

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL PARA PROPAGAÇÃO DE DOENÇAS: MODELO DE PERCOLAÇÃO EM SÍTIOS

K.N. Silva

Gerência de Ensino Superior – CEFET-AM
Av. Sete de setembro, 1975, Centro. CEP 69.020-120 Manaus-AM
E-mail: karlanunez@gmail.com

J.S. Cabral Neto

Gerência de Ensino Superior – CEFET-AM
Av. Sete de setembro, 1975, Centro. CEP 69.020-120 Manaus-AM
E-mail: jneto@cefetam.edu.br

RESUMO

O conceito de percolação surge a partir do estudo do fenômeno de transporte de um fluido através de um meio poroso. Petróleo através de rochas ou água num filtro de areia são alguns dos exemplos de sistemas percolantes. A descrição do processo de percolação, assim como o de difusão, é feita utilizando modelos aleatórios. O modelo de percolação é muito utilizado para sistemas desordenados e vem sendo aplicado para explicar uma grande variedade de fenômenos: propagação de fogo em florestas, evolução biológica, interações sociais, sistemas magnéticos, dentre outros sistemas que já vem sendo tratados utilizando este modelo. Neste trabalho, propomos tratar o fenômeno da propagação de doença através de simulação computacional, a fim de analisar o comportamento da enfermidade em uma população, esta por sua vez considerada como uma rede quadrada finita. O modelo introduzido considera que uma doença se propaga através de contatos diretos entre os vizinhos de uma rede quadrada de dimensão $N \times N$ (sendo N^2 o número de indivíduos da rede). Essa distribuição é feita de forma aleatória, com probabilidade p de um dado sítio a chance de estar imunizado (através de algum processo) e $q=1-p$ de ser contaminado. Após o estudo da teoria de percolação e algumas de suas aplicações, implementamos um programa em Linguagem de Programação FORTRAN para a simulação computacional numérica da propagação da doença. Deste modo, estabelecemos graficamente a relação de indivíduos contaminados, razão de infectados e análise do tamanho da rede em função da concentração p (concentração de imunes). Além disto, pudemos perceber por análise gráfica a concentração crítica p_c para a transição de fase do sistema: de enfermidade controlada para uma população com epidemia. Este trabalho vem sendo realizado por diversos pesquisadores, e teve seu objetivo também na aprendizagem da teoria de percolação para aplicação em futuros projetos envolvendo o tema da propagação de doenças.

PALAVRAS-CHAVE: propagação de doenças, simulação computacional numérica, percolação.

1. INTRODUÇÃO

Historicamente, o conceito de percolação surge do estudo do fenômeno de transporte de um fluido através de um meio poroso, como também a descrição da dinâmica do fluxo de uma substância em um meio randômico. Os termos fluxo, substância e meio são abstratos e assumem várias interpretações de acordo com o contexto abordado: fogo em florestas, derramamento de óleo, formação de moléculas, etc. (Wanzeller, 2003).

Esta teoria surgiu com o estudo de Flory (1941) e Stockmayer (1943) sobre o processo de polimerização de macromoléculas, a partir de moléculas menores com o aumento do número de ligações químicas entre as moléculas se estendendo por todo o sistema, formando géis poliméricos (processo de gelação). Já no final da década de 50, com Broadbent e Hammersley (1957), o modelo de percolação concentrou-se em descrever o meio poroso, que é visto como uma rede de canais aleatórios, por onde escoam um fluido determinístico, surgindo os primeiros resultados não-triviais sobre a existência de transição de fase provados por estes autores. Harris (1960) obteve resultados parciais sobre o ponto crítico para a transição de fase em duas dimensões no início dos anos 60. Mais tarde, no final dos anos 70 e início dos anos 80, Kesten (1980) estabeleceu seu valor exato.

