

DEMMo (user guide)

Designer of Epidemic Math Models

For version Demmo 0.0.3 beta

Podzolkov Pavel

1. Введение

DEMМо – программа-конструктор компартментальных эпидемиологических моделей. Программа разработана в рамках дипломной работы студента института биологии ТюмГУ Подзолкова Павла по специальности "Биоинженерия и Биоинформатика".

Программа предназначена для персонального использования. Программа находится на стадии тестирования. Просим присылать отчёты об ошибках, предложения по улучшению и другие комментарии на следующую почту: demmo.development@gmail.com

Исходный код программы доступен по ссылке: <https://github.com/Paul-NP/demmo.git>

1.1. Назначение

DEMМо позволяет конструировать [компартментальные](#) эпидемиологические модели различной сложности. Здесь аналогом компартментов являются стадии. Так для реализации простейшей модели SIR добавляются три стадии: S, I и R.

Сконструированную модель можно сохранить. По сконструированной модели DEMМо проводит симуляцию. По результатам симуляции формируется csv таблица, содержащая информацию об изменении значений каждой из стадий. Такие таблицы могут использоваться в научных целях для предсказания динамики эпидемий.

1.2. Быстрый старт

В папке DEMМо/models сохранены несколько готовых моделей. После их открытия достаточно нажать *Запустить модель* и появятся результаты модели в области *Результаты* (см. п. 4).

Далее опишем структуру данных моделей. Будут использованы термины, описанные в следующих разделах данного руководства.

SIR (классическая модель)

Стадии:

1. Название: S. Стартовое количество: 100.
2. Название: I. Стартовое количество: 1.
3. Название: R. Стартовое количество: 0.

Потоки:

1. Источник: S. Коэффициент: 0.04. Цели: I (1). Индуцирующие стадии: I (1).
2. Источник I. Коэффициент: 0.01. Цели R (1). Неиндуцированный.

Настройки модели:

1. Автоматическая остановка (настройки по умолчанию).
2. Деление на объём популяции индуцированных потоков.

SEIR (с инкубационным периодом)

Стадии:

1. Название: S. Стартовое количество: 100.
2. Название: E. Стартовое количество: 0.
3. Название: I. Стартовое количество: 1.
4. Название: R. Стартовое количество: 0.

Потоки:

1. Источник: S. Коэффициент: 0.04. Цели: E (1). Индуцирующие стадии: I (1).
2. Источник E. Коэффициент: 0.01. Цели I (1). Неиндуцированный.
3. Источник I. Коэффициент: 0.005. Цели R (1). Неиндуцированный.

Настройки модели:

3. Автоматическая остановка (настройки по умолчанию).
4. Деление на объём популяции индуцированных потоков.

SIR_season (с сезонными колебаниями)

Стадии:

1. Название: S. Стартовое количество: 100.
2. Название: I. Стартовое количество: 1.
3. Название: R. Стартовое количество: 0.

Потоки:

1. Источник: S. Коэффициент: динамический “а”. Цели: I (1). Индуцирующие стадии: I (1).
2. Источник I. Коэффициент: 0.001. Цели R (1). Неиндуцированный.

Динамические коэффициенты:

1. Название: “а”. Значения: 1:0, 200:0.01; 400:0; 600:0.01; 800:0; 1000:0.01; 1200:0; 1400:0.01.

Настройки модели:

1. Остановка через определённое число шагов (1400).
2. Деление на объём популяции индуцированных потоков.

SIR_bd (с рождаемостью и смертностью)

Стадии:

1. Название: S. Стартовое количество: 100.
2. Название: I. Стартовое количество: 1.
3. Название: R. Стартовое количество: 0.

Потоки:

1. Источник: S. Коэффициент: 0.04. Цели: I (1). Индуцирующие стадии: I (1).
2. Источник I. Коэффициент: 0.01. Цели R (1). Неиндуцированный.

