Uma introdução aos grafos de infecção

Priscila Cardoso Calegari

Departamento de Informática e Estatística

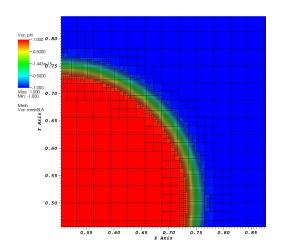
Abril de 2024

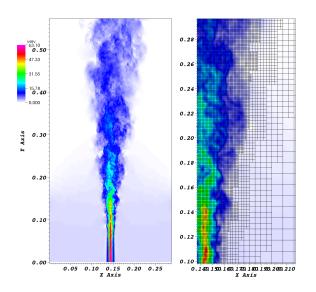


Sobre o que vamos conversar

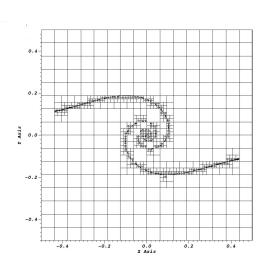
- Motivação.
- Fundamentos.
- Modelo matemático.
- Métodos Numéricos.
- \bullet Grafos.
- Experimentos numéricos.

- A área da Computação Científica se refere a um conjunto de algoritmos, técnicas e teorias usadas para resolver problemas da ciência e da engenharia com o auxílio de um computador.
- Problemas de aplicação: Engenharia aerospacial, Engenharia Mecânica, Engenharia Elétrica, Engenharia Química, Astronomia, Meteorologia, Biologia, Ciências Médicas, . . .



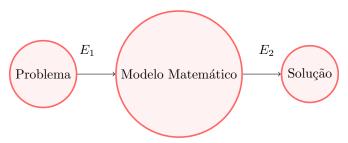


https://www.youtube.com/watch?v=DkrP-IrPydM



https://www.youtube.com/watch?v=CKUIBw1SKHI

Esquema do processo de solução:



 E_1 - Modelagem (Formulação matemática) do problema: O objetivo é obter um conjunto de equações e relações que represente da maneira mais conveniente o problema de interesse.

 ${\cal E}_2$ - Etapa de solução, aqui obtida por meio de métodos numéricos.

A validação do modelo pode nos levar a uma terceira etapa, caso a solução não seja satisfatória.

A taxa de variação de uma função $f(t), f: [0,T] \to \mathbb{R}$, é dada pela razão

$$\frac{f(t_1) - f(t_0)}{t_1 - t_0},$$

com $t_0, t_1 \in [0, T]$. Fazendo $\Delta t = t_1 - t_0$ e aplicando limite com $\Delta t \to 0$, temos a definição de derivada em t_0 ,

$$\frac{df(t_0)}{dt} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{f(t_0 + \Delta t) - f(t_0)}{\Delta t}.$$
 (1)

Dizemos que a função f é derivável em [0,T] se o limite (1) existe para todo $t \in [0,T]$. A derivada de f também denotada por f'(t).

Vamos estudar um método para aproximar derivada em um ponto t_0 .

- Um **algoritmo** é um processo sistemático para a resolução de um problema.
- O processo de desenvolvimento de algoritmos é importante para problemas a serem resolvidos em um computador.
- Um algoritmo computa uma saída (a resposta de um problema), a partir de uma entrada (as informações inicialmente conhecidas), que permitem determinar a solução do problema.
- Durante o processo de computação o algoritmo manipula dados gerados a partir de sua entrada, por meio de instruções.
- Um algoritmo implementado em uma linguagem de programação é o que chamamos de programa.
- Um **programa** é uma sequência de instruções que especificam como executar uma computação.

A estrutura básica de um programa em diferentes linguagens de programação consiste em:

- Entrada: os dados de entrada são inicializados, recebidos por meio dos dispositivos de entrada ou de um arquivo.
- Saída: A reposta fornecida pelo algoritmo é transmitida para os dispositivos de saída ou salva em um arquivo.
- Lógica e aritmética: operações aritméticas e lógicas que resolvem o problema de interesse.
- Condicional: verifica se uma condição é satisfeita antes de executar uma sequência de instruções.
- Repetição: executa repetidas vezes um bloco de instruções, até que uma condição deixe de ser satisfeita.

