

ДВОМАСШТАБНА МОДЕЛЬ ЕПІДЕМІЧНОГО ПОШИРЕННЯ: ПОРІВНЯННЯ З ОДНОШАРОВИМ АЛГОРИТМОМ ГІЛЛЕСПІ

Юліан Куриляк¹, Міхаель Еммеріх²

¹ Національний університет “Львівська політехніка”,
кафедра Інформаційних Систем та Мереж, Львів, Україна

² Університет Ювяскюля,

факультет Інформаційних Технологій, Ювяскюля, Фінляндія

¹ E-mail: yulian.a.kuryliak@lpnu.ua, ORCID: 0000-0002-6600-2637

² E-mail: michael.t.m.emmerich@jyu.fi ORCID: 0000-0002-7342-2090

© Ю. Куриляк, М. Еммеріх, 2025

Стаття є однією з серії статей авторів про моделювання спалаху епідемії і подає практичну реалізацію та перевірку двомасштабної (мікро–макро) схеми моделювання епідемічного поширення у мережах зі спільотною структурою. На мікрорівні кожна спільнота моделюється стохастичним SI-процесом із фіксованим коефіцієнтом передачі та повним внутрішнім графом; на макрорівні між спільнотами відбуваються рідкі події імпорту інфекції, інтенсивність яких визначається поточною “заразністю” донора, “вразливістю” реципієнта та вагами міжспільнотних зв’язків. Узгодження шарів здійснюється крок-за-кроком із не більш як одним імпортом за глобальний крок; для коректного таймінгу внутрішніх подій використано залишковий бюджет очікування.

Мета роботи – з’ясувати, наскільки двомасштабна схема відтворює часові профілі одношарового симулятора Гіллеспі на однакових мережах і параметрах, а також як параметр масштабу міжспільнотних подій T поводить для різних розмірів спільнот. Ми розглянули вісім сценаріїв, варіюючи кількість спільнот, їхній розмір і ваги міжспільнотних ребер. Для кожного сценарію виконано по 100 реплік для двох підходів; усередині кожної групи обиралася репрезентативна крива, як критерій вибору використано RMSE.

Експерименти показують неузгодженість двомасштабної моделі з одношаровим симулятором за таймінгом і формою кривих, та виявляють ключову чутливість: використання кількостей інфікованих і сприйнятливих у міжспільнотному терміні робить T непереносимим між масштабами (ранні перепади у малих мережах, недоімпорт у середніх, значний переімпорт у великих). Висунуто ідею для потенційної стабілізації поведінки T , для звуження його діапазону калібрування та покращити накладання кривих для всіх розглянутих конфігурацій.

Отримані результати показують, що моделювання за допомогою одношарового алгоритму Гіллеспі на статичній мережі має значні затримки у динаміці, оскільки імпорт інфекції може відбутися тільки через вузли які пов’язані з іншими спільнотами. Крім того, двомасштабний підхід зменшує кількість операцій, що робить його придатним для швидкого сценарного аналізу і підтримки управлінських рішень.

Ключові слова – моделювання епідемії, двомасштабне моделювання, спільнотна структура, алгоритм Гіллеспі, SI-процес, міжспільнотні передачі.

Постановка проблеми

Готовність до епідемій вимагає від моделей не лише передбачення загальної кількості випадків, а й здатності відповісти на практичні запитання управління ризиками. зокрема де й коли зросте навантаження на лікарні, які громади стають донорами та реципієнтами інфекції, які заходи дадуть

найбільший ефект за обмежених ресурсів. Для цього недостатньо усереднених оцінок – критичними є локальні сплески, часові вікна до піків і канали міжспільнотних передач, що здатні як загасити, так і розкрутити епідемію.

Другим викликом є динамічні та неповні дані. Інтенсивності передач змінюються під впливом мобільності, поведінкових зсувів і політик, тоді як спостереження запізнюються й містять шум. Отже, модель має бути одночасно:

1. достатньо виразною, щоб відобразити гетерогенність спільнот і часову мінливість процесів;
2. прозорою й відтворюваною для аудитів та сценарних порівнянь;
3. обчислювально “легкою”, щоб дозволяти сотні симуляцій для чутливісного аналізу й “what-if” політик.

Третій виклик – інтерпретованість. Керівникам потрібні не лише числа, а й пояснення механізмів: які саме спільноти “підпалюють” сусідів, через які канали відбуваються передачі, де знаходяться ключові вузли, вплив на які дає найбільший ефект. Тому поряд із часовими рядами потрібні карти та діаграми потоків (наприклад, Санкі-діаграми), що показують розподіл ризиків між громадами та допомагають обґрунтовувати цілеспрямовані дії.

У відповідь на ці виклики ця стаття (українська адаптація та продовження попередньої роботи авторів (Kuryliak & Emmerich, 2025)) розглядає двошарову (two-scale) модель, що поєднує точність мікрорівневої стохастики з масштабованістю макрорівневого опису міжспільнотних передач. На мікрорівні кожна спільнота моделюється окремою стохастичною підмоделлю. На макрорівні між спільнотами відстежуються лише події імпорту інфекції з інтенсивностями, що залежать від «за-разності» донора та «вразливості» реципієнта. Така декомпозиція різко скорочує число глобально оновлюваних каналів і наближує часову складність до лінійної за кількістю спільнот. У цій версії ми надаємо програмну реалізацію для мереж із явною спільнотною структурою, використовуємо інструменти візуалізації потоків заражень та перевіряємо узгодженість результатів із однорівневим симулятором Гіллеспі, описаним у наших попередніх роботах (Kuryliak et al., 2025).

Важливо, що структура реальних контактних мереж близька до безмасштабних. Розподіл ступенів має “хвіст влади”, а високо-зв’язні вузли (“хаби”) істотно впливають на динаміку (Barabási & Albert, 1999), (Newman, 2002). Модель Barabási–Albert (Barabási & Albert, 1999) з параметром *preferential attachment* $m = 3$ є корисним граничним випадком для стрес-тестів. Малі мережі можуть бути більш централізовані, але це неможливо для великих мереж, оскільки люди мають обмежену кількість корисних контактів, а також через географічну віддаленість, тому тут буде багато зв’язків всередині спільнот і менш сильні зв’язки між спільнотами. Для наших експериментів використано $m = 3$ як “централізований” сценарій, тоді як для емпіричних соціальних/контактних мереж типові значення нижчі (орієнтовно $m \approx 2 - 4$, залежно від вибірки й рівня агрегації) (Newman, 2002), (Pastor-Satorras & Vespignani, 2001). Це означає, що реальні системи, як правило, ще більше кластеризовані, а отже, частка подій між спільнотами є обмеженою.

Ілюстрацією слугує наведена Санкі-діаграма потоків заражень (Рис. 1). Ліва смуга подає спільноти-донори (експортери міжспільнотних подій), середня – спільноти-реципієнти на макрорівні, права – їхні внутрішні кількості інфікувань. Товщини стрічок відповідають інтенсивності каналів (зі стабілізуючим кореневим масштабуванням). Навіть у централізованій мережі типу Barabási–Albert видно, що близько половини усіх заражень припадає на міжспільнотні імпорти, тоді як решта генерується всередині самих спільнот. Це емпірично обґрунтовує вибір дворівневого підходу. Локальні інфекційні процеси доцільно моделювати точними мікро-підмоделями, а рідкісні міжспільнотні імпорти – компактним макроописом із синхронним кроком між шарами.

