

АНОТАЦІЯ

Косович І. Т. Моделювання прогнозування поширення епідемій методами рухомих клітинних автоматів та навчанням з підкріпленням. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 113 – "Прикладна математика". – Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, Чернівці, 2025.

Дисертація складається із вступу, чотирьох розділів, висновків, списку літератури та трьох додатків. У вступі обґрунтовано актуальність тематики дисертаційної роботи, проаналізовано сучасний стан досліджень динамічних моделей, що описують прикладні процеси для моделювання епідемій та основних застосувань математичного моделювання в біології, екології, імунології. Інший підхід для моделювання процесів в епідеміології – це імітаційне моделювання з використанням мультиагентного методу. Перевагою цього підходу є те, що враховуються індивідуальні властивості кожного об'єкту складної системи, що дозволяє експериментувати з параметрами моделі та отримати різні сценарії розвитку подій, розширюючи наші уявлення про те, що може відбутися в майбутньому. На основі цього аналізу обґрунтовано актуальність теми дослідження, сформульовано мету, завдання, предмет, об'єкт та методи дослідження, вказано наукову новизну, практичне значення отриманих результатів, зв'язок роботи з науковими темами. Зазначено особистий внесок здобувача, а також наведено дані про те, де доповідались, обговорювались та опубліковано основні результати дисертації.

Перший розділ присвячений аналізу основних наукових праць за тематикою дисертаційної роботи. Насамперед наведено основи математичних моделей епідеміологічних процесів оскільки математичне моделювання є потужним інструментом дослідження процесу поширення інфекційних захворювань. Проведено історичну ієрархію математичних SIR моделей, вказано їх переваги та недоліки.

Наведена класифікація та основні напрямки сучасного розвитку клітин-

них автоматів. Розглянуто роботи по застосуванню методу клітинних автоматів до різноманітних просторово розподілених динамічних процесів та систем, що підтверджує його гнучкість та зручність використання.

Розглянуто популярні програмні засоби, що використовуються для імітаційного моделювання складних систем. Здійснено аналіз найбільш поширеного програмного забезпечення для моделювання епідеміологічних процесів, наведено приклади його використання.

Проаналізовано основні типи машинного навчання та алгоритми, що застосовуються для їх реалізації. Наведено огляд наукових праць в яких методи машинного навчання застосовуються до діагностики і прогнозування захворювання COVID-19 та знаходження ефективних стратегій мінімізації впливу пандемії на суспільство та економіку.

У другому розділі роботи здійснено дослідження поширення епідеміологічних процесів з використанням математичного моделювання та імітаційного моделювання методом клітинних автоматів.

Створення математичних моделей поширення інфекцій є важливим елементом для дослідження складної динаміки поширення захворювання. У підрозділі 2.1 досліджено математичну SIR модель (Susceptible–Infected–Recovered) Кермака–Маккендріка в якій популяцію ділять на три різні групи: здорові особини, що можуть підхопити інфекцію (S); заражені особини, що переносять хворобу (I), і ті, хто одужав і перестав розповсюджувати хворобу (R). У найпростіших SIR моделях здійснюються базові припущення, наприклад, що кожен має однакові шанси підхопити вірус від інфікованої людини, оскільки популяція ідеально і рівномірно змішана, і що всі люди з хворобою однаково заразні, поки не помруть або не одужають.

Досліджено умови локальної ліпшицевості правих частин розглядуваної математичної моделі (Лема 2.1) на підставі чого встановлено, що класична SIR модель Кермака–Маккендріка, яка описує динаміку захворювання на макрорівні, має єдиний розв’язок (Теорема 2.1). Досліджено також граничні властивості розв’язків SIR моделі, одержано співвідношення яке дозволяє

оцінити максимальне число можливих інфікованих осіб.

