Algoritmo para simulação de Monte Carlo
de um Gás Ideal Quântico no ensemble Grande Canónico

partículas indistinguíveis $P_{st}(\{n_{\vec{k}}\}) = \dfrac{e^{-\beta\left(\sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} n_{\vec{k}} - \mu N\right)}}{Z_{GC}}$

perturbações do estado: adição ou remoção de partícula

- escolhemos adicionar/remover com probabilidade 1/2

- para adicionar escolhemos um $\vec{k}$ ao acaso

- para remover escolhemos uma partícula ao acaso da lista

Adição: $x' = \{ n_{\vec{k}'}, n_{\vec{k}} + 1 \}$ $\quad Q(x'|x) = \frac{1}{2} \frac{1}{n_{max}^d}$

$x = \{ n_{\vec{k}'}, n_{\vec{k}} \}$ $\quad Q(x|x') = \frac{1}{2} \frac{n_{\vec{k}}+1}{N+1}$

$$P_A = \min \left(1, \frac{Q(x|x')}{Q(x'|x)} \frac{P_{st}(x')}{P_{st}(x)} \right)$$

$$\boxed{\frac{P_{st}(x')}{P_{st}(x)} = \frac{e^{-\beta\left(E_{\vec{k}}(n_{\vec{k}}+1) - \mu(N+1)\right)}}{e^{-\beta\left(E_{\vec{k}} n_{\vec{k}} - \mu N\right)}}}$$

$$= \min \left(1, \frac{(n_{\vec{k}}+1)\, n_{max}^d}{N+1} e^{-\beta(E_{\vec{k}} - \mu)} \right)$$

---

remoção: $x' = \{ n_{\vec{k}'}, n_{\vec{k}} - 1 \}$ $\quad Q(x'|x) = \frac{1}{2} \frac{n_{\vec{k}}}{N}$

$x = \{ n_{\vec{k}'}, n_{\vec{k}} \}$ $\quad Q(x|x') = \frac{1}{2} \frac{1}{n_{max}^d}$

$$P_A = \min \left(1, \frac{Q(x|x')}{Q(x'|x)} \frac{P_{st}(x')}{P_{st}(x)} \right)$$

$$\boxed{\frac{P_{st}(x')}{P_{st}(x)} = \frac{e^{-\beta\left(E_{\vec{k}}(n_{\vec{k}}-1) - \mu(N-1)\right)}}{e^{-\beta\left(E_{\vec{k}} n_{\vec{k}} - \mu N\right)}}}$$

$$= \min \left(1, \frac{n_{\vec{k}}}{N\, n_{max}^d} e^{\beta(E_{\vec{k}} - \mu)} \right)$$

Algoritmo para simulação de Monte Carlo
de um Gás Ideal Clássico no ensemble Grande Canónico

partículas distinguíveis

$$P_{st}(\{n_{\vec{k}}\}) = \frac{e^{-\beta\left(\sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} n_{\vec{k}} - \mu N\right)} \cancel{N!}}{\cancel{N!}\, Z_{GC} \prod_{\vec{k}} n_{\vec{k}}!}$$

Adição:

$$P_A = \min\left(1, \frac{Q(x|x')}{Q(x'|x)} \frac{P_{st}(x')}{P_{st}(x)}\right)$$

$$= \min\left(1, \frac{n_{max}^d}{N+1} e^{-\beta(E_{\vec{k}} - \mu)}\right)$$

$$\boxed{\frac{P_{st}(x')}{P_{st}(x)} = \frac{e^{-\beta\left(E_{\vec{k}}(n_{\vec{k}}+1) - \mu(N+1)\right)}}{e^{-\beta(E_{\vec{k}} n_{\vec{k}} - \mu N)}} \frac{1}{n_{\vec{k}}+1}}$$

Remoção:

$$P_A = \min\left(1, \frac{Q(x|x')}{Q(x'|x)} \frac{P_{st}(x')}{P_{st}(x)}\right)$$

$$= \min\left(1, \frac{N}{n_{max}^d} e^{\beta(E_{\vec{k}} - \mu)}\right)$$

$$\boxed{\frac{P_{st}(x')}{P_{st}(x)} = \frac{e^{-\beta\left(E_{\vec{k}}(n_{\vec{k}}-1) - \mu(N-1)\right)}}{e^{-\beta(E_{\vec{k}} n_{\vec{k}} - \mu N)}} n_{\vec{k}}}$$