Таким чином, задача полягає у формалізації та реалізації двошарової моделі, яка зберігає мікрорівневу точність подій і водночас радикально зменшує глобальне навантаження за рахунок агрегованого опису міжспільнотних передач. Це відкриває шлях до швидких і багаторазових симуляцій на рівні цілих країн із коректним таймінгом, необхідним для порівняння сценаріїв втручання.

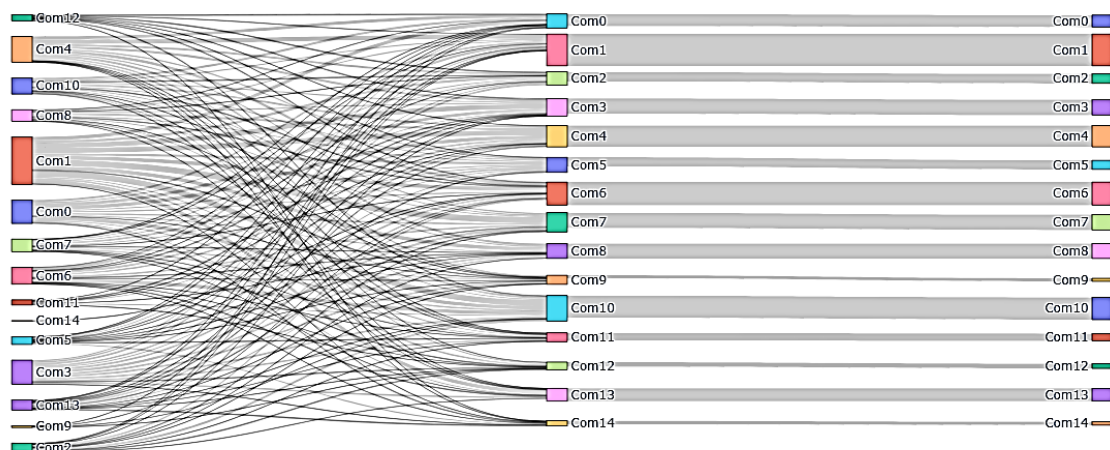


Рис. 1. Санкі діаграма потоків заражень між спільнотами

Аналіз останніх досліджень та публікацій

Багатомасштабне моделювання епідемій сформувалося на перетині двох ключових напрямів, зокрема метапопуляційних моделей та агент-орієнтованих симуляцій. Класичні праці заклали основу у вигляді мереж регіонів або міст, пов'язаних потоками мобільності, де внутрішньопопуляційна динаміка SIR поєднується з міжрегіональними передачами (Colizza & Vespignani, 2008). На цій базі було створено модель GLEaM (Global Epidemic and Mobility Model) та низку споріднених інструментів, що інтегрують авіаперельоти та маятникову міграцію у глобальному масштабі (Balcan et al., 2009).

Порівняльні дослідження показали як сильні, так і слабкі сторони двох головних парадигм – агент-орієнтованих симуляцій та структурованих метапопуляційних схем. Агент-орієнтовані моделі забезпечують високу деталізацію та коректний таймінг подій, але масштабуються вкрай погано. Метапопуляційні ж моделі добре пристосовані для великих систем, однак надто агрегують внутрішню динаміку спільнот, що знижує точність у прогнозах локальних процесів (Ajelli et al., 2010). Зокрема, у статті (Ajelli et al., 2010) використовується дискретно-часове моделювання переходів між спільнотами, що може вносити додаткові похибки у відтворення часових характеристик епідемічного процесу.

Окрема лінія робіт фокусується на високодетальних агент-орієнтованих симуляторах для національного рівня. Такі системи дозволяють явно моделювати інтервенції (локдауни, тестування, вакцинацію) та враховувати гетерогенність контактів на рівні індивідів, зберігаючи точність відтворення таймінгу інфікувань і одужань (Hoertel et al., 2020), (Kerr et al., 2021). Для зниження обчислювальної складності використовуються оптимізації та багаторівнева організація моделей, однак навіть у цьому разі симуляції залишаються дорогими для масштабних сценаріїв.

Паралельно розвивалися багатомасштабні підходи, які поєднують локальні агентні процеси зі структурою метапопуляційної мережі. Так, у роботі (Kou et al., 2021) пропонується схема, де мікрорівневі моделі “вбудовані” у макрорівневу структуру для оцінки ефективності як фармацевтичних, так і нефармацевтичних заходів. Недоліком таких підходів часто є відсутність чітких механізмів синхронізації між шарами, що призводить до неточностей у моменті міжспільнотних подій.

Ключовим елементом сучасних стохастичних методів є коректний таймінг подій за умов часозмінних інтенсивностей (поведінкові зміни, інтервенції, поява нових варіантів вірусу). Для цього використовують узагальнені варіанти алгоритму Гіллеспі на часових мережах (Non-homogeneous Gillespie), що базуються на інтегралі ризику для визначення часу наступної події (Vestergaard &

Génois, 2015). Проте більшість таких робіт застосовують цей апарат у межах одного рівня опису (суто мікро- або суто макромоделі), не забезпечуючи строгого узгодження між рівнями.

У попередній роботі авторів (Kuryliak et al., 2025) було показано ефективну СТМС-реалізацію мікрорівня для SIR-моделі на складних мережах, яка відтворює таймінг піків кількості інфікованих без використання наближень середнього поля. Це створює надійний мікрорівневий “двигун”, але сам по собі він не вирішує завдання ефективної координації між спільнотами і може бути застосованим для десятків чи сотень тисяч населення, що недостатньо для достовірного моделювання у масштабі країни.

У цьому контексті природним компромісом постає двошарова (мікро–макро) парадигма, яка дозволяє зберегти стохастичну точність усередині спільнот і водночас моделювати міжспільнотні інфекційні події як процеси неперервного часу з динамічними інтенсивностями, отриманими з мікрорівня. Саме така двошарова конструкція стає ключовим кроком до моделювання національних масштабів без втрати механістичної інтерпретованості та придатності до сценарного аналізу.

Формулювання цілі статті

Метою цієї роботи є реалізація найпростішої версії двошарової моделі епідемічного моделювання, уперше представленої у статті (Kuryliak & Emmerich, 2025), та перевірка її коректності шляхом порівняння з класичним алгоритмом Гіллеспі (Kuryliak et al., 2025). Запропонована рамка поєднує мікропідмоделі з точною стохастичною динамікою всередині спільнот та макропідмоделі з подіями між спільнотами, що описуються як нестационарний процес у неперервному часі з інтегралом ризику.

Завдання дослідження:

- Реалізувати першу версію двошарової моделі зі строгою синхронізацією мікро- та макропідмоделей у режимі “синхронного кроку”;
- Використати правило інтегралу ризику для моделювання часу макроподій за змінних інтенсивностей міжспільнотних заражень;
- Розробити механізм залишкового бюджету, який забезпечує коректний облік імпорту інфекції навіть у випадках, коли мікропідмоделі уже “очікує” на власну подію.

