

Relatório das Atividades de Iniciação Científica

Aluno: Felipe da Cruz Rodrigues
Orientador: Prof. Fabiano Lemes Ribeiro

2 de julho de 2012

Resumo

São descritos neste relatório os resultados do estudo de dinâmicas epidemiológicas. Para entendermos mais sobre tais dinâmicas, foram fundamentais as investigações em: modelagem matemática, modelos baseados em agentes (modelo computacional conhecido como “autômatos celulares”); e transições de fase. Este último, como se suspeitava, foi necessário pois o comportamento que emerge da simulação epidemiológica contém uma transição de fase.

Pode-se verificar que o arcabouço da física estatística, da modelagem matemática/computacional, para o estudo de sistemas epidemiológicos é de fato relevante. Com a aplicação ou associação de transições de fases nesta problemática se obtêm um mecanismo matemático (análogo à sistemas magnéticos) para o combate e/ou controle de comportamentos epidêmicos.

1 Introdução

Encontramos na história várias ocasiões em que doenças se propagaram de forma rápida em populações. Damos o nome de epidemia para tais propagações. A Peste Bubônica (peste negra), séc. XIV, e a gripe espanhola, séc. XX, são exemplos de epidemia. O número de casos indicativos da presença de uma epidemia devido a um agente transmissível varia de acordo com o agente; dimensão; tipo e estado imunitário da população exposta; experiência ou falta de experiência prévia com o agente responsável e com o tempo; local; forma de ocorrência e seu comportamento na população [6].

O estudo de epidemias surgiu com um surpreendente número e variedade de modelos e explicações para a causa e propagação de surtos epidêmicos [5]. Entre esses modelos existiam superstições como crenças religiosas, alquimia, astrologia, etc. Nenhum destes modelos efetivamente conseguiam minimizar doenças que se alastravam rapidamente, causando mortes por onde chegavam. O surgimento de vacinas foi de grande importância para o combate de doenças como a Febre Amarela, Varíola, Difteria entre outros. Modelos matemáticos, que continham raciocínios lógicos, também substituíram as superstições para o cálculo de predições de epidemias, pandemias, etc.

O estudo de epidemias pode ser feito por meio de modelos matemáticos ou computacionais. Esses modelos não representam a realidade em todas as suas complexidades, mas capturam os aspectos essenciais de uma epidemia [5]. Neste trabalho, usamos modelos computacionais do tipo autômatos celulares[4] para representar e analisar a propagação de uma epidemia. Estudamos mais especificamente um comportamento epidêmico, discutido e analisado pela professora Tânia Tomé e Mário J. de Oliveira em seu artigo [2]: o chamado “Modelo de Contato”.

Modelo de Agentes

Como já mencionado, a ferramenta “Autômatos Celulares” faz parte de uma classe de modelos computacionais conhecidos por Modelos Baseados em Agentes [1, 3]. Esses modelos simulam sistemas populacionais, representando cada membro da população por agentes/indivíduos que possuem características próprias. O objetivo desse tipo de modelagem é tornar mais realista as simulações de populações naturais.

Direcionamos nossos estudos em um tipo específico de autômato conhecido como “modelo de contato”. Esta classe de modelos é caracterizada por ter em cada célula (agente) a mesma regra, ou seja, cada indivíduo é regido pelas mesmas restrições que são seguidas pelo contato direto com seus vizinhos. A interação de um agente com sua vizinhança está relacionada com a dimensão da rede. Podemos ter autômatos celulares unidimensionais, bidimensionais ou até com mais dimensões, mas o preço que se paga por tal meticulosidade é um recurso computacional elevado e em alguns casos, desnecessário. Em nossa pesquisa trabalhamos com autômatos celulares de uma dimensão. Suas regras serão discutidas adiante.