Modelação e Física Estatística

Modelos de Epidemias

António Luís Ferreira

May 26, 2021

Temas

o modelo

- Variáveis
  s= número de suscetiveis, i=número de infeciosos ativos, r= número de recuperados (assume-se imunidade e incluêm-se óbitos), $n = s + i + r$ tamanho da população
- Equações dinâmicas
  $\frac{ds}{dt} = -\beta\, s\, i$; $\frac{di}{dt} = \beta\, s\, i - \gamma i$; $\frac{dr}{dt} = \gamma i$

  $\beta \to \beta/n$ independente de n

  depende de n
- Parâmetros
  β é o produto da frequência de contactos pela probabilidade de transmissão
  γ^{-1}é o tempo médio em que um infetado permanece ativo.
  Condições iniciais: $i(0) = i_0$; $s(0) = s_0$.

R_0 e R_t

tempo médio que um infetado permanece ativo

- Tempo médio de duração da infeção
  Na ausência de novos infetados $i(t) = i_0 \exp(-\gamma t)$
  $di = i(t)\gamma dt$ é o numero de recuperados entre t e $t + dt$.
  $\int_0^\infty \gamma i(t) dt =$ número de total de recuperações
  $\langle t \rangle = \frac{\int_0^\infty \gamma i(t) t\, dt}{\int_0^\infty \gamma i(t) dt} = \frac{1}{\gamma} =$ tempo médio que um infetado leva a recuperar
- R_0 e R_t
  se cresce o número de infetados ativos
  A epidemia existe se $i(t) > i_0$ para um dado intervalo de tempo.
  A epidemia existe se $s_0 \beta > \gamma$ (ver equação para $\frac{di}{dt}$) isto é se $R_0 = s_0 \frac{\beta}{\gamma} > 1$
  Define-se $R_t = s(t) \frac{\beta}{\gamma}$. Quando $R_t = 1$ atinge-se o pico da infeção e $i(t)$ começa a decrescer.

Questões a responder

- Estados de equilibrio
  $i = 0$ e s qualquer. Se $R_0 = s_0 \frac{\beta}{\gamma} > 1$ o equilíbrio é instável e basta um infetado para a epidemia começar.
- Questões
  - Quantos suscetíveis terminam infetados $(n - s_\infty)$?
  - Qual o tempo,t_{pico} em que se atinge o pico da infeção?
  - Quantos infeciosos existem no pico da infeção, i_{pico}?
  - Quantos suscetíveis existem no pico da infeção, s_{pico}?
  - O que é a imunidade de grupo e como se atinge?

Cálculo de s_∞

- Relação entre i e s
  de $\frac{ds}{dt} = -\beta\, s\, i$; $\frac{di}{dt} = \beta\, s\, i - \beta\, i$ obtemos $\frac{di}{ds} = -1 + \frac{\gamma}{\beta s}$
  $i - i_0 = \int_{s_o}^{s} \frac{di}{ds} ds = \int_{s_o}^{s} -\left(1 - \frac{\gamma}{\beta s}\right) ds = -(s - s_0) + \frac{\gamma}{\beta} \ln \frac{s}{s_0}$
  $i = -f(s) + i_0$ com $f(s) = s_0(s/s_0 - 1) - \frac{s_0}{R_0} \ln \frac{s}{s_0}$

dado que $i_\infty = 0$

- $f(s_\infty) = i_0$ ou seja $s_0(s_\infty/s_0 - 1) - \frac{s_0}{R_0} \ln \frac{s_\infty}{s_0} = i_0$
- Caso $R_0 \gg 1$ e $s_0 + r_0 = n$. Então $\frac{s_\infty}{s_0} \ll 1$ e $-s_0 - \frac{s_0}{R_0} \ln \frac{s_\infty}{s_0} = i_0$
  $\frac{s_0}{R_0} \ln \frac{s_\infty}{s_0} = n$ e $s_\infty = s_0 \exp(-\frac{R_0}{s_0} n)$

$R_0 = s_0 \frac{\beta}{\gamma}$

Trajetórias de fase

de Murray (Mathematical Biology, vol 1)