Критерії успіху:

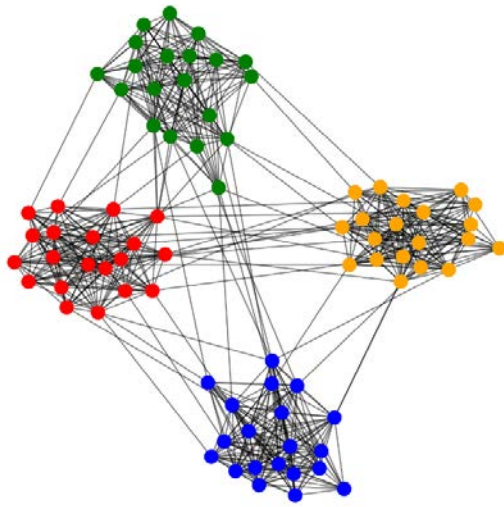
- Точність, що передбачає відтворення висоти та часу піків поширення хвороби, а також загальної динаміки епідемії порівняно з одношаровим агентним симулятором Гіллеспі на мережах середнього розміру;
- Ефективність, яка забезпечує зменшення обчислювальної складності та потреб у пам’яті при зростанні числа спільнот;
- Масштабованість, що реалізує здатність запускати сотні прогонів для сценарного та чутливісного аналізу.

Таким чином, стаття є наступним кроком після концептуальної роботи (Kuryliak & Emmerich, 2025) і вперше демонструє практичну реалізацію двошарової моделі з порівнянням її результатів із класичним одношаровим симулятором.

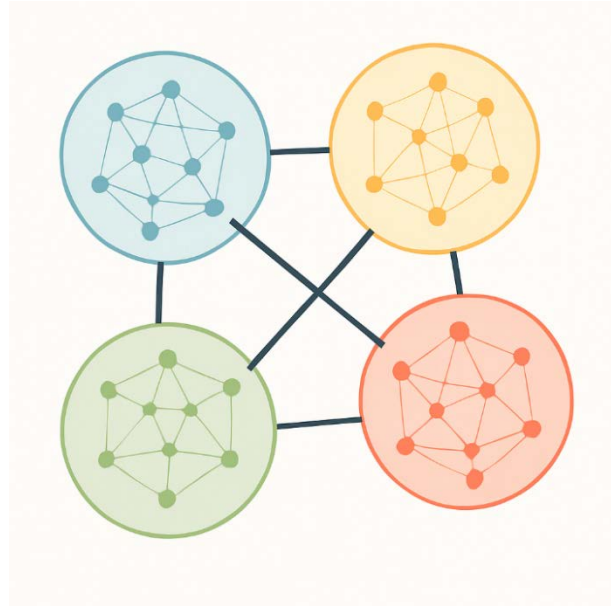
Виклад основного матеріалу

Архітектура мікро-макро моделі.

Система має два узгоджені шари (див. Рис. 2). На мікрорівні кожна спільнота – окрема підмоделі із власною стохастичною динамікою заражень та одужань на контактному графі цієї спільноти. На макрорівні ті самі спільноти згортаються у вузли метапопуляційної мережі, між якими відбуваються події імпорту інфекції – рідкісні перенесення випадків з однієї спільноти до іншої. Макрошар не бачить внутрішньої топології. Для нього кожен вузол – це агрегований стан; натомість мікро-підмоделі не знають глобальної мережі, окрім фактів імпорту інфекції.



(а) Однорівнева мережа



(б) Дворівнева мережа

Рис. 2. Перетворення однорівневої мережі до дворівневої за допомогою визначення спільнот (вузли спільноти позначено окремим кольором)

Взаємодія між мікро та макро рівнями. Щоб шари взаємодіяли, кожна спільнота на виході мікро-підмоделі передає дві прості величини - здатність спільноти i інфікувати C_i та здатність заразитися S_i . Це компактно представлення замінює складні розподіли станів усередині спільноти й водночас достатнє, щоб макрошар оцінював поточну “заразність” вузла-донора (C_i) та “вразливість” вузла-реципієнта (S_j). Рішення про імпорт інфекції на макрорівні ухвалюються лише за C_i , S_j та інтенсивністю контактів між вузлами мережі.

Крок синхронізації τ . Еволюція двошарової системи йде узгодженими мікрокроками часу τ . Наприкінці кожного кроку мікро-підмоделі оновлюють свої стани та публікують свіжі C_i і S_i ; макрошар негайно перераховує інтенсивності можливих імпортів інфекції та інтегрує накопичений ризик. Щойно на макрорівні визріває одна подія імпорту, вона повертається у відповідну мікро-підмоделі як додатковий інфікований у конкретній спільноті, після чого обидва шари синхронно переходять до наступного кроку. Такий “крок у крок” режим гарантує узгодженість таймінгу та причинності.

Залишковий бюджет очікування (residual budget). Мікрорівень планує час наступної внутрішньої події за власною динамікою. Якщо до цієї миті з макрорівня надходить імпорт інфекції, мікрогодинник не обнуляється, використовується залишковий бюджет очікування. Інтуїтивно частину очікування, що вже минула до моменту імпорту, віднімають, і внутрішня подія переноситься на пізніше відповідно до нових інтенсивностей після імпорту. Такий підхід уникає часових зсувів і коректно поєднує два незалежні джерела подій – локальні та зовнішні.

Макрорівень: формалізація міжспільнотних передач

Маяінг і розмірності. Нехай у спільноті i поточні кількості станів – це $I_i(t)$, $S_i(t)$, $R_i(t)$, а розмір спільноти – N_i . На цьому етапі визначимо заразність та сприйнятливість спільнот за наступними формулами:

$$C_i(t) = I_i(t), \quad \sigma(t) = S_i(t).$$

Подальші формули макрорівня виражаються через ці кількості та інтенсивності між-спільнотних контактів.

Інтенсивності. Міжспільнотна подія імпорту інфекції зі спільноти i у спільноту j (де $i \neq j$) описується інтенсивністю події

$$\lambda_{ij}(t) = \beta * m_{ij} * C_i(t) * \sigma_j(t) * T, \quad i \neq j, \quad m_{ii} = 0.$$

де m_{ij} – ефективна інтенсивність контактів між $i \rightarrow j$ (од./час); $\beta \in (0,1]$ – імовірність передачі на ефективний контакт; i, j – номери спільнот. Сумарна інтенсивність ризику на мережі:

$$\Theta(t) = \sum_{i \neq j} \lambda_{ij}(t).$$

За фіксованих $C_i(t)$ та $\sigma_j(t)$ величина $\Theta(t)$ має розмірність “події за одиницю часу”.

Час події (накопичений ризик). Накопичений ризик для міжспільнотних подій на інтервалі $[t_0, t]$:

$$H(t) = \int_{t_0}^t \Theta(s) ds.$$

Відповідно до класичного алгоритму Гіллеспі, час до наступної макроподії визначається правилом за накопиченим ризиком: згенерувати $U \sim \text{Uniform}(0,1)$, покласти $E = -\ln U$ і знайти мінімальний $t^* > t_0$, що задовольняє

$$H(t^*) = E.$$

Імовірність відсутності події до часу t дорівнює $P\{T_{\text{event}} > t\} = \exp(-H(t))$.