- Variáveis simples e estruturas de dados, como vetores, armazenam dados. Os elementos de vetores são identificados por índices.
- A atribuição de valores é indicada pelo símbolo ←.
- As seguintes declarações são empregadas para representar:
 - ► Condicional:
 se ...então
 se ...então ...caso contrário
 - ► Repetição: enquanto ... faça para ... faça

Queremos verificar se uma pessoa pode doar sangue. Para isso ela precisa ter no mínimo 18 anos e pesar no mínimo 50 kg.

Algoritmo 1: Teste 1 para doação de sangue

Receba idade e peso

se $idade \ge 18 \ e \ peso \ge 50 \ {\bf então}$

Devolva "Possível Doadora";

senão

Devolva "Não satisfaz as condições"

O Algoritmo 2 recebe dois números inteiros a e b, com $b \neq 0$ e devolve o quociente da divisão a/b.

Algoritmo 2: Divisão inteira

Receba a e b

$$c \leftarrow 0$$

enquanto $a \geq b$ faça

$$c \leftarrow c + 1$$
$$a \leftarrow a - b$$

Devolva c

Vamos fazer a simulação do algoritmo com a entrada a=13 e b=4.

Exercício: Escreva um algoritmo que dado um número inteiro $(n \ge 0)$ devolva a soma de seus algarismos.

Exemplo: Para n=123 seu algoritmo deve devolver 6.

Dica: utilize o operador % resto da divisão.

Mais um exemplo ...

O Algoritmo 3 recebe uma sequência e inverte a ordem dos termos dela.

Algoritmo 3: Inversão de uma sequência

RecebaSum vetor de tamanho n+1

para
$$i=0,\ldots,\lfloor n/2\rfloor$$
 faça

$$temp \leftarrow S[i]$$

$$S[i] \leftarrow S[n-i]$$

$$S[n-i] \leftarrow \text{temp}$$

Vamos fazer a simulação do algoritmo com a entrada S = [-1, 2, 0, 3, 7].

Exercício: Escreva um algoritmo que dado um número inteiro $(n \ge 0)$ verifique se n é primo.

Exemplo: Para n = 4 seu algoritmo deve devolver 0.

Para n = 7 seu algoritmo deve devolver 1.

Um primeiro modelo de **crescimento populacional** considera que a taxa de crescimento de uma população é proporcional a população total,

$$\frac{P(t_0 + \Delta t) - P(t_0)}{\Delta t} = kP(t_0), \tag{2}$$

sendo k uma constante de proporcionalidade e $P(t_0) = P_0$ a população inicial. Aplicando limite quando $\Delta t \to 0$, obtemos um problema de valor inicial,

$$\frac{dP}{dt} = kP(t), \quad t \in [t_0, t_n], P(t_0) = P_0.$$
(3)

A solução desse problema é $P(t) = P_0 e^{kt}$, crescimento exponencial.

Aplicação:

Uma espécie de bactéria, e condições ideais, cresce a uma taxa de 30% a cada 1 hora. Supondo que a população inicial é de 100, qual a quantidade de bactérias após 2 horas?

Um segundo modelo de **crescimento populacional** considera que a população cresce até um limite, tende a estabilizar. Assim a taxa de crescimento é dada por,

$$\frac{dP}{dt} = k \left(1 - \frac{P(t)}{M} \right) P(t), \quad t \in [t_0, t_n], P(t_0) = P_0, \tag{4}$$

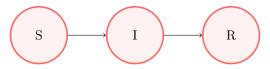
sendo k uma constante positiva e M a capacidade máxima populacional. Inicialmente $P(t) \ll M$, note que a medida que P(t) se aproxima de M, a taxa de crescimento diminui.

Aplicação:

Considere o exemplo anterior com uma capacidade populacional ${\cal M}=950.$

- Considere uma vila em que uma ou mais pessoas estão com uma infecção respiratória, como a gripe. A doença pode se espalhar rapidamente ou terminar logo. Nosso interesse é estimar, e de certa forma controlar, quantas pessoas serão acometidos pela doença.
- \bullet Vamos dividir as pessoas em grupos, S (Suscetíveis), I (Infectados) e R (Removidos).

Dinâmica de espalhamento da doença.



- O parâmetro β é a taxa de infecção.
- \bullet O parâmetro γ é a taxa de recuperação.

Estimativa do parâmetro β :

- Durante um intervalo de tempo T foram contabilizados m encontros entre pares S e I, dentre os n possíveis pares de pessoas dos dois grupos. A probabilidade por unidade de tempo é $\mu = m/(nT)$.
- O valor esperado de encontros S e I será μSI . Apenas uma fração destes encontros resultará em uma pessoa infectada $p/e\mu$, sendo p o número de infectados a cada e encontros. Assim, $\beta=(p/e)\mu$.