Modelo Matemático

Um modelo matemático é uma representação ou interpretação simplificada da realidade. Modelos matemáticos são utilizados praticamente em todas as áreas científicas, como por exemplo, na biologia, química, física, economia, engenharia e na própria matemática pura.

Observações importantes sobre um modelo:

- um modelo é uma representação simplificada de um sistema real a ser estudado;
- um modelo deve capturar os elementos chaves de um sistema;
- um *modelo* não é o *sistema*: o sistema real não se pode compreender, em toda sua plenitude. Já o modelo deve representar a essência da realidade, ou seja, sua complexidade deve ser menor.

2 Modelos de Crescimento Populacional

Modelos de crescimento populacional tem-se mostrado importantes na descrição e previsão de um grande número de processos em diversas áreas do conhecimento, como física, química, demografia, economia, ecologia, epidemiologia, entre outras disciplinas. Esses modelos são construídos na tentativa de prever o tamanho $n(t)$ de uma população num dado momento t a partir do tamanho inicial $n_0 \equiv n(t=0)$ dessa população. Focamos inicialmente no estudo do modelo de Malthus, o qual iremos discutir a seguir:

Consideremos as seguintes quantidades:

$N(t)$: número de indivíduos no instante t ;

$N(t + \Delta t)$: número de indivíduos no instante seguinte;

b : taxa de natalidade;

d : taxa de mortalidade;

$r = (b - d)$: taxa de crescimento;

O tamanho da população em $t + \Delta t$ depende do tamanho em “ t ”, de acordo com a regra:

$$N(t + \Delta t) = N(t) + rN\Delta t \quad (1)$$

Que também pode ser escrito como:

$$\frac{N(t + \Delta t) - N(t)}{\Delta t} = rN \quad (2)$$

No limite de $\Delta t \rightarrow 0$ e pela definição de derivada, temos:

$$\frac{dN}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{N(t + \Delta t) - N(t)}{\Delta t} = rN \quad (3)$$

O que nos leva ao *Modelo Exponencial* ou *Modelo de Malthus*

$$\frac{dN}{dt} = rN. \quad (4)$$

Uma pergunta que temos que nós fazer é porque usar um modelo exponencial? Para responder a essa pergunta iremos achar a solução geral dessa *EDO*(Equações Diferenciais Ordinárias). Começamos passando o termo dt para o lado direito e N para o lado esquerdo

$$\frac{dN}{N} = rdt \tag{5}$$

integrando ambos os lados da equação

$$N(t) = N_0 e^{rt} \tag{6}$$

Vejamos no gráfico a seguir as possíveis curvas para $N(t)$:

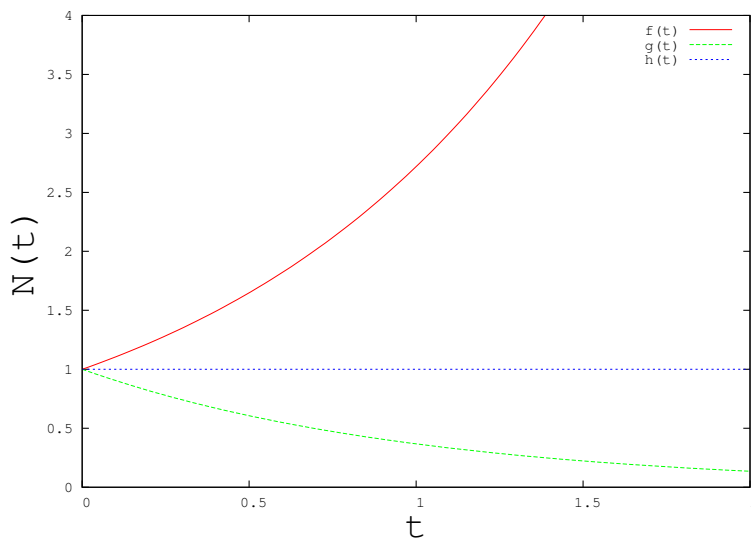


Figura 1: Evolução temporal do Modelo de Malthus para diferentes valores de r . Para $r < 0$ temos a curva h (decréscimo exponencial), para $r = 0$ temos a curva g e para $r > 0$ temos n (crescimento exponencial).

