

Agent-based multiscale model for aerosol-borne infection transmission in heterogeneous indoor environments.

Abstract. In this paper, we present a model that combines an agent-based approach with a coupled dynamical equation model of the infection box type. The model allows us to estimate the probability of infection in everyday situations where people (agents) interact through various activities and in enclosed spaces. We analyze two complex heterogeneous scenarios by modifying i) the ventilation rate in some classrooms and ii) the duration of class and recess periods. These heterogeneous scenarios cannot be represented in standard agent-based models.

Keywords: Hybrid Modeling; Multiscale Simulation; Viral Infection

Modelo multiescala basado en agentes para transmisión de infecciones vía aerosoles en ambientes interiores heterogéneos

Esteban Lanzarotti^{1*}, Andrea Pineda Rojas² and Rodrigo Castro¹

¹ Instituto de Ciencias de la Computación, UBA-CONICET

² Centro de Investigaciones del Mar y la Atmósfera, UBA-CONICET.

*elanzarotti@dc.uba.ar

Abstract. En este trabajo presentamos un modelo que combina el enfoque basado en agentes con un modelo acoplado de ecuaciones dinámicas de tipo caja-infección. El modelo permite estimar la probabilidad de contagio en situaciones cotidianas en las que las personas (agentes) se encuentran interactuando a través de diversas actividades y espacios cerrados. Se analizan dos escenarios heterogéneos complejos modificando i) la tasa de ventilación en algunas aulas y ii) la duración de los períodos de clases y de recreos. Estos escenarios heterogéneos no son posibles de ser representados en los modelos estándar basados en agentes.

Keywords: Modelado Híbrido; Simulación Multiescala; Infección Viral

1 Introducción

Si bien numerosos países atravesaron un intenso proceso de aprendizaje durante la pandemia de COVID-19, aún resulta necesario profundizar la comprensión de los mecanismos combinados de propagación de enfermedades respiratorias infecciosas. Los modelos de simulación pueden facilitar la toma de decisiones al presentar proyecciones anticipadas basadas en escenarios hipotéticos. Se ha planteado que los virus que emanan de personas infectadas pueden permanecer suspendidos en aerosoles (partículas sólidas o líquidas de distintos tamaños). Por lo tanto, los espacios interiores mal ventilados pueden favorecer nuevas infecciones, ya que las partículas virales permanecen inhalables durante varias horas. Existen modelos analíticos que se basan en el supuesto general de que las características del entorno físico son constantes en el espacio y el tiempo. Este tipo de modelado homogeneizador es un recurso práctico, especialmente cuando no se dispone de datos que describen dinámicas más detalladas. Sin embargo, el modelado heterogéneo puede ser más adecuado para responder preguntas que requieren descripciones espaciotemporales con mayor precisión o capacidad descriptiva, a menudo con el costo de una mayor complejidad en el modelo. En el presente trabajo incorporamos la interacción de agentes móviles con los espacios físicos por los que circulan, modelando la concentración viral suspendida en espacios interiores durante un evento de contagio. Finalmente, realizamos

tres experimentos para ilustrar cómo este enfoque puede aportar información para mejorar la toma de decisiones sobre el fenómeno complejo de contagios en interiores a través de espacios compartidos.

2 Modelo de caja-infección del día escolar

Especificamos nuestro modelo basado en agentes utilizando retQSS (Santi et al., 2020, <https://gitlab.com/lukius/retqss>), un entorno de modelado de propósito general para sistemas de partículas en geometrías reticuladas. retQSS amplía la capacidad expresiva del lenguaje μ -Modelica para definir dinámicas cinéticas de partículas espacialmente explícitas y orientadas a eventos discretos de forma compacta y expresiva.

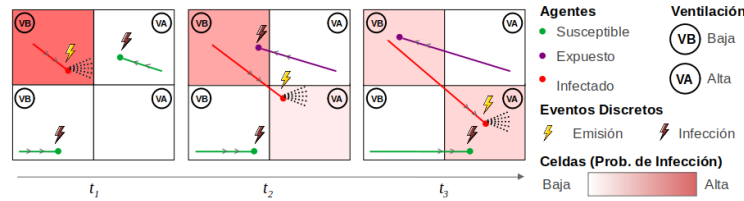


Fig. 1. Ejemplo de agentes moviéndose en un espacio reticulado de 2x2 celdas.

