölkerung in die drei Gruppen (oder Kompartimente) S, I und R und beschreibt die Ausbreitung der Krankheit in der Bevölkerung, indem es die Veränderung der jeweiligen Gruppengrößen über einen Zeitraum darstellt. Dabei gibt es zwei Parameter: Der Parameter  $\beta$  für die Infektionsrate steuert, wie schnell die S-Gruppe schrumpft und dabei die I-Gruppe wächst. Der Parameter für die Genesungsrate  $\gamma$  steuert, wie schnell die I-Gruppe schrumpft, während die R-Gruppe wächst. Anders als beim ABM liefert jede Realisierung des Kompartimentmodells mit denselben Parametern stets das gleiche Ergebnis, da es keine zufällige Komponente enthält.

## Das hybride Modell: Gesamtdarstellung

In unserem Hybridmodell wird die gesamte modellierte Bevölkerung in einem 2-dimensionalen rechteckigen Raum (a) in einen durch das ABM und (b) in einen durch das Kompartimentmodell modellierten Bereich unterteilt. Dabei wird ein Austausch zwischen den Modellbereichen zugelassen: Agenten können den ABM-Bereich verlassen und Teil der kompartimentell modellierten Bevölkerung werden und umgekehrt. Den zugrundeliegenden Kopplungsmechanismus beschreiben wir im Anhang.

Der Verlauf der "Grenze" zwischen beiden Modellbereichen kann – im derzeit genauer betrachteten illustrativen Beispiel – entlang der x-Achse verschoben werden, wodurch der Anteil – bzw. das Gewicht – beider Modellteile festgelegt werden kann. Dies wird mittels des Parameters  $w$  beschrieben: Bei  $w=0,5$  wird die Hälfte der Population kompartimentell modelliert (siehe Abbildung 1), für  $w>0,5$  hat das Kompartimentmodell einen größeren und für  $w<0,5$  einen kleineren Anteil am Gesamtmodell.

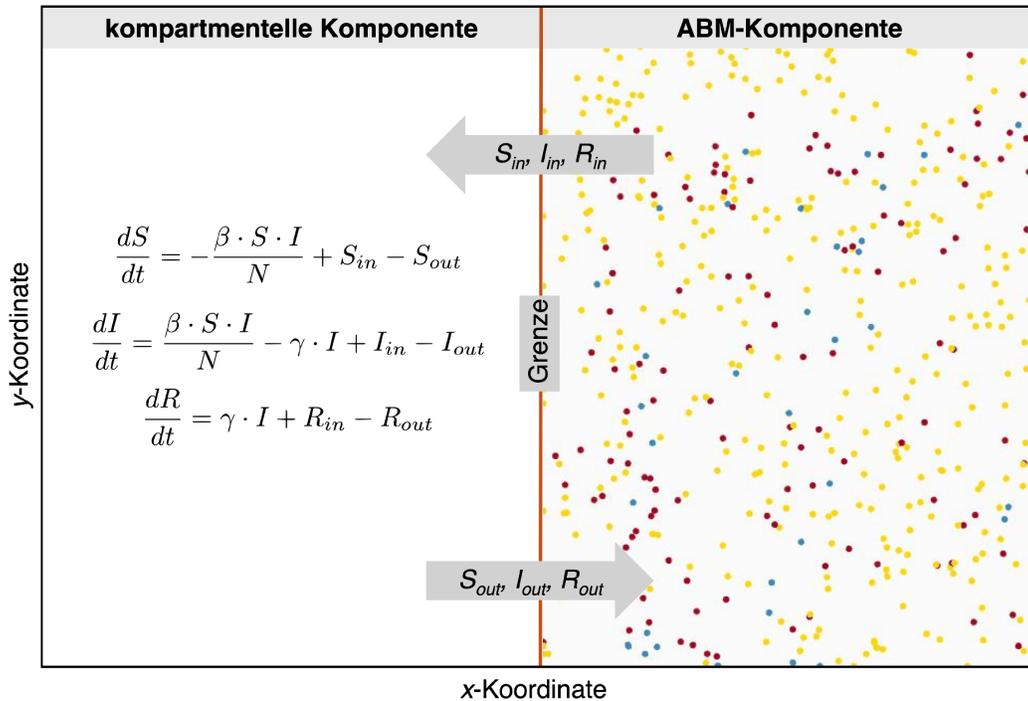


Abbildung 1: Visualisierung des hybriden Modells mit  $w=0.5$ .