Внешние потоки:

1. Стадия: S. Коэффициент: 0.0005. Относительно всей популяции. Направление: на вход.

2. Стадия: S. Коэффициент: 0.0005. Относительно данной стадии.
Направление: на выход.
3. Стадия: I. Коэффициент: 0.0005. Относительно данной стадии.
Направление: на выход.
4. Стадия: R. Коэффициент: 0.0005. Относительно данной стадии.
Направление: на выход.

Настройки модели:

1. Остановка через определённое число шагов (4000).
2. Деление на объём популяции индуцированных потоков.

2. Настройка DEMMo

Пользовательские настройки программы сохраняются в DEMMo/data/user_setting.ini. Для корректной работы программы не рекомендуется изменять файл настроек.

2.1. Настройка языка

Программа поддерживает различные локализации. Файлы локализаций расположены в DEMMo/locales/ с расширением *.ini. Присутствуют русская и английская версии. Для корректной работы программы не рекомендуется изменять файлы локализаций.

Возможно создание новых локализаций на основе имеющихся. Для этого необходимо создать новый файл *.ini, в котором все поля будут переведены на необходимый язык, с сохранением полей {*}. Просим присылать новые локализации на следующую почту: demmo.development@gmail.com

Изменение языка интерфейса

Параметры → Настройки → Пользовательские настройки → Язык интерфейса.

2.2. Настройка таблиц csv

DEMMo работает с csv таблицами для вывода результатов и их загрузки из других источников, для загрузки данных для динамических коэффициентов.

Настройки разделителя в таблицах

Рекомендуется «;» или «,».

Параметры → Настройки → Пользовательские настройки → Разделитель в таблицах данных (динамических факторов, результатов).

Включение/выключение строки заголовков в таблицах значений динамических факторов

Параметры → Настройки → Пользовательские настройки → Наличие заголовков в загружаемых таблицах динамических факторов.

2.3. Настройка отображения графиков

DEMMo поддерживает совместное отображения графиков нескольких результатов моделирования. Максимальное число совместно отображаемых графиков изменяемо, однако для адекватного восприятия не рекомендуется устанавливать значение больше 4. В таком случае DEMMo не сможет оптимизировать стили отображения линий для нормального восприятия.

Настройка максимального количества одновременно отображаемых результатов

Меню настройки → Настройки → Пользовательские настройки → Максимальное количество одновременно отображаемых результатов.

2.4. Сброс настроек

Сброс настроек устанавливает все пользовательские настройки и настройки модели на значения по умолчанию.

3. Моделирование

3.1. Создание/Открытие/Сохранение модели

Окно создания модели появляется при запуске программы. Или может быть открыто самостоятельно.

Создать новую модель

Меню файл → Новая модель → Заполнение полей → Создать.

Для создания модели необходимо указать название модели (не название файла) и папку, в которой будет храниться модель (по умолчанию DEMМо/models/).

Открыть существующую модель

Меню файл → Открыть модель.

Открыть недавнюю модель

Меню файл → Последние модели.

Сохранить модель

Меню файл → Сохранить как.

Меню файл → Сохранить.

Файл модели по умолчанию сохраняется в DEMМо/models/ и имеет расширение *.esm. Для корректной работы программы не рекомендуется изменять файлы моделей из других программ.

3.2. Стадии

Стадии в DEMМо являются аналогами компартментов в компартментальных эпидемиологических моделях.

Добавить стадию

Стадии → Добавить стадию.

Настроить стадию

Для настройки стадии необходимо указать её *Название* и *Стартовое количество особей*.

Название стадии будет использовано для настройки потоков и внешних потоков, а также в файле результатов моделирования.

Стартовое количество особей должно быть целым числом, обозначающим первоначальное значение данного компартмента, с которого начинается симуляция.

Номер стадии необходим для отладки модели после начала моделирования, в случае её некорректности.

Удаление стадии

Стадии → в разделе удаляемой стадии: “-”.