Desde então, modelos de percolação têm sido aplicados em várias situações físicas interessantes, tais como o problema da mecânica estatística de sistemas ferromagnéticos diluídos (Chayes & Chayes, 1984), no problema do transporte de corrente elétrica através de uma rede composta por um grande número de resistores, em problemas de prospecção de petróleo (Sahini, 1992), propagação de incêndios em bosques (Staufer & Aharony, 1992), propagação de fogo em florestas (Henley, 1993), evolução biológica (Ray & Jan, 1994 e Jovanovic *et al*, 1994), colônia de formigas, epidemias (Moore & Newman, 2000), interações sociais (Solomon *et al*, 2000), transições estruturais em cristais desordenados (Martins *et al*, 2004), sistemas magnéticos diluídos (Stinchcombe, 1993), e até mesmo a interação de corpos em uma galáxia.

Outro exemplo importante é o estudo da propagação de uma doença, através de agente infectante, numa população particular. Para o agente infectante, uma pessoa funciona como um hospedeiro, um ambiente para ficar ou viver e desse ponto de vista a população humana torna-se um sistema simples de modelar. Portanto, a teoria de percolação pode ser aplicada neste sistema que tem interações entre seus indivíduos de forma simples, servindo também como uma aproximação para modelar sistemas complexos com interações de muitos corpos, através de uma forma simples de representar as interações entre os elementos do sistema, e permitindo que o mesmo evolua até o equilíbrio, numa simulação estocástica. A coleção de indivíduos é usualmente representada numa rede, onde no caso bidimensional os elementos ocupam os vértices de um quadrado imaginário, e as interações podem ser limitadas aos primeiros vizinhos ou segundos, terceiros, etc. Em nosso caso, abordaremos a interação entre primeiros vizinhos.

A importância de estudos acerca da modelagem de processos epidêmicos, através da teoria de percolação, implica em uma possível minimização de efeitos provocados por certa doença no reino animal ou vegetal. Desse modo, esforços contínuos para uma ação efetiva são necessários, onde através da Epidemiologia que todos os conhecimentos sobre fatores relacionados ao agente patogênico, ao hospedeiro e ao meio ambiente, relativos à história natural da doença e ao mecanismo de propagação da mesma, são agregados para uma planificação da estratégia de solução de problemas da população, ou seja, para obtenção de medidas preventivas aplicáveis.

Neste trabalho, utilizamos a teoria de percolação para estudarmos a propagação de uma doença, numa abordagem espacial. Segundo este modelo, o mecanismo pelo qual os agentes infectantes se propagam é considerado como essencialmente aleatório, com a chance de um indivíduo da população de susceptíveis se contagiar dependente da configuração espacial vizinha dos indivíduos infectantes, já que a doença tem um caráter determinístico e propaga-se em um meio aleatório. Implementamos uma simulação computacional para uma rede quadrada de tamanho $N \times N$, onde cada agente da população é representado por um sítio da rede. Especificamente, observamos a influência da distribuição espacial inicial dos indivíduos infectados durante o processo endêmico a partir da inserção de infectados no centro do sistema, aleatoriamente e nos vértices da rede, bem como a influência do número de simulações para o fenômeno, a influência do tamanho da população para a quantidade de contaminados e a razão de infectados em função da concentração de imunes para diferentes tamanhos de rede.

2. PERCOLAÇÃO

O processo de percolação está dividido em dois tipos: percolação por ligação e percolação por sítios. O processo de *percolação por ligação* pode ser entendido por um exemplo muito simples: imaginemos que uma pedra seja jogada dentro de um balde de água, onde o líquido penetrará no material através de seus poros. Qual seria a probabilidade do centro da pedra ficar molhado?

Esta probabilidade depende da porosidade da pedra, onde podemos considerar como *um* em pedras-pome e *zero* em um basalto. Claro que existem materiais com porosidade que varia de forma contínua, porém, neste caso, o comportamento deve ser considerado com probabilidade *um* ou *zero*, ou seja, o material é permeável ou impermeável.