Wir passen die Infektions- und Genesungsrate des Kompartimentmodell so an, dass sie die Ausbreitungsdynamik in unserem reinen ABM mit 1000 Agenten annähernd widerspiegelt ( $\beta = 0.38$ ;  $\gamma = 0.07$ ). Wie bereits beschrieben, ist das Kompartimentmodell eine Vereinfachung des ABMs und kann die Infektionsdynamik nicht vollständig nachbilden. Beide Teilmodelle liefern also mit der jeweiligen Parametrisierung nicht die exakt gleiche Infektionsdynamik. Diese Abweichung voneinander ist durch die Kopplung auch im hybriden Modell vorhanden. Abbildung 2 zeigt diesen Unterschied in der von den Modellen simulierten Infektionsdynamik: im Vergleich zum rein agentenbasierten Modell (gestrichelte Kurve) überschätzt das reine Kompartimentmodell (gepunktete Kurve) den Höhepunkt der Infektionswelle und weist eine leichte Verzögerung im Anstieg auf. Im hybriden Modell mit  $w=0,5$  (durchgängige Kurve) ist dieser Unterschied etwas gedämpft.

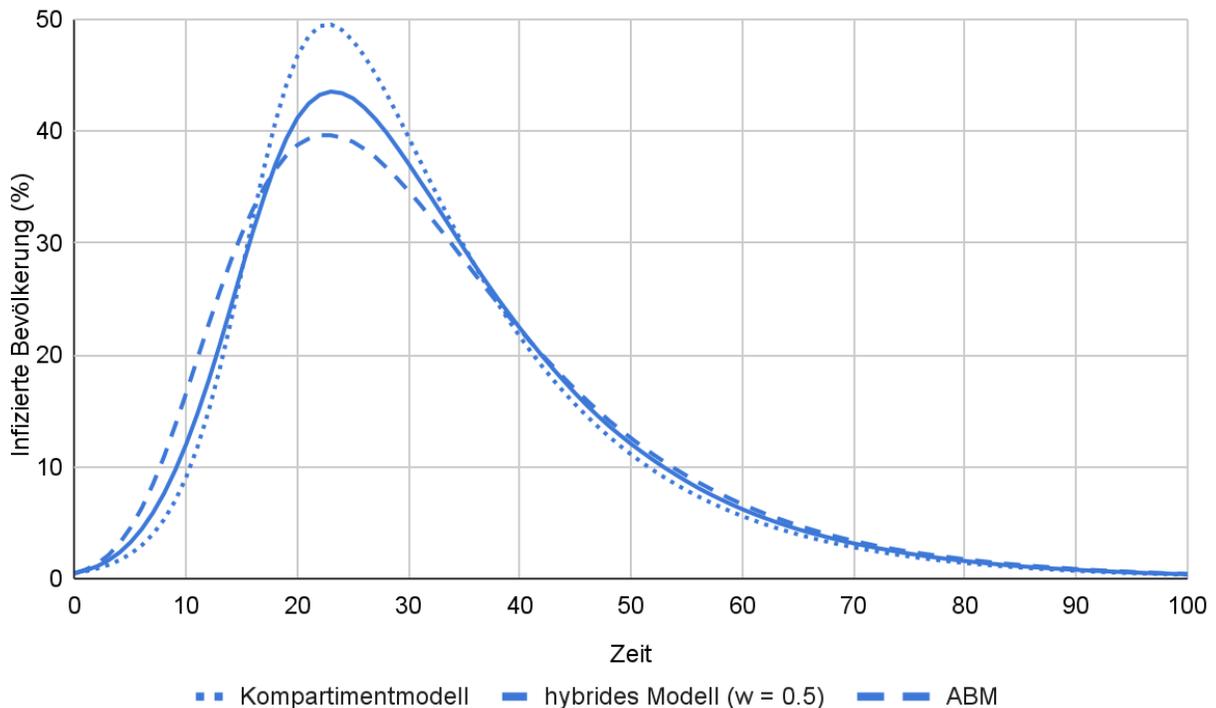


Abbildung 2: Infektionszahlen aus dem kompartmentellen (gepunktet), hybriden (durchgängig) und agentenbasierten Modell (gestrichelt). Für das hybride und agentenbasierte Modell werden Durchschnittswerte von je 500 Simulationen dargestellt. Im hybriden Modell sind beide Modellkomponenten gleich gewichtet.

Im Folgenden untersuchen wir, welche Auswirkung die unterschiedliche Gewichtung der zwei Modellkomponenten im hybriden Modell auf die resultierende Infektionsdynamik und auf die benötigte Rechenleistung hat. Wir gehen dabei davon aus, dass das rein agentenbasierte Modell die richtige Infektionsdynamik ausgibt, und betrachten die Abweichung davon als Fehler. In dieser Sichtweise erwarten wir also, dass der Fehler mit steigender Gewichtung des Kompartimentmodells größer wird, während die benötigte Rechenleistung absinkt.<sup>1</sup> Als Maß für die Rechenleistung verwenden wir die Prozessorzeit.