Estimativa do parâmetro γ :

- Durante um intervalo de tempo T, m pessoas de cada n infectados se recuperam.
- Assim, $\gamma = m/(nT)$ é a probabilidade que um indivíduo se recupere em um intervalo de tempo.

 \bullet A taxa de diminuição de pessoas em S, no intervalo Δt é dada por,

$$\frac{S(t_k + \Delta t) - S(t_k)}{\Delta t} = -\beta S(t_k) I(t_k). \tag{5}$$

 $\bullet\,$ A taxa de variação de pessoas no grupo I é dada por,

$$\frac{I(t_k + \Delta t) - I(t_k)}{\Delta t} = \beta S(t_k)I(t_k) - \gamma I(t_k).$$
 (6)

• A taxa de variação de pessoas no grupo R é dada por, a variação de indivíduos no grupo I é dada por,

$$\frac{R(t_k + \Delta t) - R(t_k)}{\Delta t} = \gamma I(t_k), \tag{7}$$

com $t_k \in [t_0, t_n]$ e as condições iniciais $S(t_0) = S_0$, $I(t_0) = I_0$ e $R(t_0) = R_0$.

Quando fazemos, $\Delta t \to 0$ em (5), (6) e (7), obtemos as taxas de variação instantânea, dadas por

$$\frac{dS}{dt} = -\beta SI,$$

$$\frac{dI}{dt} = \beta SI - \gamma I,$$

$$\frac{dR}{dt} = \gamma I,$$
(8)

sendo S, I e R funções em $t \in [t_0, t_n]$, as incógnitas do problema e S_0, I_0 e R_0 as condições iniciais do problema.

Dado um problema de valor inicial,

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y),$$

com f(t,y) e $y(t_0)$ dados. Queremos determinar y(t), com $t \in [t_0,t_n]$

- Primeiro passo é discretizar o intervalo $[t_0, t_n]$, ou seja, dividir o intervalo em n subintervalos igualmente espaçados (de tamanho Δt), com $t_0 < t_1 < \ldots < t_n$.
- Para cada t_k vamos obter uma aproximação y_k de $y(t_k)$.
- O Método de Euler é definido por,

$$\begin{cases} y_0 = y(t_0), \\ y_{k+1} = y_k + \Delta t f(t_k, y_k), \end{cases}$$

$$\tag{9}$$

com k = 0, 1, 2, ...

Algoritmo 4: Método de Euler

Dados y_0 , t_0 , t_n e f(t, y)Receba n (número de subintervalos)

$$\Delta t \leftarrow (t_n - t_0)/n$$

$$t[0] \leftarrow t_0$$

$$\mathbf{para} \ k = 0, \dots, n-1 \ \mathbf{faça}$$

$$\mid t[k+1] \leftarrow t[k] + \Delta t$$

$$y[k+1] \leftarrow y[k] + \Delta t f(t[k], y[k])$$

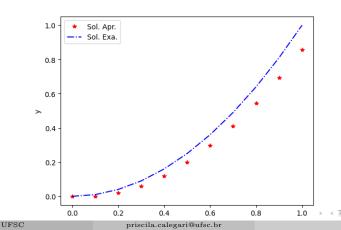
- A ordem do erro global E do Método de Euler é $E=\mathrm{O}(\Delta t).$ Ou seja, $E\leq C\Delta t.$
- Vamos verificar se o método está implementado corretamente, resolvendo um problema com solução conhecida.

Considere o problema,

$$\begin{cases} y(0) &= 0, t \in [0, 1] \\ \frac{dy}{dt} &= y^2(t) + 2y(t) - t^4, \end{cases}$$
 (10)

23 / 68

cuja solução exata é $y(t)=t^2.$ Vamos simular o Algoritmo 4 com $\Delta t=0.1.$



A tabela apresenta o erro em t = 1 para diferentes valores de n.

n	Erro	Razão
8	0.17472813578147073	_
16	0.09473515363834206	1.844
32	0.04966799130253441	1.907
64	0.02548427415316057	1.949
128	0.012915648378055478	1.973