3.3. Потоки

Потоки обеспечивают переход определённого числа особей на каждом шаге из одной стадии в другую. Значение потока вычисляется из значения стадии источника, коэффициента и значений индуцирующих стадий, в случае индуцированности.

Добавить поток

Потоки → Добавить поток

Настроить поток

1. Выбрать источник потока: *Название источника*.

2. Выбрать какой будет коэффициент.

Коэффициент потока может быть динамическим (галочка на *Динамический коэффициент*). Такой коэффициент меняет своё значение в процессе симуляции. Либо коэффициент может быть статическим, тогда введённое значение будет постоянно учитываться в процессе симуляции.

Для динамического коэффициента: добавить динамический коэффициент (см. п. 3.5.), выбрать добавленный коэффициент: *Название динамического коэффициента*.

Для статического коэффициента указать значение коэффициента: *Значение статического коэффициента*.

На значение коэффициента действует ограничения. При снятой в настройках галочке *Делить значения индуцированных потоков на объём популяции* значение коэффициента должно быть меньше 1. Также сумма коэффициентов потоков, источниками которых является одна и та же стадия, должна быть меньше 1.

2. Добавление целей.

Поток может содержать несколько целей, для каждой из которых должна быть указана вероятность. Сумма вероятностей всех целей должна быть равна 1. Примером такого многоцелевого потока может являться заражение болезнью, которая имеет две формы. И например, в 10% индивидов заражаются одной формой, а 90% другой. В таком случае поток будет иметь две цели с вероятностями 0.1 и 0.9 соответственно.

Для добавления цели необходимо выбрать *Название цели* и указать *Вероятность цели* (≤ 1). Затем *Добавить*. Для удаления цели: выделить удаляемую строку и *Удалить*.

3. Указать индуцированность.

Индуцированный поток — это поток, на значение которого могут влиять значения различных стадий. Так переход от восприимчивых к инфицированным зависит от количества инфицированных, поэтому на значение этого потока будет влиять значение этой стадии на каждом шаге симуляции.

Для указания индуцированности поставить галочку *Индуцибельность*.

4. Добавление индуцирующих стадий.

Стадии, которые влияют на индуцированные потоки, называются индуцирующими. Для каждой индуцирующей стадии указывается её инфекционность, то есть то, с какой силой она влияет на поток. Так болезнь может иметь две формы, одна из которых более заразна. На значение заразности не накладываются ограничения, однако рекомендуется не указывать значения больше 1.

Для добавления индуцирующей стадии необходимо выбрать *Название стадии* и указать *Инфекционность стадии*. Затем *Добавить*. Для удаления индуцирующей стадии: выделить удаляемую строку и *Удалить*.

Удалить поток

Потоки → в разделе удаляемого потока: “-”.

3.4. Внешние потоки

Внешние потоки обеспечивают добавление/вычитание определённого числа особей к/из конкретной стадии на каждом шаге симуляции. С помощью внешних потоков возможна реализация рождаемости, смертности, миграции и т. д.

Добавить внешний поток

Внешние потоки → *Добавить внешний поток*

Настроить внешний поток

1. Выбрать стадию, к которой применяется внешний поток: *Стадия*.
2. Выбрать относительность/абсолютность внешнего потока.

Значение внешнего потока может высчитываться относительно всего объёма популяции, относительно только затрагиваемой стадии или может быть указана его абсолютная величина. Внешний поток относительно всей популяции может, например, обеспечить рождаемость, величина которой зависит от объёма популяции, однако, новорожденные индивиды попадают только в стадию восприимчивых. Смертность, в свою очередь, может обеспечиваться внешним потоком относительно только затрагиваемой стадии. Абсолютное значение внешнего потока может применяться в случае, когда его величина не должна зависеть от самой популяции. Такой ситуацией является, например, миграция.