Дискретизація за τ і інтерполяція. Нехай макрорівень оновлюється на часовій сітці $t_k = t_0 + k * \tau$. На кожному кроці обчислюємо

$$H_{k+1} = H_k + \Theta\left(t_k + \frac{\tau}{2}\right)\tau, \quad t_{k+1} = t_k + \tau,$$

де τ – крок інтегрування.

Якщо $H_{k+1} \geq E$, то подія лежить усередині інтервалу $[t_k, t_{k+1}]$, а точний час

$$t^* = t_k + (E - H_k) / \Theta\left(t_k + \frac{\tau}{2}\right).$$

Глобальна похибка такого інтегрування – $O(\tau^2)$. Рекомендація стабільності: тримати $\Theta(t) * \tau \leq 0.1$ (щоб імовірність “перестрибнути” подію за один крок була малою).

Вибір ребра в t^* (кумулятивний відбір) У момент t^* вибір пари (i, j) відбувається пропорційно миттєвим інтенсивностям $\{\lambda_{ij}(t^*)\}$.

Алгоритм:

- 1) Обчислити $\Theta_{t^*} = \sum_{i \neq j} \lambda_{ij}(t^*)$.
- 2) Згенерувати $U \sim U(0,1)$ і покласти $T = U * \Theta_{t^*}$.
- 3) Ітерувати впорядковані пари (i, j) , акумулюючи суму $S \leftarrow S + \lambda_{ij}(t^*)$; перша пара, для якої $S \geq T$, і є вибраною.
- 4) Здійснити імпорт інфекції у j , встановити $t_0 \leftarrow t^*$, згенерувати новий бюджет $E' = -\ln U'$ і продовжити інтегрування.

Перевірки коректності:

Монотонність $H(t)$ передбачає, що $H(t)$ невід’ємний і неспадний; подія виникає рівно тоді, коли $H(t)$ досягає бюджету E .

Нуль подій при $\Theta(t) = 0$, якщо $\Theta(t) \equiv 0$ на інтервалі, то $H(t)$ сталий і подій немає.

Неможливість імпорту, коли $\sigma_j(t^*) = 0$. Якщо в момент t^* $\sigma_j(t^*) = 0$, то $\lambda_{ij}(t^*) = 0$ для всіх i , отже імпорт інфекції у j неможливий.

Після події у j на мікрорівні виконується $S_j \rightarrow S_j - 1, I_j \rightarrow I_j + 1$ (за наявності сприйнятливої); макрорівень оновлює всі інтенсивності, бо змінились $C_i(t)$ та $\sigma_j(t)$.

Мікрорівень: локальна СТМС-підмодель

Події й інтенсивності. Розглядаємо спільноту з контактним графом $G_i = (V_i, E_i)$, $N_i = |V_i|$. У час t вузли поділено на множини $S(t)$, $I(t)$, $R(t)$; записом $S(t)$, $I(t)$, $R(t)$ позначаємо також їх потужності.

Інфекція по SI-ребрах вказує, що кожне ребро $(u, v) \in E_i$ з $u \in I(t)$, $v \in S(t)$ породжує подію $v: S \rightarrow I$ зі ставкою β_{micro} . Сукупна інтенсивність події інфікування

$$a_1(t) = \beta_{\text{micro}} * E_{SI}(t).$$

де $E_{SI}(t)$ – кількість SI-ребер у графі на час t (для повного графа K_{N_i} маємо рівність

$$E_{SI}(t) = S(t) * I(t).$$

Одужання: кожен $u \in I(t)$ одужує зі ставкою γ , сукупно

$$a_2(t) = \gamma * I(t).$$

Внутрішня інтенсивність ризику між подіями стала:

$$\Theta_{\text{int}}(t) = a_1(t) + a_2(t).$$

Третій канал – імпорт інфекції $S \rightarrow I$ – не має власної черги очікування на мікрорівні: він спрацьовує миттєво тоді, коли макрорівень згенерував відповідну подію для цієї спільноти.

Залишковий бюджет очікування. Імпорт інфекції відбувається незалежно від процесів всередині спільноти, і має суттєвий вплив на подальшу динаміку процесів. Щоб синхронізувати динаміку обох рівнів вводимо поняття залишкового бюджету очікування і виконуємо перерахунки пропорційно після кожного імпорту.

Нехай останній перерахунок відбувся в t_0 , згенеровано бюджет

$$E = -\ln U, \quad U \sim U(0,1),$$

а $\Theta_{\text{int}}(t) \equiv \Theta_{\text{int}}(t_0)$ стала доти, доки не станеться внутрішня подія або імпорт. Тоді номінальний час до найближчої внутрішньої події

$$\Delta t_{\text{int}} = E / \Theta_{\text{int}}(t_0).$$

Позначимо час до найближчого імпорту через

$$\delta = \bar{T} - t_0,$$

де $\bar{T}$ – згенерований час імпорту, t_0 – час останнього зараження в симульованій спільноті.

Маємо два випадки:

1) Якщо $\delta > \Delta t_{\text{int}}$, першою відбувається внутрішня подія у

$$t^* = t_0 + \Delta t_{\text{int}},$$

оновлюємо стан ($S \rightarrow S - 1$, $I \rightarrow I + 1$ для інфекції або $I \rightarrow I - 1$, $R \rightarrow R + 1$ для одужання), покладаємо $t_0 \leftarrow t^*$, тягнемо новий $E' = -\ln U'$ і повторюємо.

2) Якщо $\delta \leq \Delta t_{\text{int}}$, раніше настає імпорт у $\bar{T} = t_0 + \delta$. Тоді застосовуємо залишковий бюджет очікування

$$E_{\text{res}} = E - \Theta_{\text{int}}(t_0) * \delta,$$

виконуємо $S \rightarrow S - 1$, $I \rightarrow I + 1$, перераховуємо внутрішні інтенсивності подій (нове Θ'_{int}), і ставимо

$$\Delta t_{\text{after}} = E_{\text{res}} / \Theta'_{\text{int}}, \quad t_0 \leftarrow \bar{T}.$$

Якщо наступний імпорт настає знов раніше за $t_0 + \Delta t_{\text{after}}$, процедура повторюється з послідовним зменшенням бюджету. Крайовий випадок свідчить, що якщо $\Theta_{\text{int}}(t_0) = 0$, внутрішніх подій не буде до наступного імпорту.

Ефективність та складність алгоритму

Обчислювальна модель класичного підходу. Класичний алгоритм Гіллеспі для повної мережі враховує всі інфекційні події на ребрах глобально. Складність на крок визначається числом ребер E_{tot} , а пам'ять – глобальними структурами для всіх SI -ребер. Це створює обмеження для симуляцій із сотнями тисяч або мільйонами вузлів.