Verificação Numérica da ordem de aproximação: $E(n) = O(\Delta t^p)$ e $E(2n) = O((\Delta t/2)^p)$

$$\frac{E(n)}{E(2n)} \approx \frac{\Delta t^p}{\frac{\Delta t^p}{2^p}} = 2^p$$

Exemplo

https://github.com/pccalegari/EHH/blob/main/exemplo_euler.ipynb

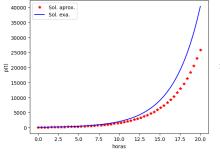
Crescimento populacional: Problema 1

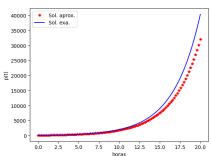
$$\frac{dP}{dt} = kP(t), \quad t \in [t_0, t_n], P(t_0) = P_0.$$
(11)

Dados $k=0.3,\,P_0=100$ e $t_n=50.$ O método de Euler aplicado a esse problema é dado por,

$$\begin{cases}
P_0 = 100, \\
P_{i+1} = P_i + \Delta t(kP_i), & i = 0, 1, \dots, n-1.
\end{cases}$$
(12)

Intervalo $[t_0, t_n]$ dividido em 50 e 100 subintervalos, respectivamente.



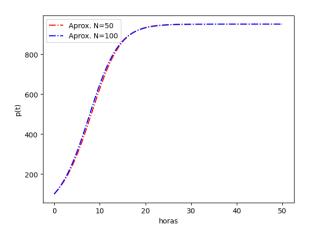


Crescimento populacional: Problema 2

$$\frac{dP}{dt} = k \left(1 - \frac{P(t)}{M} \right) P(t), \quad t \in [t_0, t_n], P(t_0) = P_0.$$
 (13)

Dados k = 0.3, $P_0 = 100$, M = 950 e $t_n = 20$. O método de Euler aplicado a esse problema é dado por,

$$\begin{cases} P_0 = 100, \\ P_{i+1} = P_i + \Delta t \left(1 - \frac{P_i}{M}\right) k P_i, & i = 0, 1, \dots, n-1. \end{cases}$$
 (14)



Espalhamento de uma doença: Modelo SIR

$$\frac{dS}{dt} = -\beta SI, \ S_0 = S(t_0),$$

$$\frac{dI}{dt} = \beta SI - \gamma I, \ I_0 = I(t_0),$$

$$\frac{dR}{dt} = \gamma I, \ R_0 = R(t_0).$$
(15)

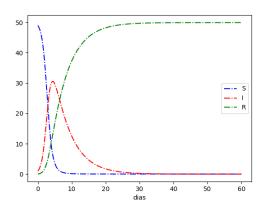
Aplicando o Método de Euler em (15) obtemos,

$$S_{k+1} = S_k + \Delta t(-\beta S_k I_k),$$

$$I_{k+1} = I_k + \Delta t(\beta S_k I_k - \gamma I_k),$$

$$R_{k+1} = R_k + \Delta t \gamma I_k.$$
(16)

Condições iniciais $S_0=49,\ I_0=1$ e $R_0=0,\ t_n=60$ dias. Os parâmetros $\beta=10/(40\cdot 8\cdot 24)$ e $\gamma=3/(15\cdot 24)$. Ou seja, em 24 horas de 40 suscetíveis e 8 infectados passou-se a 30 e 18, respectivamente. Além disso, de 15 indivíduos infectados, 3 se recuperaram durante um dia.



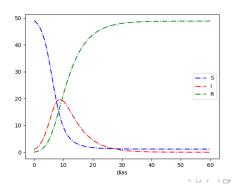
Incluindo um fator de isolamento de α , separamos cada grupo em dois: $\dot{S} = \alpha S_k$ e $\ddot{S} = (1 - \alpha)S_k$, pessoas que atendem e que não atendem o isolamento, respectivamente. O que muda no modelo,

$$S_{k+1} = S_k + \Delta t(-\beta \ddot{S}\ddot{I}),$$

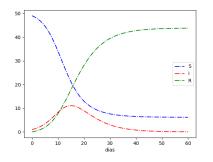
$$I_{k+1} = I_k + \Delta t(\beta \ddot{S}\ddot{I} - \gamma I_k),$$

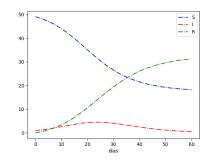
$$R_{k+1} = R_k + \Delta t \gamma I_k.$$
(17)

Com $\alpha = 30\%$, o pico de aproximadamente 20 infectados ocorre no dia 8.

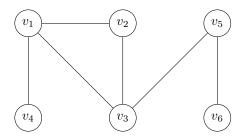


O pico de aproximadamente 11 infectados (com 45% de isolamento) ocorre no dia 14. Já o pico de aproximadamente 5 infectados (com 55%) ocorre no dia 23.