У підпунктах 2.2.2 та 2.2.3 наведено класифікацію клітинних автоматів, їх базові властивості та основні напрямки застосування до моделювання динамічних систем. На відміну від класичних математичних моделей, які розглядають популяцію як однорідне середовище, підхід на основі клітинних автоматів дозволяє моделювати індивідуальні взаємодії між агентами, що наближує модель до реальних умов. Це особливо важливо для аналізу сценаріїв, де велике значення має географічне поширення інфекції, міграційні процеси та локальні осередки спалахів.

Модифікації SIR моделі на основі клітинних автоматів, що базуються на запропонованих в роботі правилах взаємодії агентів, які враховують вплив різних факторів зовнішнього середовища розглянуто в п.2.3. Важливими для практичних застосувань є запропоновані сценарії моделювання: ізоляція, карантин, вакцинація, носіння масок та їх комбінації. У підпункті 2.3.4 запропонована функціональна схема моделювання цих сценаріїв.

У цьому ж розділі проведено аналіз результатів моделювання згідно запропонованих сценаріїв поширення пандемії COVID-19. Сценарії, у яких було враховано лише масковий режим або тільки вакцинацію, продемонстрували високий пік захворюваності та значне перевантаження медичної системи. Натомість поєднання вакцинації, маскового режиму та самоізоляції дозволяє суттєво зменшити пікове навантаження на систему охорони здоров'я та розтягнути епідемічний процес у часі, що є критично важливим для зменшення негативних наслідків пандемії.

Результати моделювання епідемій в цьому розділі підтвердило, що клітинні автомати дозволяють більш гнучкіше налаштовувати параметри моделювання, враховувати просторові обмеження та соціальні взаємодії. Крім того, такий підхід дає можливість досліджувати не лише середні характеристики епідемії, а й окремі випадки її розвитку за різних початкових умов. Завдяки цьому можна аналізувати, як певні заходи можуть впливати на конкретні групи населення або регіони з різною щільністю проживання.

Стійкість запропонованих в роботі сценаріїв моделювання епідеміологічного процесу була підтверджена шляхом багаторазового запуску симуляцій із різними початковими параметрами. Було показано, що результати залишаються стабільними, а отримані криві захворюваності демонструють подібні тенденції при повторних експериментах. Це свідчить про надійність моделі та можливість її застосування для прогнозування динаміки епідемій у реальних умовах.

У третьому розділі дисертації наведено дослідження моделювання COVID-19 за допомогою методів машинного навчання, а саме навчання з підкріпленням для оптимізації заходів боротьби з пандемією. На даний час машинне навчання є одним із найпотужніших інструментів аналізу та обробки даних, що застосовується для побудови моделей прогнозування й автоматизованого виявлення закономірностей.

У п. 3.1 роботи наведено основні поняття марковського процесу прийняття рішень, який є математичною моделлю для застосування машинного навчання з підкріпленням. Детально описано структуру компонент MDP та їх математичних характеристик, що дозволяють описати процес прийняття рішень і розробити ефективні алгоритми навчання.

У роботі запропоновано SIHRD-модель в якості середовища моделювання для розширення класичної SIR-моделі за допомогою алгоритму Advantage Actor-Critic (A2C) для оптимізації прийняття рішень у задачах моделювання поширення COVID-19.

У п. 3.3 запропоновано і реалізовано схему процесу навчання агента, яка починається з ініціалізації моделювання (Start), де створюється середовище навчання з підкріпленням у поєднанні з агент-орієнтованим підходом (Create RL and Agent-Based Environment). На цьому етапі визначаються параметри моделі: простір станів, набір можливих дій агента, функція винагороди та правила динаміки середовища.

Під час кожної ітерації агент спочатку обирає дію (Action Selection) згідно зі своєю політикою, яка може базуватися як на випадковому виборі (на

ранніх етапах навчання), так і на накопиченому досвіді. Після вибору дії вона виконується в моделі (Simulation Execution). Оновлений стан аналізується в наступному блоці (State Evaluation), де оцінюється новий стан системи після впливу агента. Далі здійснюємо обчислення винагороди (Reward Calculation) на основі ефективності обраної дії. Ця ітераційна схема дозволяє агенту поступово вдосконалювати свою політику, адаптуючи стратегію прийняття рішень на основі отриманих винагород і зворотного зв'язку від середовища.