Поділ на мікро- та макрорівень. У two-scale моделі більшість роботи переноситься на локальні спільноти. Кожна спільнота підтримує лише власні SI -структури E_i , а міжспільнотні події описуються компактною макромережею з E_{inter} ребрами. Таким чином, глобальна складність на крок:

$$T_{step} = O\left(\sum_{i=1}^M I_i \langle k_i \rangle + E_{inter}\right).$$

Очікуване число макроподій. Міжспільнотні події – це рідкісні імпорти. Їхня кількість задається інтегралом інтенсивності:

$$E[N_{macro}(T)] = \int_0^T \Theta(t) dt$$

де $\Theta(t) = \sum_{i \neq j} \lambda_{ij}(t)$. Це число значно менше від загального числа мікроподій (інфекцій і одужань), що зменшує частоту макрооновлень.

Порівняння з класичним Гіллеспі:

Класичний Гіллеспі $O(E_{tot})$ на крок, велика пам'ять, події – глобальні.

Two-scale $O(\sum E_i + E_{inter})$, пам'ять – локальна, макроподії рідкісні.

Для великих кластерних мереж, де $E_{inter} \ll E_{tot}$, виграш сягатиме декількох порядків.

Макрорівень додає лише невеликий наклад, тоді як основні витрати ізольовані у незалежних мікропідмоделях.

Паралелізація. Мікро-підмоделі різних спільнот незалежні між собою між макро-подіями, тому їх легко виконувати паралельно (потокі або ядра). Макро-подія перериває лише ту підмодель, у яку надійшов імпорт інфекції; решта продовжують роботу без блокувань. На практиці це дає майже лінійне прискорення за числом обчислювальних ресурсів до межі, де домінує вартість макрооновлень.

Практичний виграш. Якщо пам'ять не є великою проблемою і подання навіть великих мереж можливе у форматі списку суміжності і збільшується лінійно зі збільшенням мережі, то час збільшується квадратично і моделювання на великих мережах є справжнім викликом.

Теоретично, у мережах із 10^5 – 10^6 вузлів двошаровий підхід дозволяє знизити час симуляції у 10–100 разів порівняно з одношаровим Гіллеспі, зберігаючи коректний таймінг подій. Це робить можливим симуляції на рівні країни із сотнями сценаріїв. На практиці це значення може варіюватися, зважаючи на прийняті рішення під час програмної реалізації, паралелізацію, обрані методи підрахунків для збору статистики та інші фактори.

Опис контактної мережі

У дворівневій моделі макрорівень сприймає кожну спільноту лише через агреговані частки станів $C_i(t) = I_i(t)$ та $\sigma_i(t) = S_i(t)$, тоді як внутрішня топологія не доступна. Подія імпорту на цьому рівні інтерпретується як поява одного додаткового інфікованого у спільноті j . На мікрорівні, навпаки, модель відпрацьовує повну стохастичну динаміку на графі спільноти, але не має знань про глобальну структуру мережі. Така асиметрія накладає обмеження, у одношаровому SSA-симуляторі подія можлива лише за наявності сприйнятливої серед “місткових” вузлів, тоді як у макроописі ця перевірка відсутня. Для узгодження імпорт реалізовано лише за умови, що кінцева вершина міжспільнотного ребра справді перебуває у стані S , що робить результати коректними навіть у малих системах.

Щоб уникнути впливу різної центральності вузлів, внутрішню структуру спільнот стандартизовано як повний граф K_n . У цьому випадку кількість SI-ребер дорівнює точно $S(t) \cdot I(t)$, тому очікувана інтенсивність імпорту залишається $\lambda_{ij}(t) = \beta m_{ij} C_i(t) S_j(t)$ і узгоджується з реальною мікродинамікою. Такий вибір знімає вплив топології і дозволяє чисто оцінювати коректність таймінгу міжшарових подій.

Міжспільнотні зв'язки побудовано за схемою “хаб–спиці”. Усередині кожної спільноти діє повний граф K_n , а між “хабом” та кожною “спицею” встановлено k незалежних контактів. На макрорівні ці контакти агрегуються у вагу $m_{ij} = k r$, де r – ефективна швидкість контакту. У такій конструкції очікуване число “перехресних” SI-ребер між i та j є пропорційним $k C_i(t) S_j(t)$, що забезпечує узгодженість двох рівнів.

Вибір повних графів K_n і схеми “хаб–спиці” має два ключові обмеження. По-перше, відсутні ефекти внутрішньої гетерогенності (ступеневий розподіл, кластери), які є типовими для реальних контактних мереж, але цього достатньо для порівняння алгоритмів SSA. По-друге, у макроописі подія імпорту априорі можлива завжди, тоді як у одношаровому SSA вона блокується, якщо всі місткові вузли вже інфіковані. Хоча ця різниця компенсується перевіркою наявності сприйнятливих вузлів при імпорті, вона залишається важливим фактором для інтерпретації результатів. З іншої сторони, випадкові зараження можуть бути більш реалістичними, оскільки контактні мережі є динамічними, тому такі припущення є темою для майбутніх дискусій. У наступних етапах планується поступово ускладнювати внутрішню структуру (гетерогенний степінь, багаторівневі блокові моделі), але базові принципи синхронізації та агрегування залишаються незмінними.

Моделювання та експериментальні результати

У цьому розділі описана перевірка подібності наскільки двошаровий SSA (мікро–макро) відтворює траєкторії одношарового SSA на однакових мережах і параметрах. Усередині спільнот використовуємо найпростішу SI-динаміку (щоб виключити додаткові стохастичні джерела похибок), коефіцієнт передачі $\beta = 0.01$ фіксований і однаковий як на мікро-, так і на макрорівні і незмінним у часі. Єдина мета оцінювання – візуальна та якісна узгодженість тимчасових профілів інфікувань між двома підходами.

Налаштування моделі:

Часова одиниця – 1 умовний день, узгоджений на обох рівнях.

Початкові умови – у кожній з мереж інфіковано 1 індивіда.

Внутрішня топологія передбачає, що у кожній спільноті повний граф K_n (для усунення впливу внутрішньої гетерогенності).

Міжспільнотні контакти – неорієнтовані ребра з вагами w_{ij}

Сценарії. (див. Рис. 3, панелі А–Ж). Варіюємо чотири чинники – кількість спільнот, розмір спільноти, вагу міжспільнотних ребер w , параметр T .

А) Малі спільноти (2×5), $T = 1$, $m = 2$

Б) Малі спільноти (2×5), $T = 0.2$, $m = 2$

В) Малі спільноти (2×5), $T = 0.03$, $m = 2$

Г) Малі спільноти (2×5), $T = 0.01$, $m = 2$

Д) Малі спільноти (5×5), $T = 0.001$, $m = 5$

Е) Середні спільноти (5×10), $T = 0.001$, $m = 5$

Є) Великі спільноти (5×50), $T = 0.001$, $m = 5$

Ж) Дуже великі спільноти (5×100), $T = 0.001$, $m = 5$

Протокол симуляцій. Для кожного сценарію виконуємо по 100 незалежних прогонів двох підходів (двошаровий і одношаровий SSA). Усередині кожної групи обираємо репрезентативну траєкторію як таку, що мінімізує RMSE відносно середньої кривої своєї групи. Порівняння виконуємо на спільній часовій сітці, візуально оцінюючи узгодженість таймінгу та форми. Як верхню та нижню статистичні межі використаємо квантілі Q1 та Q3 (замальована відповідним кольором зона).