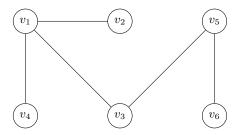


- Um **Grafo** é definido como o par de conjuntos G = (V, A).
- O conjunto de vértices $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$.
- O conjunto de arestas $A \subset \{v_i v_j, \text{ tal que } v_i, v_j \in V\}$. Cada aresta é definida como um par de vértices.

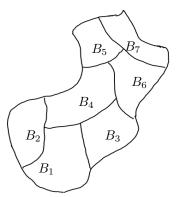


$$V = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5, v_6\} \text{ e } A = \{v_1v_2, v_1v_3, v_1v_4, v_2v_3, v_3v_5, v_5v_6\}.$$

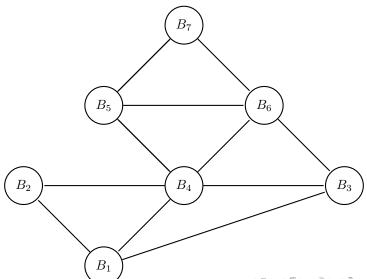
- Um caminho entre dois vértices v_i e v_j é uma sequência de vértices e arestas que conecta v_i a v_j .
- Um **grafo é conexo** quando existe um caminho entre quaisquer dois vértices do grafo.
- $\bullet\,$ Um ciclo em um grafo é um caminho fechado que sai de v_i e retorna a $v_i.$
- Um grafo é uma **árvore** se ele é conexo e não contém ciclos.
- Uma **árvore geradora** de um grafo conexo G é um subgrafo de G que contém todos os vértices de G e é uma árvore.



Vamos representar um mapa por meio de um grafo.



Cada bairro será representado por um vértice e bairros vizinhos são conectados por arestas.



- \bullet Os grupos são divididos \dot{S} (atendem o isolamento) e \ddot{S} (não atendem o distanciamento).
- Aos grupos \dot{S} , \dot{I} e \dot{R} incluimos um fator de movimentação λ .
- A interação entre os grupos só ocorre entre bairros vizinhos.
- Para cada vértice i, temos um sistema discreto

$$\begin{array}{ll} S_{k+1}^{i} &= S_{k}^{i} + \Delta t(-\beta)X_{k}^{i}, \\ I_{k+1}^{i} &= I_{k}^{i} + \Delta t(\beta X_{k}^{i} - \gamma I_{k}^{i}), \\ R_{k+1}^{i} &= R_{k}^{i} + \Delta t(\gamma I_{k}^{i}), \end{array} \tag{18}$$

sendo βX_k^i contabiliza os infectados do vértice i dentre os possíveis encontros entre infectados e suscetíveis que circulam no vértice i.

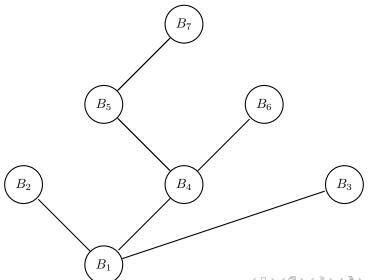
O total de pessoas de cada grupo em t_k é dado por,

$$S_k = \sum_{i=1}^{N_v} S_k^i, \quad I_k = \sum_{i=1}^{N_v} I_k^i, \quad R_k = \sum_{i=1}^{N_v} R_k^i, \tag{19}$$

sendo N_v o número de vértices do grafo.

(ロ) (固) (量) (量) 重 り(())

Estratégias para conter o espalhamento: Remoção de arestas do grafo de infecção, sem deixá-lo desconexo, realizada manualmente.



- Os algoritmos de busca em grafos podem ser utilizados para obter árvores geradoras. Tais algoritmos visitam vértices em uma ordem definida. A partir disso, podemos criar a árvore ao conectar vértices visitados ao vértice visitado na etapa anterior.
- Na Busca em Profundidade visitamos todos os vértices de um caminho até chegar ao final. A partir daí, voltamos por esse caminho, entrando em todos os outros caminhos que encontrarmos nessa volta. Ao entrar em um caminho, seguimos até não encontrarmos a saída.