Для выбора нужного режима внешнего потока необходимо отметить один вариант из списка: *Относительно данной стадии*, *Относительно всей популяции*, *Абсолютное значение*.

3. Выбрать какой будет коэффициент (см. п. 3.3 Настройки потока п.2).
4. Выбрать направление.

Внешние потоки могут быть двух направлений: “на вход” и “на выход”. Так, потоки “на вход” могут обеспечивать рождаемость или иммиграцию, а потоки “на выход” могут обеспечивать смертность и эмиграцию.

Для выбора нужного направления необходимо отметить один вариант из списка: *На вход*, *На выход*.

Удалить внешний поток

Внешние потоки → в разделе удаляемого внешнего потока: “-”.

3.5. Динамические коэффициенты

Динамический коэффициент – коэффициент, который меняет своё значение в процессе симуляции.

Добавить динамический коэффициент

Динамические коэффициенты → *Добавить динамический коэффициент.*

Настроить динамический коэффициент

1. Указать название: *Название коэффициента.*

Название коэффициента используется для его идентификации в потоках и внешних потоках.

2. Указать значение коэффициента.

Выбор значений коэффициента может быть осуществлён двумя способами.

Загрузка значений из csv таблица. Выбрать файл с таблицей: *Обзор*; загрузить данные из файла: *Загрузить*. Таблица должна содержать два столбца. В первом столбце целочисленные значения – номера шагов. Во втором столбце соответствующие этим шагам значения коэффициента.

Ручное заполнение. Указать шаг: *Шаг*; указать: *Значение на данном шаге*; добавить пару шаг значения: *Добавить*. Для удаления ненужной строки выбрать её и *Удалить*. Для очистки всех значений списка: *Очистить*.

Оба способа указания значений коэффициента должны содержать не меньше двух позиций. На шагах, не указанных в списке, значения коэффициента вычисляются автоматически (интерполируются).

Удалить динамический коэффициент

Динамические коэффициенты → в разделе удаляемого динамического коэффициента: “-”.

3.6. Настройка модели

Помимо набора стадий, потоков, внешних потоков, динамических коэффициентов и их взаимосвязей на работу моделей также влияют следующие настройки.

Выбор метода остановки

Определение момента, на котором останавливается симуляция возможно двумя способами.

Для ручной остановки на определённом шаге необходимо выбрать в разделе *Метод остановки* пункт *Остановка через определённое число шагов*. После чего необходимо указать *Число шагов* (целое число).

Также возможна автоматическая остановка, которая происходит если в симуляции в течение некоторого времени наблюдаются малые изменения показателей всех стадий. Для автоматической остановки выбрать: *Автоматическая остановка*.

Настройка автоматической остановки

Условия, при которых происходит автоматическая остановка подвергается настройке.

Параметры → *Настройки* → *Настройки модели*.

Период проверки для автоматической остановки (целое число) определяет раз в сколько будет производиться проверка на минимальность изменений.

Порог относительной минимальности изменений для автоматической остановки определяет величину, меньше которой должны быть относительные изменения показателей всех стадий.

Дистанция наблюдаемого минимума для автоматической остановки (целое число) определяет количество шагов, в течение которых будет проводиться проверка на минимальность изменений.

Максимальное количество шагов в ожидании автоматической остановки определяет количество шагов, через которое симуляция остановится, если не остановилась раньше по минимальности изменений.

Настройка деления на объём популяции

В классическом дифференциальном виде компартментальные модели часто слагаемые, связанные с частотой встреч двух индивидов, записывают с делением на N (объём популяции). Однако в некоторых случаях известна реальная частота встречи особей, тогда она должна учитываться в коэффициенте, а деление на N не производится.

Для этого в ДЕММО присутствует настройка: *Делить значения индуцированных потоков на объём популяции*. В таком случае коэффициенты индуцированных потоков должны учитывать вероятность встречи и быть соответственно значительно меньше коэффициентов учитывающих лишь вероятность заражения при контакте.