Diante de um sistema como este, podemos modelá-lo como a pedra sendo uma rede de poros interligados que conduzirão a água até o seu interior, e possivelmente à outra face da pedra e a água como fluido a percolar pelo meio. Mas nem todos os poros estão conectados, muitos não se ligam a outros, o que impedirá a passagem do líquido. Desta forma, podemos dizer que o líquido percolou no material quando este transpõe totalmente os poros da pedra de uma extremidade a outra. Esta rede é composta de muitos poros, os quais chamamos de sítios, que por sua vez podem assumir dois estados: vazios ou ocupados. Após o processo de percolação, vazio seria um sítio que não foi atingido pelo líquido e ocupado seria um sítio por onde o líquido passou.

Agora, vamos supor uma rede quadrada composta de diversos elementos, chamados *sítios*. Cada sítio pode estar, aleatoriamente, ocupado ou vazio, independente de seus vizinhos estarem ocupados ou vazios. Um grupo de sítios vizinhos ocupados, ou vazios, é definido como um *aglomerado*. A teoria de percolação trata da quantidade destes aglomerados e de suas propriedades no sistema em que estão inseridos, onde este modelo é chamado de *percolação por sítios*.

Seja então p a probabilidade de um sítio estar vazio e sua probabilidade complementar ($q=1-p$) de que ele esteja ocupado. Em uma rede com N sítios (com N grande), teremos, em média, pN sítios ocupados, e o restante $(1-p)N$ vazio. Se formos analisar o comportamento do sistema em função de diferentes valores de p , percebemos que, com o aumento de p , teremos aglomerados de sítios vazios cada vez maiores. Teremos um *aglomerado percolante* quando um aglomerado de sítios ocupados atingir os lados opostos da rede, indicando assim que o sistema percolou. A determinada concentração de sítios ocupados em que este fenômeno ocorre pela primeira vez é chamada de *concentração crítica* p_c , presente também no modelo de percolação por ligação.

3. SIMULAÇÃO DO PROCESSO EPIDÊMICO DE UMA POPULAÇÃO

Como proposta deste trabalho, simulamos numericamente o processo epidêmico de uma população através da teoria de percolação por sítios. Segundo Santos *et al* (1998), para auxiliar a análise numérica deste processo, podemos utilizar simulações computacionais, implementadas de forma geral e simplificada na Linguagem de programação FORTRAN. Como condições de contorno, impomos que a população seja uma rede composta de sítios, onde os sítios representam os indivíduos desta população. Cada sítio assume um valor R , que varia de modo randômico ao longo da rede e é distribuído uniformemente entre 0 (vazio) e 1 (ocupado). A imunidade de um sítio respeita uma dada probabilidade p (Wanzeller, 2003). Então, podemos impor que:

Condição	Estado	Valor assumido na rede	Condição
$R < p$	Sítio vazio	0	Imune
$R > p$	Sítio ocupado	1	Susceptível

A caracterização aleatória de vazio e ocupado resulta na formação de uma rede de indivíduos susceptíveis a doença e de imunes. Consideramos que uma doença se propague através de contatos adequados e eficientes entre vizinhos, ou seja, um contato de um indivíduo susceptível com um infectado resulta num novo indivíduo infectado. Somente a influência dos primeiros vizinhos é significativa para a transmissão da doença. Assim, se um sítio susceptível possui n primeiros vizinhos contaminados, e se sua chance de contágio para cada vizinho contaminado for $q=1-p$, então a probabilidade de imunidade é p . Tal probabilidade pode ser relacionada a uma porção da população que se encontra imunizada por algum processo, como vacinação ou resistência à doença.

Teremos então um *aglomerado* quando um grupo de sítios da rede estiverem conectados a um primeiro vizinho. Um sítio isolado forma um *aglomerado unitário*. Estes aglomerados são chamados de *aglomerados geométricos*, pois não há elemento físico algum que interfira na formação do aglomerado. Para determinados valores de p , a doença poderá percolar por vários sítios vizinhos.