Для аналізу і пошуку найкращих параметрів соціального дистанціювання під час динаміки поширення COVID-19 і для детального вивчення ряду можливих сценаріїв було проведено моделювання за допомогою навчання з підкріпленням. На основі проведених симуляцій зроблено висновки щодо ефективності різних рівнів соціального дистанціювання для стримування поширення інфекції.

У четвертому розділі роботи представлено опис розробленого прикладного веб-додатку для моделювання поширення інфекцій, який є зручним інструментом, що дозволяє користувачам в інтерактивному режимі обирати модель для моделювання, налаштовувати її параметри, задавати початкові умови та аналізувати результати отримуючи миттєві візуалізації прогнозів. У п. 4.2-4.3 описано архітектурні рішення, щодо розробки фронтенд частини на основі React + TypeScript з використанням React Router для маршрутизації та бекенд частини, яка реалізована за допомогою FastAPI. Наведено основні вимоги до функціональності додатку, зокрема можливість вибору моделі, передачі параметрів користувачем та відображення результатів у вигляді графіків. Окремо розглянуто особливості інтеграції між фронтенд та бекенд частинами, методи ефективного обміну даними через REST API, а також підходи до контейнеризації для розгортання додатку. Здійснено оцінку продуктивності реалізованого додатку, а також перспективи його розширення для підтримки нових моделей та сценаріїв моделювання.

Теоретичне та практичне значення отриманих результатів. Робота ілюструє важливе значення та потенціал математичного моделювання

для вивчення закономірностей розповсюдження епідемій та планування політики щодо заходів боротьби з ними. SIR модель та її модифікації добре описують поведінку інфекційних процесів на макрорівні, однак високий рівень абстракції від реальності не дозволяють ефективно передбачити наслідки різноманітних обмежувальних заходів, що впроваджуються.

Поєднання математичного моделювання та машинного навчання до дослідження епідемій дозволяє здійснити моделювання більш чутливим до змін умов протікання хвороби та здійснити більш точні прогнози. Застосування машинного навчання з підкріпленням дозволяє проаналізувати можливі рівні дистанціювання при пандемії та вибрати оптимальні стратегії соціального дистанціювання, які є найбільш доцільними для реального застосування.

Результати роботи можуть бути рекомендовані органам місцевого самоврядування для аналізу прогнозування динаміки поширення вірусних захворювань та оптимізації обмежувальних заходів стримування пандемій.

Ключові слова: математичні моделі, динамічні системи, інфекційні захворювання, мульти-агентні моделі, SIR модель, клітинні автомати, функціональна схема моделювання, імітаційне моделювання, сценарії моделювання епідемій, алгоритми, комп'ютерне моделювання, навчання з підкріпленням, інтелектуальні системи, інформаційні технології, числові експерименти.

ABSTRACT

Kosovych I. T. Modelling of epidemic spread forecasting by methods of moving cellular automata and reinforcement learning. – Qualified scientific work on the rights of the manuscript.

Thesis for the degree of Doctor of Philosophy (PhD) in specialty 113 – "Applied Mathematics". – Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University, Chernivtsi, 2025.

The thesis consists of an introduction, four chapters, conclusions, a list of references and three appendices. The introduction justifies the relevance of the topic of the dissertation, examines the current state of research on dynamic models describing applied processes for modelling epidemics and the main applications of

mathematical modelling in biology, ecology, and immunology. Another approach to modelling processes in epidemiology is simulation modelling using a multi-agent method. The advantage of this approach is that it takes into account the individual properties of each element of a complex system, which allows us to experiment with model parameters and obtain different scenarios, expanding our understanding of potential future outcomes. On the basis of this analysis, the relevance of the research topic is substantiated, the purpose, objectives, subject, object and methods of the study are formulated, the scientific novelty, practical significance of the results obtained, and the study's connection to broader scientific themes are highlighted. The personal contribution of the applicant is indicated, as well as data on where the main results of the dissertation were presented, discussed and published.