Настройки по умолчанию

По умолчанию устанавливает значения всех настроек модели на значения по умолчанию.

3.7. Запуск моделирования

Запустить модель формирует модель из добавленных элементов и делает проверку корректности модели. В случае, если некоторые элементы созданы некорректно, появится сообщение с допущенными ошибками. Если же модель корректна, будет запущена симуляция, результаты которой сохраняться в файл.

4. Результаты моделирования

Данные работы модели сохраняются в csv таблицу в папке DEMМо/results/. Также после проведения симуляции результат автоматически добавляется в список результатов.

Рядом с файлом результатов добавляется также файл *_info.txt. В файле описаны особенности модели, по которой получены результаты. Посмотреть данную информацию о результате можно с помощью *Информация* в разделе соответствующего результата.

4.1. Список результатов

Список результатов сохраняется в файле модели как связанные с моделью результаты.

Загрузить результат

Добавить позицию в список результатов можно загрузить данные уже имеющейся csv таблицы. Данная таблица может быть результатом моделирования другой модели или данными из вне. Подобная таблица должна содержать не меньше двух столбцов. Один из столбцов должен быть назван “step”. Названия других столбцов будут рассматриваться как названия стадий, динамику которых могут отобразить графики.

Для загрузки результатов в программу: *Загрузить файл результатов* и выбрать соответствующий ограничением файл. Разделителем в загружаемой таблице должен являться символ указанный в *Пользовательских настройках*.

Удалить результат

Результаты → в разделе удаляемого результата: “-”.

4.2. Группировка стадий

Существующий файл результатов можно обработать, сгруппировав некоторые стадии. По созданной схеме групп будет создаваться новый файл результатов, в котором каждая группа является новой стадией, динамику которой и отображает новый результат.

Значения новой стадии-группы будут высчитываться как суммы значений всех её составляющих на соответствующих шагах симуляции.

Например, для заболеваний с разными формами протекания (I_1 и I_2) можно создать новый результат группированием. Где будут группы S (содержит только исходную S), I (содержит I_1 и I_2) и R (содержит только исходную R). Такой результат покажет общую динамику распространения заболевания.

Для формирования результата с группированием необходимо в соответствующем результате:

1. *Настроить группы отображения.*
2. *Добавить результаты по группам*

Результат по группам будут добавлены в список и в папку с результатами.

Настройка групп отображения

В появившемся окне необходимо добавить необходимые группы в список с помощью *Добавить*. Для удаления группы в соответствующем разделе “-“.

В каждой добавленной группе необходимо указать *Название группы* и добавить стадии, которые должны входить в эту группу.

Для добавления стадии в группу необходимо выбрать её в *Стадия*, а затем *Добавить*.

Для удаления стадии необходимо выделить удаляемую стадию в списке и *Удалить*.

Для сохранения групп – *Сохранить*.

4.3. Отображение графиков

*Показать графики, может быть добавлено ** позволяет отобразить необходимые результаты в виде графиков. Количество одновременно отображаемых графиков ограничено и задаётся в *Пользовательских настройках*.

Для выбора результатов, графики которых будут отображены необходима в соответствующих результатах отметить галочку: *Отображать результаты*.

Интерфейс отображения графиков разработан в рамках библиотеки Matplotlib. Библиотека позволяет сохранить изображение графиков в виде файла *.png.

5. Заключение

5.1. Ошибки в программе

Программа находится на стадии тестирования. В случае возникновения новой неизвестной ошибки появляется окно, сообщающее об этом. Также в папке ДЕММО/reports/ создаётся файл с отчётом об ошибке.

Просьба пользователей программы отправлять отчёты об ошибках на контактный почтовый адрес: demmo.development@gmail.com. При необходимости можно дополнить отчёт об ошибке личным комментарием. Желательно также отправить файлы (модель, результаты, информация результатов), с которыми происходило взаимодействие при возникновении ошибки.