Uma população não cresce exageradamente sem controle como vimos no modelo Malthusiano, mesmo que as taxas de natalidade e/ou mortalidade variem em função do próprio tamanho populacional, isso porque o meio ambiente possui uma capacidade limitada de indivíduos. Esta capacidade limite, conhecida por capacidade de suporte, se deve a escassez de espaço ou de alimentos.

Usaremos um modelo criado por Verhulst para simular um ambiente escasso de recursos. Iremos considerar portanto que na população a taxa de natalidade diminui, devido a falta de recursos presentes no meio. A maneira mais simples de representar essa dependência é considerando a taxa de natalidade como uma função linear (x) que depende de N .

$$x = b - aN \tag{7}$$

Onde N é o tamanho da população, b é a taxa da natalidade per capita e b e a são constantes. Quanto maior N , menor a taxa de natalidade x ; e quando esse N for próximo de 0 a taxa de natalidade será próxima de b . Dessa forma b tem a mesma interpretação do modelo de Malthus, quando não existe limitação de recurso.

A constante a representa a força da adição de novos indivíduos. Quanto maior o valor de a , maior o impacto da densidade sobre a população. Quando $a = 0$ significa que não existe limitação de recursos: recupera-se portanto o modelo de Malthus.

Já a taxa de mortalidade deve aumentar com N . Quanto maior for o número de indivíduos na população, maior será essa taxa, que agora passa a ser representada pela função y , que depende de d e N .

$$y = d + cN \quad (8)$$

A constante c é a força com que a densidade aumenta a taxa de mortalidade.

Agora iremos substituir as taxas de b e d pelas funções x e y no modelo de Malthus e torná-lo dependente da densidade. O modelo de crescimento exponencial dado pela equação 6 passa a ser representado pela equação 9, uma vez que $r = b - d$.

$$\frac{dN}{dt} = [(b - aN) - (d + cN)]N \quad (9)$$

Assim temos:

$$\frac{dN}{dt} = [(b - d) - (a + c)N]N \quad (10)$$

A fim de simplificar mais a expressão iremos multiplica-la por $(b - d)/(b - d)$, assim a expressão 10 passa a ser da seguinte forma:

$$\frac{dN}{dt} = \left[\frac{(b - d)}{(b - d)} \right] [(b - d) - (a + c)N]N \quad (11)$$

Aplicando a propriedade distributiva em 11 temos:

$$\frac{dN}{dt} = [(b - d)] \left[\frac{(b - d)}{(b - d)} - \frac{(a + c)}{(b - d)}N \right] N \quad (12)$$

Como $(b - d) = r$ e a, b, c e d são constantes, podemos tratar $\frac{a+c}{b-d}$ como K , e então a expressão 12 passa a ser da seguinte forma:

$$\frac{dN}{dt} = rN \left(1 - \frac{N}{K} \right) \quad (13)$$

Cuja solução é:

$$N(t) = \frac{N_0 K e^{rt}}{[K + N_0(e^{rt} - 1)]} \quad (14)$$

Onde $N_0 \equiv N(t = 0)$ é a população inicial. A equação acima é a equação do crescimento logístico, onde K representa a capacidade de suporte do meio. É a mais simples equação que descreve o comportamento de população quando os recursos para o crescimento são limitados.

Nesse caso, a população deixa de crescer quando seu número é igual a K , o chamado equilíbrio estável. Esse equilíbrio é obtido quando as taxas de natalidade e mortalidade são iguais (veja curva $f(t)$). Quando já temos uma população maior que K vemos que com o tempo a população decai exponencialmente (ver curva $g(t)$) como mostrado na figura abaixo.