Após estabelecidas as condições iniciais, como a imunidade, o tamanho da população e o local de inserção de infectantes na rede de susceptíveis, analisaremos então o caso de quando houver um grupo de sítios contaminados que se estenda de uma extremidade a outra da população. Nesta situação, teremos um aglomerado percolante, o que caracterizará a transição de fase do sistema: de enfermidade controlada a epidemia, bem como a existência de um valor crítico para que ocorra esta transição. Assim, convencionamos um “passo de tempo” para a varredura completa da rede, onde finalizamos com todos os indivíduos susceptíveis contaminados, onde posteriormente calculamos as variáveis de interesse para o trabalho.

4. CONSIDERAÇÕES FINAIS

A partir da Teoria de Percolação por sítios, pudemos embasar a modelagem do problema da propagação de uma doença e conseqüentemente sua formatação para posterior análise, onde consideramos para diferentes valores de imunidade p , diferentes configurações de redes de susceptíveis. Outro aspecto importante a destacar neste primeiro momento foi acerca da análise geográfica da população, pois estamos considerando que todos os indivíduos susceptíveis serão potencialmente infectados.

Na Fig.1, apresentamos os resultados da propagação de uma certa doença para diferentes tamanhos de rede, 10x10 e 100x100. As flutuações estatísticas para um número menor de simulações são mais evidentes. Com o aumento do número de simulações, elas praticamente desaparecem. Para a rede 10 x10 temos a quantidade de contaminados igual $43,54 \pm 2,43$ e para a rede 100 x100 este valor é $4489,93 \pm 26,82$, ambos para uma concentração de imunes igual a 0,5.

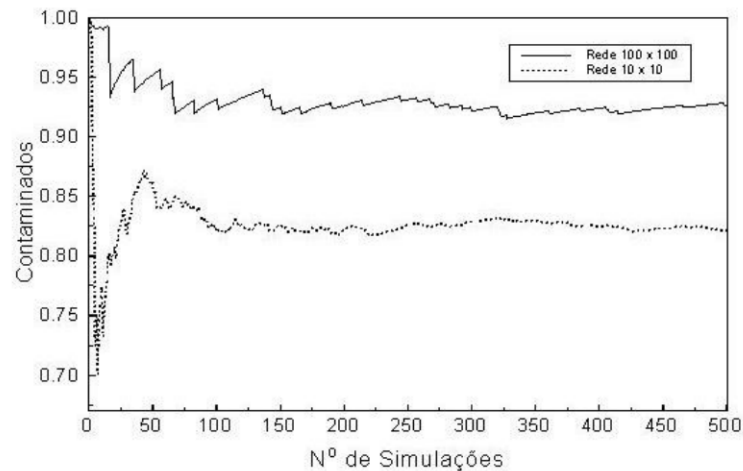


Figura 01 – Densidade de Contaminados *versus* número de simulações para $p = 0,5$.

A influência do tamanho do sistema (rede) é observada na Fig.2, para 1000 simulações. O aumento da população gera maiores barreiras imunológicas: para uma rede 20x20, a taxa de imunes é de aproximadamente 0,8 e para uma rede 100x100, esta taxa cai para 0,55, aproximadamente. A densidade de contaminados é dada pelo número de contaminados dividido pela quantidade total de sítios.

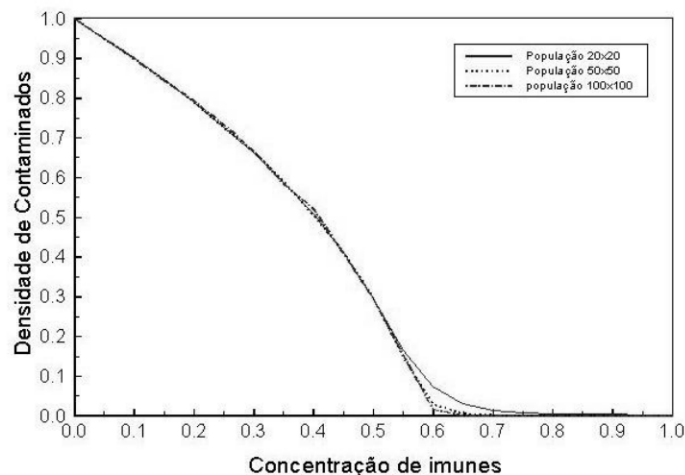


Figura 02 – Densidade de contaminados *versus* concentração de imunes (p) para vários tamanhos da população: 20x20, 50x50 e 100x100 indivíduos.