La simulación comienza con una población con un agente infectado interactuando con un entorno tipo grilla compuesto de celdas (habitaciones) contiguas. Los estados de cada agente se corresponden con los de un modelo epidemiológico tipo SEIR (Susceptible, Expuesto, Infectado, Removido). La respiración de los agentes se modela como eventos discretos que ocurren cada intervalos de tiempo de duración T_B . En cada evento un agente i en estado Infectado emite una cantidad $q_i = E_{p0}r_E f_E T_B$ de cuantos virales, donde E_{p0} es la tasa de emisión de cuantos por hora en condiciones de reposo, r_E es un factor de escala de la tasa de emisión y f_E es la eficiencia de cobertura facial (1 mínima, 0 máxima). Un agente en estado Susceptible puede ser infectado por la celda en la que está presente. En cada evento respiratorio, un agente i inhala un volumen $b_i = B_0 r_B f_I T_B$, donde B_0 es la frecuencia respiratoria volumétrica base (que define el volumen inhalado por un agente en 1 hora en condiciones de reposo), r_B un factor de escala de frecuencia de inhalación y f_I una eficiencia de inhalación con barbijo.

Las emisiones modifican la concentración viral en las celdas donde están presentes los agentes. Definimos la dinámica de la concentración viral $c_j(t)$ de una celda j como lo indica el modelo de caja (Ecuación 1, Ryan et al., 1988), y la probabilidad de infección para un agente susceptible i en una celda j utilizando el modelo de Wells-Riley (Ecuación 2, Riley et al., 1978):

$$\frac{dc_j(t)}{dt} = \frac{Q_j(t)}{V_j} \sum_{k \in \mathbb{N}} \delta(t - t_k) - \lambda_j c_j(t) \quad (1) \quad P_i^{inf}(t) = 1 - \exp(-c_j(t)b_i) \quad (2)$$

donde V_j es el volumen de la celda j y $\delta(\cdot)$ es la función de Dirac. Además, $t_k = k T_B$ ($k \in \mathbb{N}$) denota los instantes de los eventos discretos en los que los

agentes emiten carga viral en la habitación. Dicha carga emitida es $Q_j(t) = \sum_{i \in aic(j,t)} q_i(t)$. El conjunto $aic(j,t) = \{i | agent_i(x(t), y(t)) \in cell_j\}$ contiene a los agentes i encontrados en la celda j en el tiempo t . Todas las celdas comienzan con una concentración de virus cero ($c_j(t_0) = 0, \forall j$). La reducción de la concentración de virus mediante la ventilación se modela con el parámetro de intensidad de ventilación λ_j para cada celda j .

Diseñamos un entorno similar a uno escolar con varias aulas como ejemplo ilustrativo de las capacidades del modelo. La simulación comienza con los agentes permaneciendo en 8 aulas separadas durante 1 hora y 15 minutos, salen al recreo 15 minutos a un pasillo central, y luego regresan a las aulas. Este comportamiento se repite a lo largo de la jornada escolar (con duración D configurable). Finalmente, calculamos la tasa de ataque (o *Attack Rate*) del escenario escolar como $AR^S = (E/N_{sus})/I_0$, donde E es el número final de agentes en estado Expuesto al final de la simulación, N_{sus} es el número inicial de agentes Susceptibles (calculado como $N - I_0$) e I_0 es el número inicial de agentes Infectados.

3 Resultados de las simulaciones

En esta sección realizamos experimentos y barridos de parámetros para abordar dos posibles preguntas clave relacionadas con la tasa de ataque:

- i) ¿Cuál es el impacto de tener algunas aulas con peor ventilación? (es decir, AR^S en función del número de aulas con ventilación ineficiente $\#IVC$)
- ii) ¿Cómo se ve influenciada la tasa de ataque (AR^S) por la variación de la clase y la duración de los descansos?

Establecemos los parámetros de base de la siguiente manera: La duración de la jornada escolar se establece en $D = 5h$. La ventilación de las aulas y del pasillo en $\lambda_A = \lambda_P = 5.8 h^{-1}$, los volúmenes de las celdas en $V = 170m^3$, la frecuencia respiratoria volumétrica se establece en $B_0 = 0.288 m^3 h^{-1}$ (Peng et al., 2022), $T_B = 0.001 h$ y $E_{p0} = 65 \text{ quanta } h^{-1}$. Los parámetros de actividad física r_E y r_B y cobertura de máscara f_I y f_E se configuraron iguales a 1.

Para la pregunta i), simulamos un número creciente de aulas con ventilación ineficiente ($\#IVC$). El entorno escolar tiene 8 aulas, por lo que variamos el $\#IVC$ de 1 a 8. Estas aulas tendrán una tasa de ventilación diferente denotada con λ_{IVC} . En la Figura 2.a, mostramos cómo AR^S , disminuye en función de λ_{IVC} . Cuando $\#IVC = 1$, AR^S no cambia significativamente de $\lambda_{IVC} = 1$ a $\lambda_{IVC} = 5$. Sin embargo, al observar escenarios con $\#IVC$ en aumento, AR^S crece bruscamente de forma no lineal a medida que empeora la ventilación.