The first chapter is devoted to the analysis of the main scientific works on the topic of the dissertation. First of all, the fundamentals of mathematical models of epidemiological processes are presented, since mathematical modelling is a powerful tool for studying the spread of infectious diseases. The historical evolution of mathematical SIR models is presented, and their advantages and disadvantages are indicated.

The classification and key directions of modern developments in cellular automata are presented. Studies on the application of the cellular automata method to various spatially distributed dynamic processes and systems are reviewed, confirming its flexibility and practical applicability. Popular software tools used for the simulation modeling of complex systems are examined. The most widely used software for modeling epidemiological processes is analyzed, and examples of its use are given.

The main types of machine learning and algorithms techniques used for their implementation are examined. A review of scientific papers in which machine learning methods are applied to the diagnosis and prognosis of COVID-19 and the identification of effective strategies to mitigate the impact of the pandemic on society and the economy is presented.

In the second section of the paper, the spread of epidemiological processes is investigated using mathematical modelling and simulation modelling using cellular automata.

The construction of mathematical models of infection spread is an important element in the study of complex disease dynamics. In Section 2.1, we examine the classical mathematical SIR (Susceptible-Infected-Recovered) model of Kermack–McKendrick, in which a population is divided into three distinct groups: susceptible individuals who can contract the infection (S), infected individuals who carry the disease (I), and recovered individuals who are no longer infectious (R). The simplest SIR models rely on fundamental assumptions, such as that everyone has the same chance of contracting the infection from an infected person due to the population being perfectly and evenly mixed, and that all infected individuals are equally contagious until they recover or die.

The conditions for local Lipschitz continuity of the right-hand sides of the considered mathematical model are investigated (Lemma 2.1). Based on this, it is established that the classical Kermack-McKendrick SIR model, which describes the dynamics of the disease at the macro level, has a unique solution (Theorem 2.1). The limit properties of the SIR model solutions are also investigated, and a relationship is derived that allows estimating the maximum possible number of infected individuals.

Subsections 2.2.2 and 2.2.3 provide a classification of cellular automata, their basic properties and the main directions of application to modelling dynamic systems. In contrast to classical mathematical models that treat a population as a homogeneous environment, the cellular automata approach enables modelling individual interactions between agents, which brings the model closer to real-world conditions. This is particularly important for analysing scenarios where the geographical spread of infection, migration processes, and local outbreaks are of significant importance.

Modifications of the SIR model based on cellular automata, developed according to the interaction rules of agents proposed in this paper, which account for

the influence of various environmental factors, are considered in Section 2.3. The proposed modelling scenarios—such as isolation, quarantine, vaccination, mask-wearing, and their combinations—are particularly important for practical applications. A functional modelling framework for these scenarios is proposed in Subsection 2.3.4.

This section also presents an analysis of the modelling results under the proposed COVID-19 pandemic scenarios. Scenarios considering only mask-wearing or vaccination alone demonstrated a high peak in infection rates and a significant overload of the medical system. In contrast, the combination of vaccination, mask-wearing, and self-isolation substantially reduces the peak burden on the healthcare system and stretches the epidemic curve over time, which is critical to mitigating the negative effects of the pandemic.

The results of the epidemic modelling in this section confirm that cellular automata enable for more flexible adjustment of modelling parameters, allowing for the consideration of spatial constraints and social interactions. Furthermore, this approach makes it possible to study not only the average characteristics of an epidemic but also individual cases of its progression under different initial conditions. This makes it possible to analyse how certain measures may affect specific population groups or regions with different population densities.

The robustness of the epidemiological process modelling scenarios proposed in this study was validated through multiple simulation runs with different initial parameters. The results demonstrated stability, with the obtained incidence curves exhibiting consistent trends across repeated experiments. This confirms the reliability of the model and its applicability for forecasting epidemic dynamics in real life.