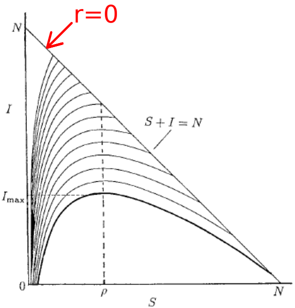


Figure 10.1. Phase trajectories in the susceptibles (S)-infectives (I) phase plane for the *SIR* model epidemic system (10.1)–(10.3). The curves are determined by the initial conditions $I(0) = I_0$ and $S(0) = S_0$. With $R(0) = 0$, all trajectories start on the line $S + I = N$ and remain within the triangle since $0 < S + I < N$ for all time. An epidemic situation formally exists if $I(t) > I_0$ for any time $t > 0$; this always occurs if $S_0 > \rho(= a/r)$ and $I_0 > 0$.

Figure: trajetórias de fase

Valores de pico

número de infecciosos $i(t)$ começa a diminuir para $t > t_{pico}$ e $R(t) \le 1$

- $R_{tpico} = 1 = s_{pico} \frac{\beta}{\gamma} = \frac{s_{pico}}{s_0} R_0$
  então $s_{pico} = s_0 / R_0$
- $i_{pico} = -f(s_{pico}) + i_0 = -s_0 \left(\frac{1}{R_0} - 1 - \frac{\ln R_0}{R_0} \right) + i_0$
- t_{pico}
  $\frac{ds}{dt} = -\beta\, s\, i$ então $-\int_{t_0}^{t_{pico}} \frac{\frac{ds}{dt}}{\beta\, s\, i(s)} dt = \int_0^{t_{pico}} dt$
  $t_{pico} = \frac{1}{\beta} \int_{s_0}^{s_{pico}} \frac{ds}{s\,(f(s) - i_0)}$

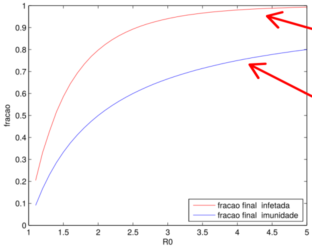
imunidade de grupo

$N_I = i + r = n - s$

- No pico o número de infetados é $N_I = n - s_{pico}$ então $n_I = \frac{N_I}{n} = 1 - \frac{s_{pico}}{n}$
- Dado que $s_{pico} = \frac{s_0}{R_0}$ temos $n_I = 1 - \frac{s_0}{R_0 n}$
- Como $s_0 \simeq n$ temos para a fração total de infetados $n_I = 1 - \frac{1}{R_0}$
- Se pelo menos uma fração $n'_I > n_I$ tiver imunidade natural ou por vacinação não haverá nova epidemia pois $s'_0 = (1 - n'_I)n < (1 - n_I)n = \frac{n}{R_0} \simeq \frac{\gamma}{\beta}$ e $R'_0 = s'_0 \frac{\beta}{\gamma} < 1$.

Fração final de infetados e Imunidade de grupo

$i_0 = 1 ; \; s_0 = n - 1$



nI

$1 - \frac{s_\infty}{n} \simeq 1 - e^{-R_0}$

$1 - \frac{1}{R_0}$

Figure: Fração final da população infetada e fração para imunidade de grupo

Fração de infeciosos no pico

i_{pico}

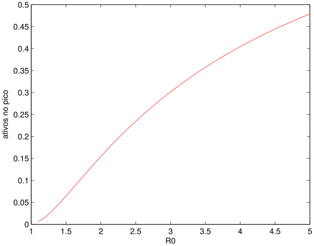


Figure: Fração de infeciosos no pico em função de R_0

Caso de estudo

Epidemia de gripe em colégio interno do norte da Inglaterra, com 763 alunos com $i_0 = 1$ descrito no livro de Murray (Mathematical Biology, vol 1)

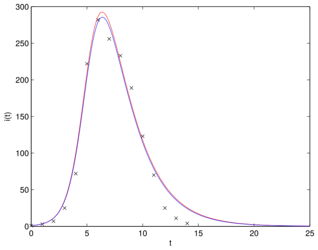


Figure: Infeciosos em função do tempo. Um infecioso é um aluno acamado

Ajuste ao modelo e trajetória de fase

- A curva $i(t)$ é conhecida por curva epidémica.
- Ajuste com $i_0 = 1$ e $s_0 = 762$ fornece $\beta = 2.18 \times 10^{-3}/dia$ e $\gamma = 0.441/dia$