Algoritmo 5: Busca em Profundidade

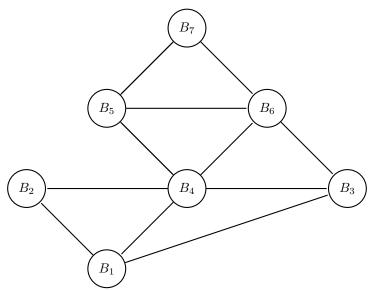
```
Explorar(Grafo G = (V, E), v \in V):

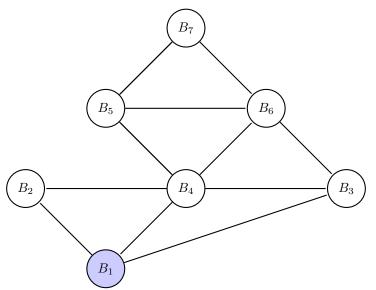
visitado(v) \leftarrow true

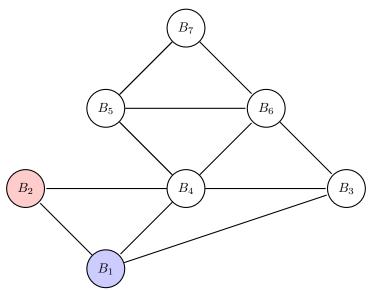
para cada vizinho u de v faça

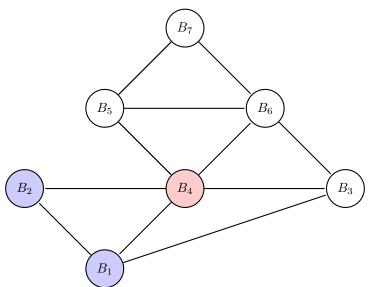
se não visitado(u) então

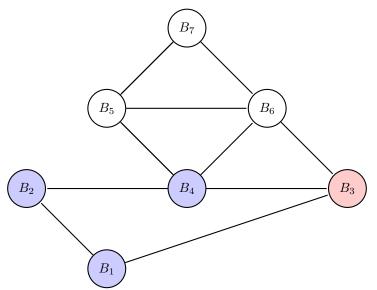
Explorar(u)
```