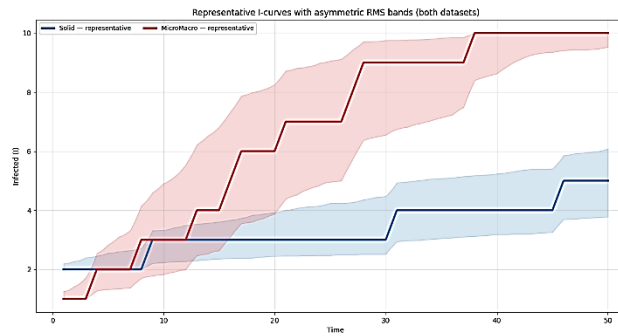
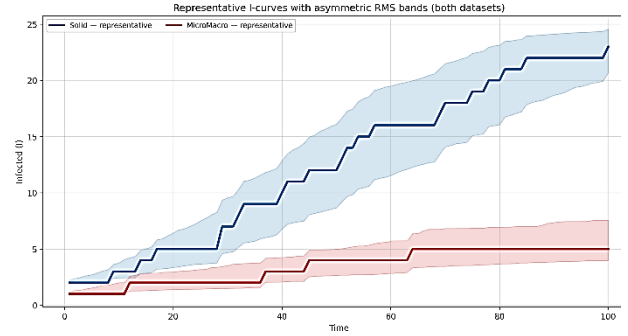
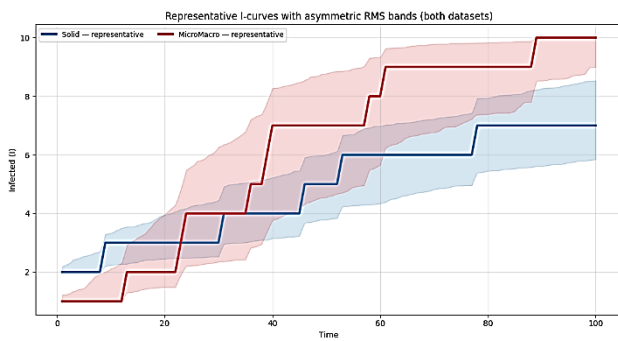
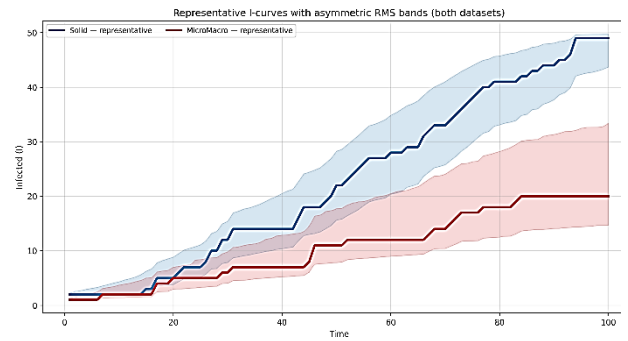
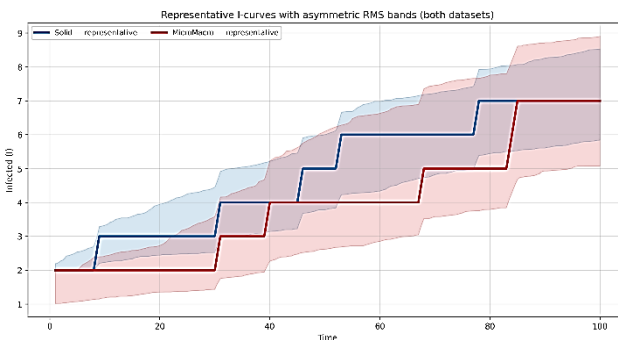
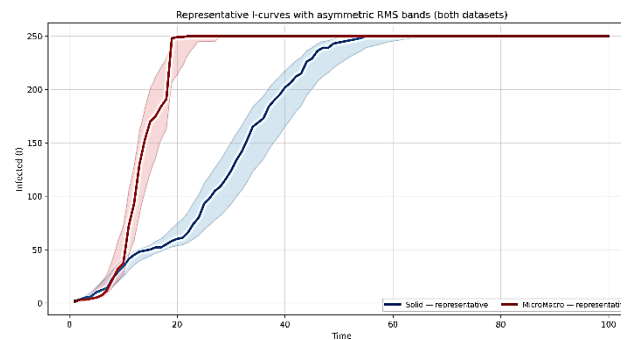
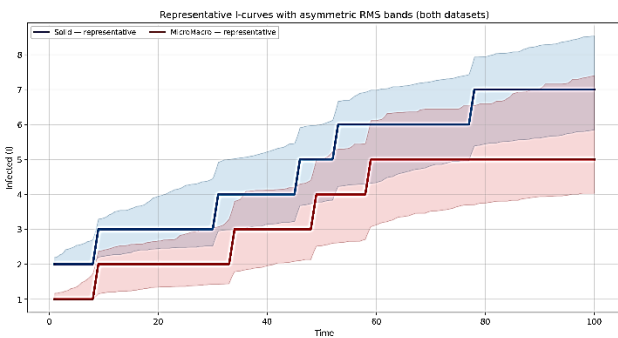
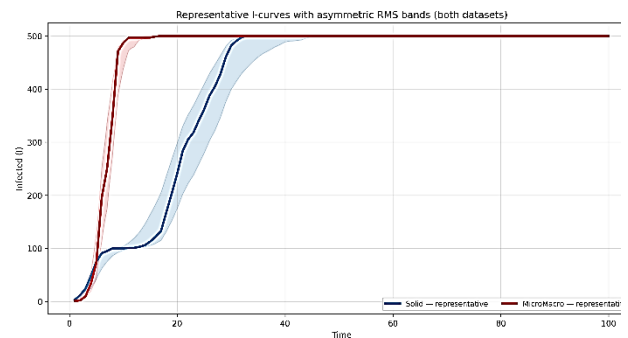
а) Малі спільноти (2×5), $T = 1$, $m = 2$ д) Малі спільноти (5×5), $T = 0.001$, $m = 5$ б) Малі спільноти (2×5), $T = 0.2$, $m = 2$ е) Середні спільноти (5×10), $T = 0.001$, $m = 5$ в) Малі спільноти (2×5), $T = 0.03$, $m = 2$ є) Великі спільноти (5×50), $T = 0.001$, $m = 5$ г) Малі спільноти (2×5), $T = 0.01$, $m = 2$ ж) Дуже великі спільноти (5×100), $T = 0.001$, $w = 5$

Рис.3 Порівняння двошарової та одношарової моделі SSA для різних конфігурацій мереж (варіювання кількості спільнот та вузлів у кожній з спільнот $m \times n$ відповідно, кількість зв'язків між спільнотами w , конфігураційного коефіцієнта T). Червона лінія відображає двошарову модель SSA, синя – одношарову модель SSA.

Результати: якісне узгодження та роль параметра T .