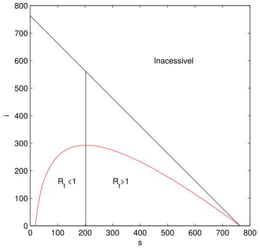


Figure: Trajetória de fase do exemplo

Caso de estudo, R_t

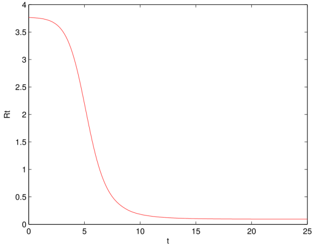


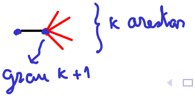
Figure: Variação no tempo de R_t

Redes aleatórias

- Rede de Erdos-Renyi com número de arestas fixo
  n = número de vértices. m = número de arestas entre pares de vértices
  De entre as $n(n-1)/2$ possíveis arestas (sem arestas múltiplas e auto-arestas) escolher m com probabilidade uniforme. O número total de redes possíveis é $\Omega = \begin{pmatrix} n(n-1)/2 \\ m \end{pmatrix}$.
- Grau de um vértice, k = número de arestas de um vértice.
  - Grau médio de um vértice= $c = \langle k \rangle = 2\frac{m}{n}$.
- Rede de Erdos-Renyi com probabilidade de cada aresta p.
  Cada aresta existe com probabilidade p. Temos
  $\langle m \rangle = p\, n(n-1)/2$
  - Grau médio de um vértice= $c = \langle k \rangle = p\,(n-1)$

Distribuição de grau

- Cada uma das $n-1$possíveis arestas de um vértice existe com probabilidade, p. O seu número segue uma distribuição binomial. Para n grande a distribuição binomial aproxima-se de uma distribuição de Poisson, $p_k = \frac{e^{-c}c^k}{k!}$
- Se queremos c independente de n devemos ter p proporcional a $1/n$.
- $p = 1$ é a rede totalmente conectada.
- Distribuição do grau de excesso de um vizinho, q_k (redes sem correlação)
  o grau de excesso de um vizinho é $k \geq 0$, $q_k \sim (k+1)\, p_{k+1}$
  porque podemos ser vizinhos dele de $k+1$ maneiras diferentes.
  Então $q_k = \frac{(k+1)\, p_{k+1}}{\sum_k k\, p_k}$



Componente Gigante

- Uma componente é um conjunto de vértices para os quais existe pelo menos um caminho de arestas entre qualquer par de vértices do conjunto.
- Uma componente gigante (GC) é uma componente em que o seu tamanho (em número de vértices) cresce com o tamanho da rede, n ou cujo tamanho é comparável com o tamanho da rede
- S é a fração do número total de vértices na componente gigante.
  $u =$probabilidade de um vértice não pertencer a GC.
  Considerando um vértice a probabilidade de não pertencer a GC é $u = ((1-p)+pu)^{n-1}$: cada uma das n-1 arestas não existe com probabilidade p e existe mas liga a um vértice que não pertence a GC. p = probabilidade de uma aresta existir
  $S = 1 - u = 1 - \exp(-cS)$

$$S = 1 - u = 1 - (1 - pS)^{n-1} \iff$$

$$1 - S = (1 - pS)^{n-1}$$

Como $p \approx \frac{c}{n}$ $\quad 1 - S = \left(1 - \frac{cS}{n}\right)^{n-1}$

$$e^{x} = \lim_{n \to \infty} \left(1 - \frac{x}{n}\right)^{n}$$

Então $\quad 1 - S = \exp(-cS)$ quando $n \to \infty$

Componente Gigante

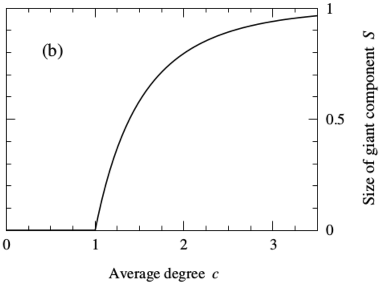


Figure: S em função de c