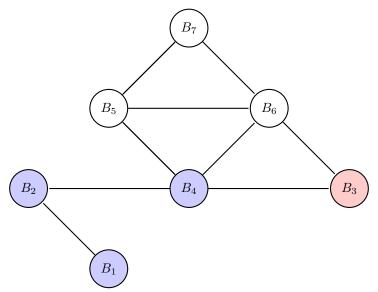


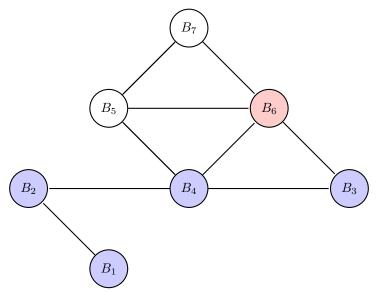


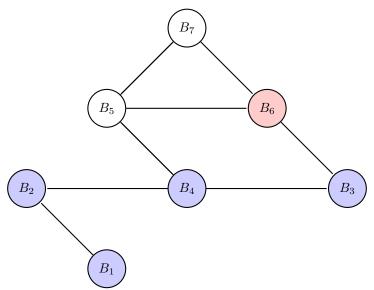


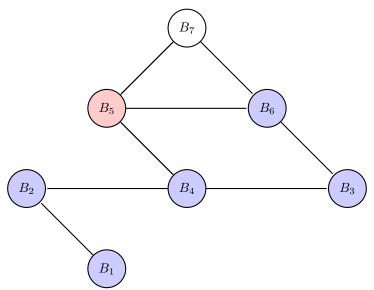


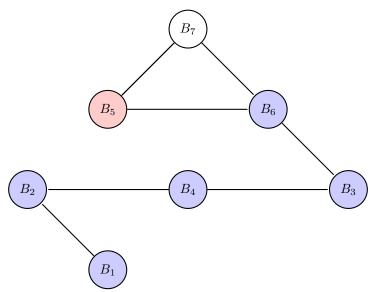


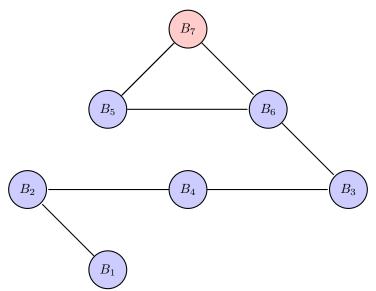


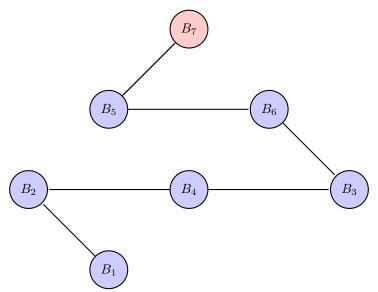


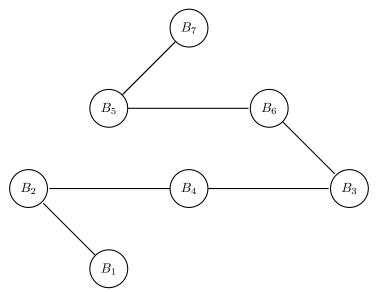








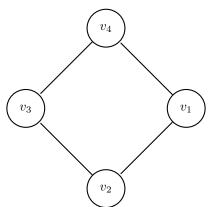




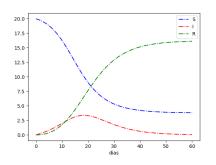
Experimento 1: Vila representada por um grafo com 4 vértices e sem isolamento.

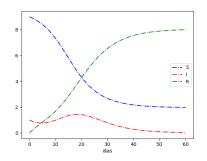
 v_1 : $S_0 = 20$, $I_0 = 0$ e $R_0 = 0$. v_2 : $S_0 = 10$, $I_0 = 1$ e $R_0 = 0$.

 v_3 : $S_0 = 10, I_0 = 0$ e $R_0 = 0$. v_4 : $S_0 = 10, I_0 = 0$ e $R_0 = 0$.

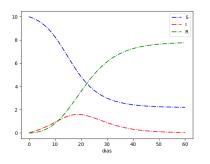


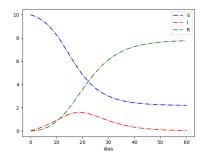
Evolução dos vértices 1 e 2:



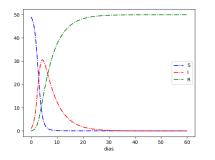


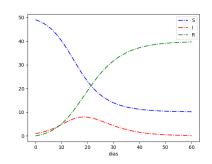
Evolução dos vértices 3 e 4:





Comparação entre o experimento com os valores totais.

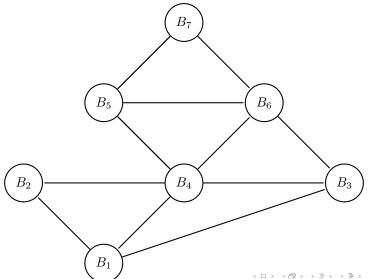




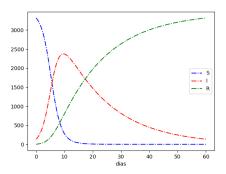
Pico de infectados: 30 no dia 4 e 8 no dia 18.

Experimento 2:

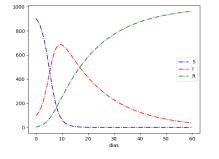
• O mapa com 7 bairros com $\alpha = 30\%$.

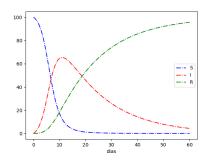


- Os parâmetros β contabilizando a probabilidade de 0.2 encontros e 1 infectado a cada 100 encontros e γ contabilizando 6 recuperados a cada 100 infectados por dia.
- Os fatores de movimentação: $\lambda_S = 0.4$, $\lambda_I = 0.1$ e $\lambda_R = 0.6$.
- $S_0 = 3315$, $I_0 = 134$ e $R_0 = 2$ distribuidos pelos 7 vértices.
- O pico de aproximadamente 2400 infectados ocorreu no dia 9.



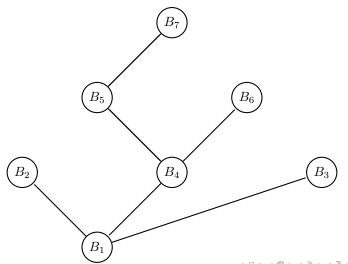
- Vértice 4: $S_0 = 900$, $I_0 = 98$ e $R_0 = 2$. Com $I_p \approx 686$ no dia 9.
- Vértice 7: $S_0 = 100$, $I_0 = 0$ e $R_0 = 0$. Com $I_p \approx 65$ no dia 11.