Малі спільноти (2×5 , панелі А–Д). За великих значень T (А: $T = 1$, Б: $T = 0.2$) двошарова траєкторія систематично випереджає одношаровий SSA. Імporti на макрорівні виникають занадто рано, що видно як лівий зсув червоної кривої та ширші асиметричні смуги невизначеності. За $T = 0.03$ (В) спостерігаємо найкраще накладання репрезентативних кривих. Часові “сходінки” (перехід на $I + 1$) майже синхронні з еталоном. Подальше зменшення до $T = 0.01$ (Г) уже призводить до запізнення – імпорт надто приглушений. Для масштабу 2×5 існує “робоча зона” T поблизу 0.03; трохи вище – ранні перепали, трохи нижче – недоімпорт.

Середні розміри (5×5 і 5×10 , панелі Е). За фіксованих $m = 5$ та $T = 0.001$ двошарова модель недооцінює міжспільнотні передачі. Червоні криві нижчі й повільніші за сині. Це свідчить, що $T = 0.001$ є замалим для цих масштабів і не відтворює фактичну інтенсивність імпорту, яку продукує одношаровий SSA на тих самих мережах.

Великі розміри (5×50 та 5×100 , панелі Є–Ж). За тих самих $m = 5, T = 0.001$ поведінка змінюється. Для 5×50 (Є) двошарова модель перепередбачає – різкий ранній фронт і швидке насичення. Для 5×100 (Ж) обидві моделі демонструють дуже швидке зростання і близькі плато, хоча старт у двошаровій трохи раніший. Отже, константа T , яка була “замалою” для 5×5 – 5×10 , виявляється “завеликою” для 5×50 – 5×100 у відносному сенсі.

Конфігурація константи T . Емпірично бачимо, що одна й та сама константа T не переноситься між масштабами спільнот. Для малих мереж вона спричиняє ранні й надмірні імпорти, для середніх – недоімпорт, а для великих – знову значний переімпорт. Це природно впливає з того, що в поточній (ненормованій) формулі міжспільнотна інтенсивність пропорційна добутку кількості вузлів відповідних спільнот у станах $I_i(t) S_j(t)$, який зростає як $O(N_i N_j)$ зі збільшенням розмірів спільнот. Практично це означає, що T виконує роль узгоджувального параметра, який потрібно калібрувати з урахуванням масштабу мережі та структури w_{ij} . Крім того, видно що навіть відстаючи на початку, двомасштабний SSA інфікує значно більше індивідів у майбутньому. на рисунках (Є, Ж) чітко видно злами динаміки процесу зараження. Ймовірно, це пов’язано з швидким зараженням вузлів всередині спільноти для одношаровий SSA і важкому виході за її межі, оскільки кількість міжспільнотних заражень обмежується кількістю місткових вузлів. У двомасштабній моделі ця проблема відсутня і можна заражати будь кого з спільноти. Ця розбіжність збільшується зі збільшенням розміру мережі.

Попередня (ненормована) форма:

$$\lambda_{ij}(t) = \beta m_{ij} I_i(t) S_j(t) T.$$

Щоб зробити параметр T стабільнішим і зменшити потребу в перекалібруванні між сценаріями, слід перейти від “кількостей” до “фракцій” (часток станів). Визначимо частки заразності та сприйнятливості як $C_i(t) = \frac{I_i(t)}{N_i}$ та $\sigma_j(t) = \frac{S_j(t)}{N_j}$ відповідно, врахувавши розміри спільнот. Запишемо масштабно-узгоджену (нормовану) форму, що працює з фракціями:

$$\lambda_{ij}(t) = \beta m_{ij} C_i(t) \sigma_j(t) T = \beta m_{ij} \frac{I_i(t) S_j(t)}{N_i N_j} T.$$

У такій формі добуток $C_i(t) \sigma_j(t) \in [0,1]$ не залежить від абсолютних розмірів спільнот, а T стає значно стабільнішим між конфігураціями; відмінності в імпортах визначаються вагами каналів m_{ij} та реальними частками інфікованих/сприйнятливих, а не масштабом мережі.

Висновки

У статті ми узагальнили й експериментально підтвердили працездатність уже представленій в попередній роботі (Kuryliak & Emmerich, 2025) двомасштабної (мікро–макро) моделі поширення на мережах із явною спільнотною структурою. На мікрорівні модель зберігає точний стохастичний

таймінг подій з фіксованим коефіцієнтом передачі. На макрорівні міжспільнотні імпорти подаються як процес неперервного часу з інтенсивностями, що залежать від “заразності” донора, “вразливості” реципієнта та ваг міжспільнотних зв’язків. У цій роботі ми надали програмну реалізацію для мереж із явною спільнотною структурою, провели систематичне порівняння з одношаровим SSA та відпрацювали процедури синхронізації між шарами (у т.ч. залишковий бюджет очікування).

Переваги двомасштабного підходу, підтверджені експериментами: (i) збереження локальної стохастичності та коректного таймінгу на мікрорівні; (ii) керована й інтерпретована агрегація міжспільнотних передач на макрорівні; (iii) обчислювальна придатність для багаторазових прогонів і сценарного аналізу; (iv) прозорість калібрування за рахунок розділення “внутрішньої” та “зовнішньої” динамік.

Емпірично виявлено ключову чутливість, яка полягає в тому, що параметр масштабу міжспільнотних подій T не переноситься між різними розмірами спільнот, якщо міжспільнотну інтенсивність задавати через кількості $I_i(t)S_j(t)$. Одна й та сама T дає ранні перепали в малих мережах, недоімпорт у середніх і різкий ріст заражень у великих. Причина – масштабування добутку $I_i S_j$ як $O(N_i N_j)$ і відсутність у макрорівні явного обмеження містковою “ємністю”, яке присутнє у одношаровому SSA. Практичне вирішення – перейти від кількостей до фракцій (часток станів) і використовувати масштабно-узгоджену форму, де $C_i(t) = I_i(t)/N_i$, $s_j(t) = S_j(t)/N_j$. Така нормалізація усуває залежність від $N_i N_j$, звужує “робочий” діапазон T і робить його стабільним між сценаріями. Експерименти на наборах (А–Ж) показують, що саме нормована форма краще узгоджується з одношаровим SSA за таймінгом і профілями інфікувань; при цьому RMSE ми використовували лише для вибору репрезентативної траєкторії всередині набору прогонів, а не як метрику подібності між моделями.

Змістовна відмінність між підходами також пояснює спостережувані “злами” динаміки у великих мережах. Одношаровий SSA обмежує імпорт “містковими” кінцями, тоді як двомасштабний макрорівень без додаткових обмежень здатен імпортувати в будь-який сприйнятливий вузол реципієнта. Припускаємо, що перехід до фракцій істотно зменшить це розрив.