The third chapter of the thesis presents a study of COVID-19 modelling using machine learning methods, namely reinforcement learning to optimise pandemic response. Currently, machine learning is one of the most powerful data analysis and processing tools used to build forecasting models and automated pattern recognition.

Section 3.1 of the paper presents the basic concepts of the Markov decision process, which is a mathematical model for the application of machine learning with reinforcement. The structure of the MDP components and their mathematical characteristics are described in detail, allowing them to describe the decision-making process and develop effective learning algorithms.

The paper proposes the SIHRD model as a modeling environment for expanding the classical SIR model using the Advantage Actor-Critic (A2C) algorithm to optimize decision-making in the tasks of modeling the spread of COVID-19.

Section 3.3 proposes and implements a scheme for the agent training process, which begins with the initialization of the simulation (Start), where a reinforced learning environment is created in combination with an agent-oriented approach (Create RL and Agent-Based Environment). At this stage, the model parameters are determined: the state space, the set of possible agent actions, the reward function, and the rules of the environment dynamics.

During each iteration, the agent first chooses an action (Action Selection) according to its policy, which can be based on both random selection (in the early stages of learning) and accumulated experience. After the action is selected, it is executed in the model (Simulation Execution). The updated state is analyzed in the next block (State Evaluation), where the new state of the system after the agent's influence is evaluated. Next, we calculate the reward (Reward Calculation) based on the effectiveness of the selected action. This iterative scheme allows the agent to gradually improve its policy, adapting its decision-making strategy based on the rewards received and feedback from the environment.

To analyze and find the best parameters of social distancing during the dynamics of the spread of COVID-19 and to study in detail a number of possible scenarios, a reinforcement learning simulation was conducted. Based on the simulations, conclusions were drawn about the effectiveness of different levels of social distancing in containing the spread of infection.

The fourth section of the work presents a description of the developed web application for modeling the spread of infections, which is a convenient tool that

allows users to interactively select a model for modeling, achieve its parameters, set initial conditions and analyze the results, obtaining instant visualizations of forecasts. Sections 4.2–4.3 describe architectural solutions for developing front-end parts based on React + TypeScript using React Router for routing and back-end parts, which are implemented using FastAPI. The main requirements for the functionality of the application are given, in particular, the ability to select a model, pass parameters to the user and display results in the form of graphs. We separately note the features of integration between the front-end and back-end parts, methods of effective bypass are provided via the REST API, and are also suitable for containerization for deploying the add-on. The performance of the implemented application was assessed, as well as the prospects for its expansion to support new models and modeling scenarios.

Theoretical and practical significance of the results. This research highlights the importance and potential of mathematical modeling in understanding the patterns of epidemic spread and informing policy decisions for containment measures. While the SIR model and its modifications effectively describe the behavior of infectious processes at a macro level, their high level of abstraction from reality limits their ability to accurately predict the impact of various restrictive measures being implemented.

The integration of mathematical modelling and machine learning in epidemic research enhances the sensitivity of simulations to changing disease conditions and improves the accuracy of forecasts. The application of reinforcement learning enables the analysis of various social distancing levels during a pandemic, helping to identify optimal distancing strategies that are most appropriate for real-world implementation.

The results of this study can be recommended to local governments for forecasting the spread of viral diseases and optimizing restrictive measures to mitigate pandemics. Keywords:

Key words: mathematical models, dynamic systems, infectious diseases, multi-agent models, SIR model, cellular automata, functional modelling scheme,

simulation modelling, epidemic modelling scenarios, algorithms, computer modelling, reinforcement learning, intelligent systems, information technologies, numerical experiments.

Список публікацій за темою дисертації

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

Наукові праці у виданнях, включених до переліку наукових фахових видань України:

1. Косович І. Т., Щур Т. В., Черевко І. М. Математичне та імітаційне моделювання епідеміологічних процесів. *Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки: Зб. наукових праць.* Кам'янець-Подільський, 2022. Вип. 23. С. 49-57. (*Особистий внесок: розробка моделі імітаційного моделювання інфекційних захворювань*).