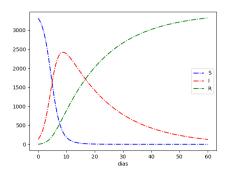


Experimento 3:

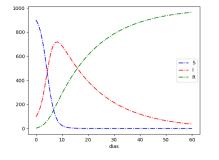
• Árvore geradora (manual) do grafo associado ao mapa com 7 bairros e mesmos dados do experimento 2.

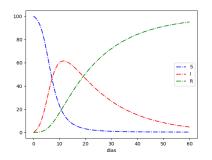


• O pico de aproximadamente 2420 infectados ocorreu no dia 8.



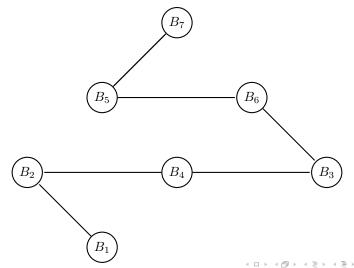
- Vértice 4: $S_0 = 900$, $I_0 = 98$ e $R_0 = 2$. Com $I_p \approx 717$ no dia 8.
- Vértice 7: $S_0 = 100$, $I_0 = 0$ e $R_0 = 0$. Com $I_p \approx 61$ no dia 11.



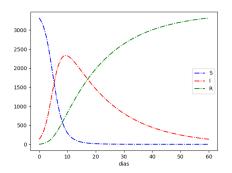


Experimento 4:

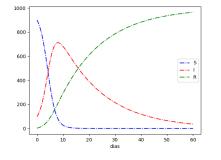
• Árvore geradora (busca em profundidade) do grafo associado ao mapa com 7 bairros e mesmos dados do experimento 2.

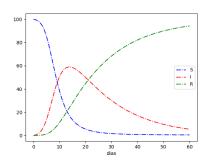


• O pico de aproximadamente 2330 infectados ocorreu no dia 9.



- Vértice 4: $S_0 = 900$, $I_0 = 98$ e $R_0 = 2$. Com $I_p \approx 711$ no dia 8.
- Vértice 7: $S_0=100,\ I_0=0$ e $R_0=0.$ Com $I_p\approx 58$ no dia 13.





Considerações Finais

- Existem outros métodos para aproximar equações envolvendo taxas de variação.
- Existem outros modelos para o espalhamento de doenças, inclusive os que incluem a vacinação.
- O estudo de grafos e sua topologia, na dinâmica do espalhamento pode auxiliar na tomada de decisões.
- Espero que o minicurso tenha despertado o interesse nas áreas de Computação Científica e Análise Numérica.
- Muito obrigada pela atenção!
- Dúvidas?

Referências

- [1] Franco, A. J. P. Epidemic models with restricted circulation and social distancing on some network topologies. ACRI Cellular Automata for Research and and Industry, 2021.
- [2] Caninas, P. G., Calegari, P. C. e Franco, Á. Um estudo sobre árvores geradoras como alternativas conexas para o controle de doença em um grafo de infecção. Simpósio Brasileiro de Pesquisa Operacional, 2023.
- [3] Linge, S. e Langtangen, H. P. Programming for computations Python: A gentle introduction to numerical simulations with Python. Springer Nature, 2016.
- [4] Tavoni, R. e Oliveira, Z. G. O. Os modelos de crescimento populacional de Malthus e Verhulst, uma motivação para o ensino de logaritmos e exponenciais. Revista Eletrônica Paulista de Matemática, v2. n2., 2013.
- [5] Minimization Infection in a Topology using Mathematical Programming. Ataide, C. W., Castellucci, P. B., Franco, A. J. P. e Santiago, R. VII Encontro de Teoria da Computação, 2022.

Referências

- [6] Feofiloff, P. Kohayakawa, Y. e Wakabayashi, Y. Uma introdução sucinta à teoria dos grafos, 2011.
- [7] Humes, A. F. P et al. Noções de cálculo numérico. McGrawHillP, 1984.
- [8] Szwarcfiter, J. L. e Markezon. Estruturas de Dados e seus Algoritmos. LCT, 2010.
- [9] Lima, E. L. Análise real, volume 1 ($6^{\underline{a}}$ edição). Coleção Matemática Universitária, 2002.
- [10] Morimoto, C. H. e de Pinha Jr, J. C. Introdução à Computação com Python: um curso interativo. https://panda.ime.usp.br/cc110/static/cc110/index.html.
- [11] Morimoto, C. H. e Hashimoto, R. F. Introdução à Ciência da Computação em C. https://www.ime.usp.br/~hitoshi/introducao/.