Para la pregunta ii), mostramos en la Figura 2.b las tasas de ataque obtenidas al configurar las simulaciones con diferentes duraciones de clase y recreo. Las tasas de ataque más bajas se producen con períodos de clase más cortos y períodos de recreo más largos, como era de esperar. Este experimento demuestra que, incluso con el mismo nivel de ventilación en todas las aulas, es beneficioso no ocupar la misma habitación durante un período prolongado. El desplazamiento entre habitaciones cerradas previene la acumulación de cantidades significativas de partículas virales que aumentan la probabilidad de infección.

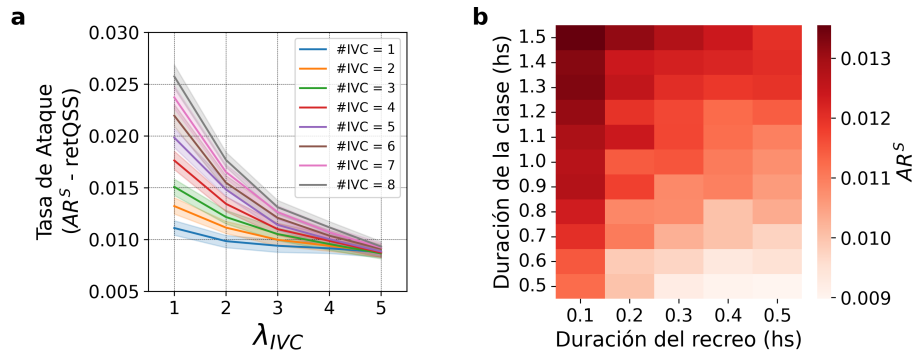


Fig. 2. Escenarios para un día escolar. a) Tasa de ventilación de cada aula para un número creciente $\#IVC$ de aulas ineficientemente ventiladas (AR^S en función de λ_{IVC}) b) AR^S obtenido para diferentes duraciones de clases y descansos.

4 Conclusión

Desarrollamos un modelo híbrido de simulación que combina técnicas de eventos discretos con dinámicas continuas y dinámicas de agentes, representando la transmisión de infecciones mediante aerosoles. El modelo simula el comportamiento de individuos que exhalan y liberan continuamente aerosoles en su entorno. Los aerosoles se acumulan en el espacio que recorren, lo que nos permite analizar la transmisión del agente infeccioso. retQSS nos permitió definir la geometría del entorno independientemente de las reglas de comportamiento de los agentes. Los comportamientos heterogéneos resultaron fáciles de especificar de forma inequívoca mediante retQSS y μ -modelica. A modo de ejemplo, estudiamos un caso inspirado en las características típicas del tamaño de las aulas y la distribución arquitectónica en escuelas públicas en Buenos Aires.

Analizamos las dinámicas de propagación cuando algunas aulas tienen ventilación ineficiente. Esto es importante para la formulación de políticas, ya que permite explorar experimentos basados en supuestos hipotéticos que podrían validarse al realizar cambios costosos en entornos escolares reales, como modificar la ventilación de los edificios o cambiar la duración de las clases. Los resultados de estos escenarios de mayor complejidad mostraron claras relaciones no lineales, lo que sugiere firmemente que no es aconsejable extrapolar linealmente las tasas de ataque a partir del conocimiento previo sobre eventos de contagio en un solo entorno.

References

Peng, Z., Pineda-Rojas, A. L., Kropff, E., Bahnfleth, W., Buonanno, G., Dancer, S. J., Kurnitski, J., Li, Y., Loomans, M. G., Marr, L. C., Morawska, L., Nazaroff, W., Noakes, C., Querol, X., Sekhar, C., Tellier, R., Greenhalgh,

- T., Bourouiba, L., Boerstra, A., . . . Jimenez, J. L. (2022). Practical indicators for risk of airborne transmission in shared indoor environments and their application to covid-19 outbreaks. *Environmental Science and Technology*, *56*, 1125–1137.
- Riley, E., Murphy, G., & Riley, R. (1978). Airborne spread of measles in a suburban elementary school. *American journal of epidemiology*, *107*(5), 421–432.
- Ryan, P. B., Spengler, J. D., & Halfpenny, P. F. (1988). Sequential box models for indoor air quality: Application to airliner cabin air quality. *Atmospheric Environment (1967)*, *22*(6), 1031–1038.
- Santi, L., Fernández, J., Kofman, E., & Castro, R. (2020). Retqss: A novel methodology for efficient modeling and simulation of particle systems in reticulated geometries. *270*, 108157.