Neste modelo, temos antes uma rede de indivíduos susceptíveis a infecção e indivíduos imunes. Dependendo da localização do ponto de inserção de um indivíduo contaminado nesta rede e da configuração da rede dada pela taxa de indivíduos imunes, teremos um número maior ou menor de contatos efetivos com susceptíveis, o que resultará na variação da porcentagem de contaminações. Mostramos na Fig.3 para uma rede 100x100 (10000 indivíduos) com 1000 simulações, o comportamento da propagação da doença quando inserimos um indivíduo contaminado em diferentes pontos da rede: no centro, no vértice e em ponto qualquer. Observamos que para uma concentração de imunes $p < 0,2$, a evolução da hipotética doença, independentemente da posição inicial de um indivíduo contaminado. Acima desse valor ($p > 0,2$), a inserção de um indivíduo doente no centro do sistema, ou em qualquer outra posição, produz uma mudança de comportamento deste sistema se comparada a uma inserção no vértice.

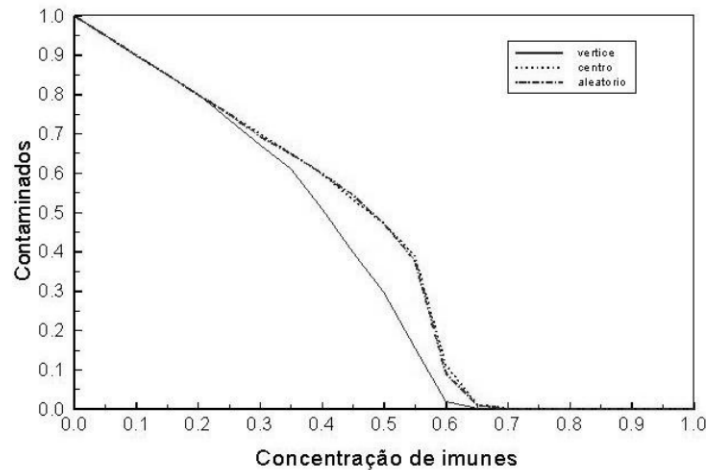


Figura 03 – Relação da localização do individuo contaminado com a quantidade de contaminados.

Outro aspecto importante a ser analisado é a razão de infectados em função da quantidade de indivíduos imunes, apresentada na Fig.4 para redes 20x20, 50x50 e 100x100. Podemos ver que, quando a concentração de imunes é menor que 0,3, a razão de infectados é 1. Isto significa que com menos de 30% da população imunizada, a introdução de um indivíduo contaminado tornará toda a população doente. Neste caso, não há barreiras imunológicas suficientes para evitar a propagação da doença. Entretanto, quando $p \approx 0,6$, ou seja, 60% da população é de alguma forma imunizada, existe uma quantidade de barreiras imunológicas suficiente para evitar a evolução para um estado epidêmico. Portanto, abaixo deste valor crítico, teremos uma mudança de fase no sistema: de uma fase controlada para a fase epidêmica.