3 Dinâmica de Propagação de Doenças via Modelo de Contato

Para que a programação usada fosse rica em simular um sistema epidemiológico já estudado em [2] utilizamos as regras de contato do mesmo artigo. A dinâmica do modelo segue o seguinte algoritmo:

1. A simulação inicia-se com uma parcela da população contaminada (50%). A cada passo da dinâmica, sorteia-se aleatoriamente uma célula:

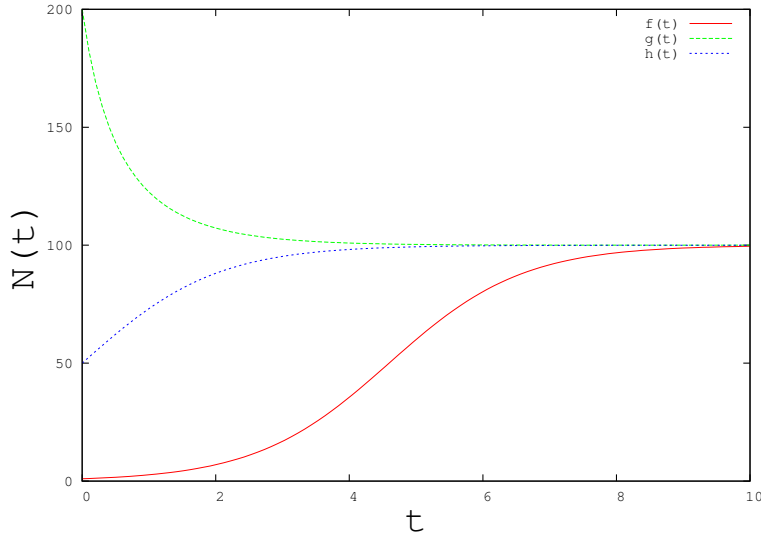


Figura 2: Evolução temporal do Modelo de Verhulst para diferentes condições iniciais ($N_0 = 2, 50, 200$) e $K = 100$.

2. Caso a célula sorteada esteja vazia (não contaminada) então há probabilidades iguais de que ela olhe para seu vizinho anterior ou posterior.
 - Se seu vizinho escolhido não estiver contaminado então o sítio escolhido também não o será.
 - Se seu vizinho escolhido estiver contaminado então o sítio escolhido tem uma probabilidade de se contaminar dada por:

$$\frac{\lambda}{1 + \lambda} \tag{15}$$

3. Caso a célula sorteada esteja infectada então ela pode se recuperar com uma probabilidade dada por:

$$\frac{1}{1 + \lambda} \tag{16}$$

O parâmetro λ é a taxa de infecção, ou seja, o quanto a doença é transmissível. Se por algum motivo não houver na população indivíduos infectados, contaminamos aleatoriamente uma célula para que a doença não seja aniquilada [2].

Além de simular a transmissão do vírus também verificamos a dependência entre densidade de infectados ρ e a taxa de infecção λ . Gostaríamos de verificar, via simulação computacional, se este sistema epidemiológico apresenta uma transição de fase.

4 Resultados e discussão

A dinâmica desse modelo leva a duas etapas macroscópicas. Na primeira, associada a taxas de infecção λ menores que um certo valor crítico λ_c , acontece uma eliminação completa e espontânea da doença. Já na segunda, associada a taxas de infecção maiores que esse valor crítico, acontece fixação da doença na população, conforme figura (3). Para cada ponto do gráfico fizemos uma média sobre cinquenta valores diferentes.