## Aktuelle Ergebnisse

Um die Auswirkung der Gewichtung der beiden Modellteile zu untersuchen, betrachten wir verschiedene hybride Modelle, in denen der Kompartiment-Anteil schrittweise von 0,02 auf 0,98 erhöht wird. Die Schrittweite beträgt 0,02. Wir starten also mit einem hybriden Modell, bei dem der Kompartiment-Anteil 0,02 und der ABM-Anteil 0,98 beträgt. Im nächsten hybriden Modell beträgt der Kompartiment-Anteil 0,04 und der ABM-Anteil 0,96, und so weiter. Jedes hybride Modell wird 500x simuliert und der Mittelwert berechnet. Für jedes hybride Modell wird der

<sup>1</sup> Als Fehlermaß verwenden wir den Root-Mean-Squared-Error (RMSE) in Referenz zum reinen ABM.

Fehler (bzw. die Abweichung) in Bezug auf das reine ABM berechnet. Im Ergebnis steigt der Fehler der hybriden Modelle mit zunehmendem Anteil des Kompartiment-Modells linear leicht an. Werden weitere Kennzahlen betrachtet, scheint die Gewichtung außerdem einen Einfluss auf weitere Eigenschaften der Dynamik zu haben: So ist beispielsweise der Zeitpunkt des Höhepunkts der Infektionswelle bei Modellen mit eher gleicher Gewichtung beider Komponenten etwas später als bei Modellen mit ungleicher Gewichtung. Zwar sind die Unterschiede nicht groß, aber implizieren Kopplungseffekte, die wir weiter untersuchen werden.

Abbildung 3 zeigt die durchschnittliche Prozessorzeit<sup>2</sup> für die jeweiligen hybriden Modellkonfigurationen. Beim reinen ABM ( $w=0$ ) und bei hybriden Modellen mit Gewichtung bis 0,16 des Kompartimentmodells liegt die benötigte Prozessorzeit bei knapp über 1,7s, sinkt aber folglich bei  $w=0,5$  auf unter 1s und liegt beim Modell mit der höchsten Gewichtung des Kompartimentmodells bei 0,15s. Die Einsparungen bei den Rechenkosten sind also proportional zum Anteil des Kompartimentmodells. Da auch der Fehler proportional zu der Gewichtung ist, erlaubt sich eine Gegenüberstellung von Fehler und Einsparung, wodurch eine Entscheidung für verschiedene Anwendungsziele möglich ist.

Die Ergebnisse zeigen, dass das Hybridmodell in der Lage ist, eine Krankheitsdynamik ähnlich der des reinen ABMs oder des Kompartimentmodells zu simulieren, dabei jedoch erhebliche Einsparungen bei den Rechenkosten erzielt. Diese Einsparungen werden deutlicher, je größer der Anteil des Raumes ist, der durch das Kompartimentmodell modelliert wird.

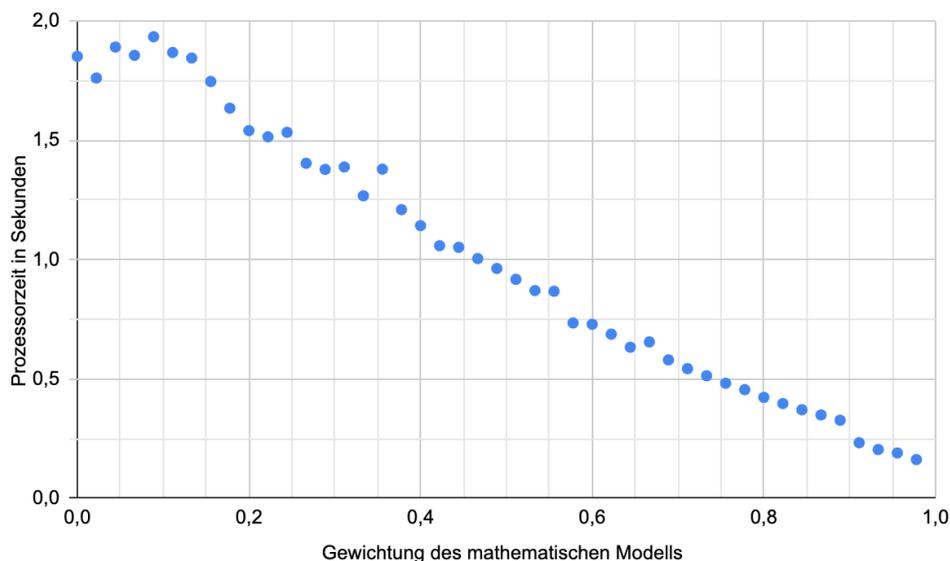


Abbildung 3: Durchschnittliche Prozessorzeit aus je 500 Simulationen für hybride Modelle mit variierender Gewichtung des mathematischen Bereichs.