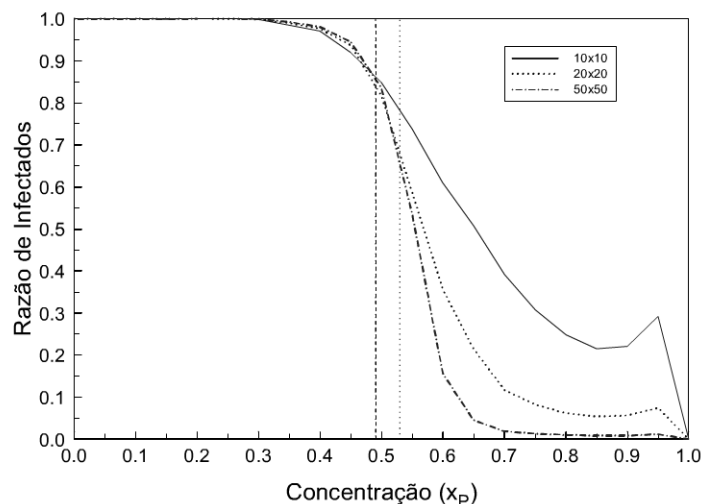


Figura 04 – Razão de infectados em função da concentração de imunes para diferentes tamanhos da rede. As linhas tracejadas indicam o valor da concentração de imunes onde o sistema muda de comportamento.

4. AGRADECIMENTOS

Este trabalho foi desenvolvido no Programa de Iniciação Científica do CEFET-AM. Agradecemos a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Amazonas pelo suporte financeiro dado a este trabalho.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BROADBENT, S.R. & HAMMERSLEY, J. M. **Percolation Process I. Crystals and mazes.** Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, v.53, p.629-641, 1957.

CHAYES, J. & CHAYES, L. **Percolation and random media in critical phenomena, random systems and gauge theory.** Les Houches Session XLIII 1984.

FLORY, P. J. **Molecular size distribution in three dimensional polymers. I. Gelation.** Journal American Chemical Society, v.63, p.3083-3090, 1941.

HARRIS, T. **A lower for the critical probability in a certain percolation process.** Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, v.56, p.13-20, 1960.

HENLEY, C. L. **Statics as a “self-organized” percolation model.** Phys. Rev. Letter, v.71, p.2741-2744, 1993.

JOVANOVIĆ, B. BULDEREV, S. V. HAVLIN, S. & STANLEY, H.E. **Punctuated equilibrium and “history-dependent” percolation.** Phys. Rev. E, v.50, n.04, p.2403-2406, 1994.

KESTEN, H. **The critical probability of bond percolation on the square lattice equals $\frac{1}{2}$.** Communications in Mathematical Physics, v.74, p.41-59, 1980.

MARTINS, P. H. L. PLASCAK, J. A. & PIMENTA, M. A. **Percolation model for structural phase transitions in $\text{Li}_x\text{H}_x\text{IO}_3$.** Phys. Rev. B, v.69, p.0921071-0921074, 2004.

MOORE, C. & NEWMAN, M. E. J. **Epidemic and percolation in a small-world network.** Phys. Rev. E, v.61, p.5678-5682, 2000.

RAY, T. S. & JAN, N. **Anomalous approach to the self-organized critical state in a model for “life at the edge of chaos”.** Phys. Rev. Letter, v.72, n.25, p.4045-4048, 1994.

SAHINI, M. **Application of percolation theory.** London: Taylor and Francis, 1992.

SOLOMON, S. WEISBUCH, G. De ARCANGELIS, L. JAN, N. & STAUFER, D. **Social percolation model.** Physica A, v.277, p.239-244, 2000.

STAUFER, D. & AHARONY, A. **Introduction to percolation theory.** London: Taylor and Francis, 1992.

STINCHCOMBE, R. **Phase ou critical phenomena.** London: Academic, 1983. 7v.

STOCKMAYER, W. H. **Theory of molecular size distribution and gel formation in branched-chain polymers.** Journal of Chemical Physics, v.11, n.02, p.45-55, 1943.

WANZELLER, W. G. **Estudo de percolação de clusters de Monte Carlo para o modelo de Ising bidimensional.** Dissertação (Mestrado em Física Teórica)—Instituto de Física Teórica, Universidade Estadual Paulista, São Paulo, 2003.