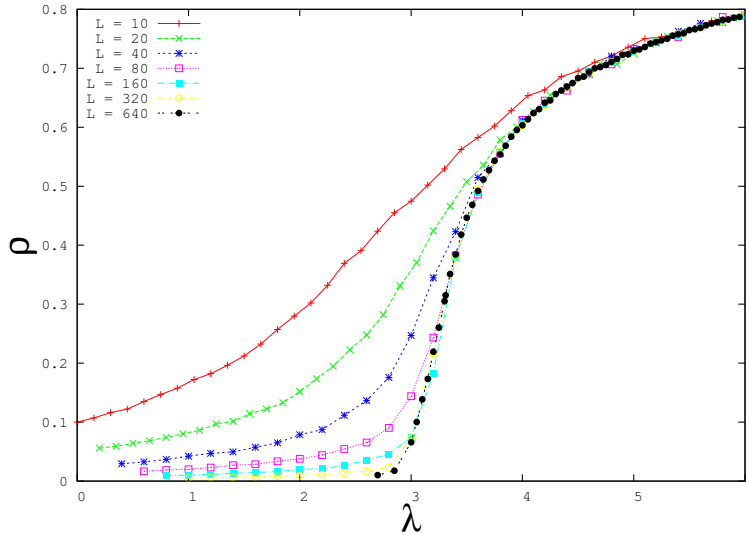


Figura 3: Densidade de infectados (ρ) em função da taxa de infecção (λ).

No gráfico acima temos uma curva para cada valor de L , sendo L o número de células (indivíduos) de uma rede (em nosso caso uma rede unidimensional). É fácil perceber que para maiores valores de L temos, de forma mais evidente, a transição de fase. Isto acontece pois uma rede com muitos indivíduos fica menos viciada, ou melhor, os valores obtidos representam maior aleatoriedade. Percebemos também que as curvas com valores de L menores ($L = 10$ e $L = 20$), ficam mais oscilantes. Isso acontece pois o recurso computacional, para que a curva fique bem delineada como em [2], é altíssimo e impróprio para a iniciação científica.

Na figura abaixo, cada ponto representa o desvio médio - barra de erro - das medidas de ρ (densidade de infectados) para cada valor de λ (taxa de infecção). Estas medidas foram feitas a partir de 5000 amostras de simulações feitas com populações de tamanho $L = 640$. O valor correspondente ao pico desta curva será a taxa de infecção crítica λ_c .

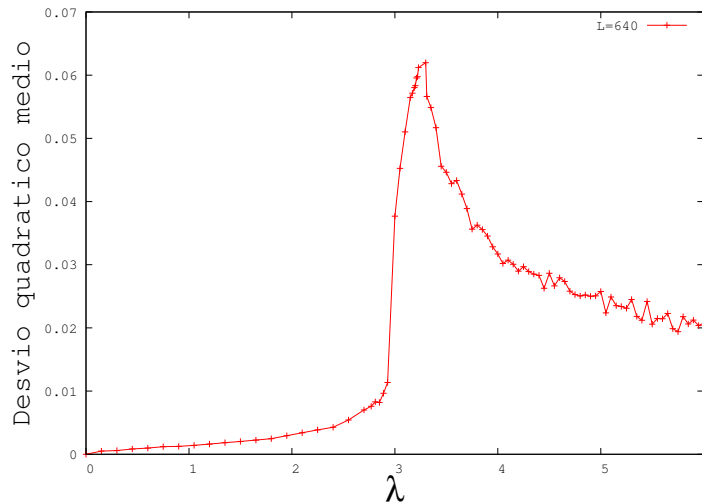


Figura 4: Desvio quadrático em função de λ .

Como vimos, valor máximo do desvio médio (erro) de ρ caracteriza a taxa de contaminação

crítica (λ_c). Pelas simulações obtemos $\lambda_c = 3,29 \pm 0,07$. O valor de λ_c com maior precisão foi obtido em [2], sendo $\lambda_c = 3.298 \pm 0.002$. O comportamento diferente do sistema, delimitado por λ_c , caracteriza uma transição de fase. Transições desse tipo também são observadas na mudança de fase de um material em estado sólido para seu estado líquido (ou do estado líquido para gasoso). Assim como T_c que é a temperatura de Curie, onde abaixo desta temperatura tem-se um estado de magnetização de um objeto ferromagnético.