Щоб ізолювати вплив міжспільнотного терміна, ми свідомо фіксували SI-динаміку та використовували повні графи K_n у спільнотах. Один імпорт за крок на глобальній шкалі часу забезпечував прозоре порівняння з одношаровим SSA. Це зменшує роль внутрішньої гетерогенності та не моделює місткову “ємність” явно, але достатньо для перевірки коректності міжшарового узгодження, без врахування похибок спричинених топологією мережі. Крім того, припускаємо що у реальних спільнотах вузли не є строго містковими або є строго не містковими, і мають контакти з іншими спільнотами в динаміці з певною ймовірністю. Двомасштабна модель SSA усуває цю неточність і може відтворювати динаміки поширення захворювання навіть більш реалістично ніж одношаровий SSA для статичної мережі.

Напрями подальшої роботи полягають у розширенні мікродинаміки до багатостанових моделей, врахуванні часово-змінних параметрів і реалістичної гетерогенності контактних мереж. Планується побудова мережі схожої на реальні контакти між містами на основі даних про мобільність осіб, калібрування ваг зв’язків на основі мобільних/контактних даних та валідація на часових рядах для певних мереж.

Крім того, гарною ідеєю є моделювання епідемії на мережі тваринних ферм, оскільки контактів між ними не багато, топологія мережі всередині ферми (спільноти) є менш важливою, оскільки тварини перебувають і скупченні, а також, ферм у країні не є багато і епідемія триває доволі короткий період часу.

Декларація про використання штучного інтелекту. Один з авторів (Юліан Куриляк) використовував ChatGPT для допомоги у формулюванні і редагуванні тексту. Усі ідеї, результати та висновки належать авторам.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

- Kuryliak, Y., & Emmerich, M. (2025). Towards complexity reduction of large-scale epidemic simulation in two-scale networks. In Proceedings of MoMLet 2025. CEUR Workshop Proceedings (CEUR-WS.org).

- Kuryliak, Y., Emmerich, M. T., & Dosyn, D. (2025). Simulating epidemic peak dynamics on complex networks using efficient Gillespie algorithms. *Infection, Genetics and Evolution*, Article 105768. <https://doi.org/10.1016/j.meegid.2025.105768>
- Barabási, A.-L., & Albert, R. (1999). Emergence of scaling in random networks. *Science*, 286(5439), 509–512. <https://doi.org/10.1126/science.286.5439.509>
- Newman, M. E. J. (2002). Spread of epidemic disease on networks. *Physical Review E*, 66(1), 016128. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.66.016128>
- Pastor-Satorras, R., & Vespignani, A. (2001). Epidemic spreading in scale-free networks. *Physical Review Letters*, 86(14), 3200–3203. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.86.3200>
- Colizza, V., & Vespignani, A. (2008). Epidemic modeling in metapopulation systems with heterogeneous coupling patterns: Theory and simulations. *Journal of Theoretical Biology*, 251(3), 450–467. <https://doi.org/10.1016/j.jtbi.2007.11.028>
- Balcan, D., Colizza, V., Gonçalves, B., Hu, H., Ramasco, J. J., & Vespignani, A. (2009). Multiscale mobility networks and the spatial spreading of infectious diseases. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 106(51), 21484–21489. <https://doi.org/10.1073/pnas.0906910106>
- Ajelli, M., Gonçalves, B., Balcan, D., Colizza, V., Hu, H., Ramasco, J. J., Merler, S., & Vespignani, A. (2010). Comparing large-scale computational approaches to epidemic modeling: Agent-based versus structured metapopulation models. *BMC Infectious Diseases*, 10, 190. <https://doi.org/10.1186/1471-2334-10-190>
- Hoertel, N., Blachier, M., Blanco, C., Olfson, M., Massetti, M., Sánchez Rico, M., Limosin, F., & Leleu, H. (2020). A stochastic agent-based model of the SARS-CoV-2 epidemic in France. *Nature Medicine*, 26, 1708–1713. <https://doi.org/10.1038/s41591-020-1001-6>
- Kerr, C. C., Stuart, R. M., Mistry, D., Abeysuriya, R. G., Rosenfeld, K., Hart, G. R., Núñez, R. C., Cohen, J. A., Selvaraj, P., Hagedorn, B., George, L., Jastrzębski, M., Izzo, A., Fowler, G., Palmer, A., Delpont, D., Scott, N., Kelly, S., Bennette, C. S., ... Klein, D. J. (2021). Covasim: An agent-based model of COVID-19 dynamics and interventions. *PLOS Computational Biology*, 17(7), e1009149. <https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1009149>
- Kou, L., Wang, X., Li, Y., Guo, X., & Zhang, H. (2021). A multi-scale agent-based model of infectious disease transmission to assess the impact of vaccination and non-pharmaceutical interventions: The COVID-19 case. *Journal of Safety Science and Resilience*, 2(4), 199–207. <https://doi.org/10.1016/j.jnlssr.2021.08.005>
- Vestergaard, C. L., & Génois, M. (2015). Temporal Gillespie algorithm: Fast simulation of contagion processes on time-varying networks. *PLOS Computational Biology*, 11(10), e1004579. <https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1004579>

TWO-SCALE EPIDEMIC SPREAD MODEL: COMPARISON TO SINGLE-LAYER GILLESPIE ALGORITHM

Yulian Kuryliak¹, Michael Emmerich²

¹ Lviv Polytechnic National University,

Department of Information Systems and Networks, Lviv, Ukraine

² University of Jyväskylä, Faculty of Information Technology, Jyväskylä, Finland

¹ E-mail: yulian.a.kuryliak@lpnu.ua, ORCID: 0000-0002-6600-2637

² E-mail: michael.t.m.emmerich@jyu.fi ORCID: 0000-0002-7342-2090

© Kuryliak Y., Emmerich M., 2025

This article is one in a series by the authors on epidemic outbreak modeling and presents a practical implementation and validation of a two-scale (micro–macro) scheme for simulating epidemic spread on networks with explicit community structure. At the micro level, each community is modeled by a stochastic SI process with a fixed transmission coefficient on a complete internal graph; at the macro level, communities are connected by rare import events whose intensities depend on the donor’s current “infectiousness,” the recipient’s “susceptibility,” and the weights of inter-community links. Layer

synchronization is performed step-by-step with no more than one import per global step; a residual waiting-time budget is used to ensure correct timing of internal events.

The goal is to assess how well the two-scale scheme reproduces the temporal profiles of a full Gillespie simulator on identical networks and parameters, and to examine how the inter-community scale parameter T behaves across different community sizes. We consider eight scenarios, varying the number of communities, community size, and inter-community edge weights. For each scenario we run 100 replications for both approaches; within each group a representative trajectory is selected using RMSE strictly as a curve-selection criterion.

The experiments show qualitative agreement between the two-scale model and the full simulator in timing and curve shape, yet reveal a key sensitivity: using raw counts of infected and susceptible individuals in the inter-community term makes T non-portable across scales (early overshoot in small networks, under-import in medium ones, pronounced over-import in large ones). We put forward an idea to stabilize the behavior of T , narrow its calibration range, and improve curve alignment across all configurations.

The results also indicate that full Gillespie simulation on a static network exhibits noticeable delays in cross-community spread, because import can occur only through nodes that actually bridge communities. In addition, the two-scale approach reduces the number of operations, making it suitable for rapid scenario analysis and decision support.

Keywords - epidemic modeling; two-scale modeling; community structure; Gillespie algorithm; SI process; inter-community transmission.