<sup>2</sup> Mit Prozessorzeit meinen wir die Zeit (in Sekunden), die zur Berechnung des hybriden Modells auf einem Prozessor benötigt wird.

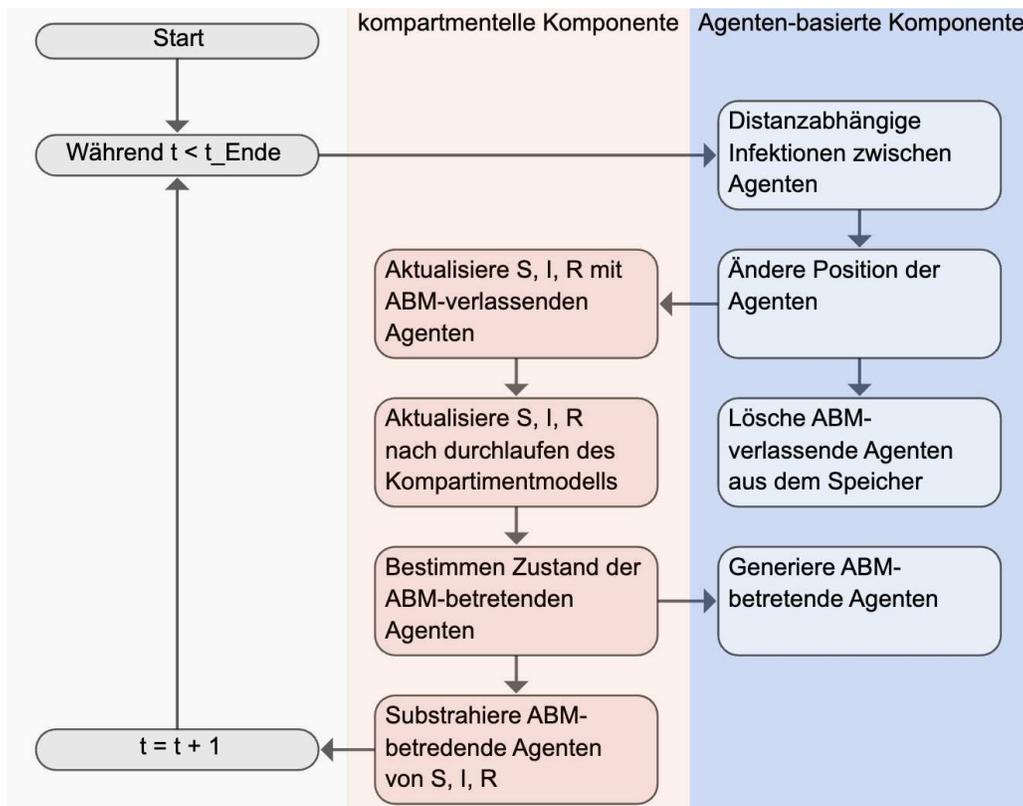
# Fazit

Der in diesem Bericht vorgestellte hybride Ansatz zeigt eine interessante Alternative zu einer rein agentenbasierten Simulation. Zwar kann ein hybrides Modell nicht die Genauigkeit bzw. Detailtiefe eines reinen agentenbasierten Modells erreichen, aber die bisherigen Experimente zeigen, dass die Unterschiede in den entstehenden Dynamiken durchaus im Rahmen liegen. Der zentrale Vorteil eines hybriden Modells liegt sicherlich in der Einsparung von Rechenzeit, was entweder schnellere Ergebnisse oder größere Modelle ermöglicht. Um das hybride Modell für realistische Szenarien anwenden zu können, müssen allerdings diese Unterschiede in den erzeugten Dynamiken besser verstanden werden.

# Quellen

1. Kermack WO, McKendrick AG (1927) A contribution to the mathematical theory of epidemics. Proceedings of the Royal Society of London Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character 115:700–721

# Anhang



*Abbildung 4: Reihenfolge der einzelnen Prozesse innerhalb eines Zeitschritts im hybriden Modell.*

Abbildung 4 beschreibt den Kopplungsmechanismus im hybriden Modell. Agenten können zufällig den kompartmentellen Bereich betreten und werden zu den zugehörigen Kompartiments addiert. Folgend werden diese Agenten aus der Population des ABM gelöscht und das Kompartimentmodell wird mit den neuen Kompartimenten für einen Zeitschritt gelöst. Die gleiche Anzahl von Agenten wechselt im nächsten Zeitschritt vom kompartmentellen Bereich in den agentenbasierten Bereich. Deren Zustand (S, I oder R) ergibt sich dabei aus den aktuellen Kompartimentgrößen.