No gráfico (5) temos um ajuste de curva para encontrarmos o valor experimental do expoente crítico β que será o coeficiente angular da reta de melhor ajuste. Encontramos que $\beta = 0.214 \pm 0.002$ (erro estatístico) e o valor encontrado por [2] é $\beta = 0.277 \pm 0.002$.

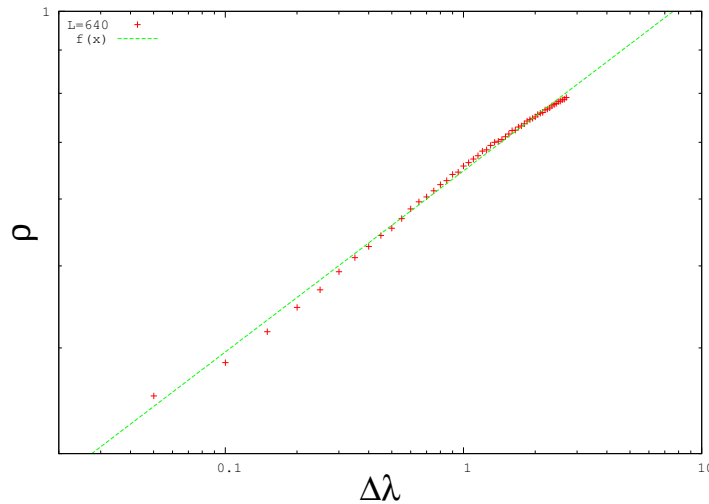


Figura 5: Densidade de infectados (ρ) pela variação da taxa de infecção ($\Delta\lambda$).

5 Conclusão

Percebemos com os modelos de dinâmica populacional, os crescimentos e decrescimentos exponenciais (modelo de Malthus) e os crescimentos e decrescimentos com carga de capacidade (modelo de Verhulst), assim como suas discretizações. Mesmo sendo simples, estes modelos descrevem comportamentos computacionais que refletem aspectos observados frequentemente na natureza. Desta forma, os modelos matemáticos e computacionais se mostram como uma ferramenta importante para previsões de populações, como: crescimento de coelhos, modelo caça e caçador, crescimento de bactérias com alimento e espaço ilimitados (crescimento exponencial), entre outros.

Na simulação computacional do modelo epidemiológico concluímos que para certos valores de λ surgem diferentes resultados, característico de Transições de Fases. Para $\lambda < \lambda_c$ a doença é eliminada. Mas para valores de $\lambda > \lambda_c$ temos uma preservação da doença. Haverá portanto surtos epidêmicos. Ou seja, se temos um surto epidêmico em suas regras podem ser representadas ou passadas por modelos de agentes e se for encontrada a taxa de infecção de um dado vírus, poderemos prever se num dado intervalo finito de tempo haverá epidemia (porque sua taxa de infecção é maior que λ_c) ou se o vírus será simplesmente eliminado (porque sua taxa de infecção é menor que λ_c).

Referências

- [1] N. Boccara. *Modeling Complex Systems*. Springer-Verlag New York (2004).
- [2] Tânia Tomé and Mário J. de Oliveira. Stationary distribution of finite-size systems with absorbing states. *PHYSICAL REVIEW E* 72, 026130(2005).
- [3] T. Tomé, M. de Oliveira. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*. Edusp, Editora da Universidade de São Paulo (2001).
- [4] S. Wolfram. *A new Kind of Science*. (2002)
- [5] Murray, J.D.. *Mathematical Biology: An Introduction*. 3rd edition, Springer Verlag, New York (2002).
- [6] G. Bendicchio and S.E. Jorgensen. *Fundamentals of Ecological Modelling*. Elsevier Science; 3 edition (August 28, 2001).
- [7] S. Salinas. *Introdução à Física Estatística*. Edusp (1997).