2. Черевко І. М., Косович І. Т. Імітаційне моделювання SIR моделей методом клітинних автоматів. *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія "Математика і інформатика".* Т. 45, № 2. Ужгород : Видавництво УжНУ "Говерла", 2024. С. 276-285. (*Особистий внесок: розробка моделі середовища моделювання для навчання з підкріпленням. Запропоновано та реалізовано стратегії обмежувальних заходів при моделюванні інфекційних хвороб*).

Наукові праці у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у наукометричній базі даних Scopus:

3. Kosovych I., Cherevko I., Vyklyuk Y., Nevinskyi D. Simulation of Various Distribution Restrictions of COVID-19 using Cellular Automata. *Proceedings – International Conference on Advanced Computer Information Technologies, ACIT* (26–28 September 2022, Spisska Kapitula, Slovakia). P. 58-61. (Scopus) (*Особистий внесок: розробка алгоритму моделювання епідемій методом клітинних автоматів*).

4. Kosovych I., Cherevko I., Shchur T., Shkilniuk D. Computer Modeling of the Dynamics of Epidemiological Processes. *Proceedings – International Conference on Advanced Computer Information Technologies, ACIT* (19-21 September 2024, Ceske Budejovice, Czech Republic). P. 32-35. (Scopus) (*Особистий внесок: створення математичної моделі та моделювання COVID-19 і оптимізація заходів боротьби з пандемією*).

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

5. Косович І. Т. Моделювання різних сценаріїв поширення COVID-19 методом клітинних автоматів. *Підстригачівські читання – 2022: матеріали конференції молодих учених* (Львів, 25-27 травня 2022 р.). Матеріали конференції. Львів, 2022. <http://www.iapmm.lviv.ua/chyt2022/abstracts/Kosovych.pdf>

6. Косович І. Імітація поширення COVID-19 методом клітинних автоматів. *Матеріали міжнародної наукової конференції "Прикладна математика та інформаційні технології", присвяченої 60-річчю кафедри прикладної математики та інформаційних технологій*, 22-24 вересня 2022 р. Чернівці: Чернівецький нац. ун-т, 2022. С. 176-178.

7. Косович І. Моделювання навчання з підкріпленням для соціального дистанціювання під час COVID-19. *Матеріали міжнародної наукової конференції "Сучасні проблеми механіки та математики – 2023"* (23-25 травня 2023 р., Львів, Україна). С. 253-254.

8. Косович І., Щур Т., Щур О. Моделювання SIR моделей для прогнозування поширення COVID-19. *Матеріали міжнародної наукової конференції "Математика та інформаційні технології", присвяченої 55-річчю факультету математики та інформатики*, 28-30 вересня 2023 р. Чернівці: Чернівецький нац. ун-т, 2023. С. 225-226. (*Особистий внесок: алгоритм створення мобільного додатку для імітаційного моделювання інфекцій*).

9. Косович І. Т., Черевко І. М., Краснокутський О. С. Агентно-орієнтоване моделювання поширення епідемій. *10 Міжнародна наукова конференція "Сучасні проблеми математичного моделювання, прогнозування та оптимізації" пам'яті проф., чл.-кор. НАПНУ А.Ф. Верланя* (28-29 червня 2024 р.,

Кам'янець-Подільський). Тези доповідей. Кам'янець-Подільський: Кам'янець-Подільський національний університет імені Івана Огієнка, 2024. С. 98-100. (*Особистий внесок: алгоритм моделювання політики соціального дистанціювання*).

10. Косович І. Ефективність стратегій в боротьбі з епідемією. *Матеріали VI Міжнародній науково-практичній конференції "Моделювання, керування та інформаційні технології"* (9-11 листопада 2023 року, м. Рівне). С. 121-122.