

UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS
INSTITUTO DE INFORMÁTICA

ARLINDO RODRIGUES GALVÃO FILHO

**Estratégias para alocação de recursos
de controle ótimo em cenários
estocásticos**

Goiânia
2019

**TERMO DE CIÊNCIA E DE AUTORIZAÇÃO PARA DISPONIBILIZAR
VERSÕES ELETRÔNICAS DE TESES E DISSERTAÇÕES
NA BIBLIOTECA DIGITAL DA UFG**

Na qualidade de titular dos direitos de autor, autorizo a Universidade Federal de Goiás (UFG) a disponibilizar, gratuitamente, por meio da Biblioteca Digital de Teses e Dissertações (BDTD/UFG), regulamentada pela Resolução CEPEC nº 832/2007, sem ressarcimento dos direitos autorais, de acordo com a Lei nº 9610/98, o documento conforme permissões assinaladas abaixo, para fins de leitura, impressão e/ou *download*, a título de divulgação da produção científica brasileira, a partir desta data.

1. Identificação do material bibliográfico: Dissertação Tese

2. Identificação da Tese ou Dissertação:

Nome completo do autor: Arlindo Rodrigues Galvão Filho

Título do trabalho: Estratégias para alocação de recursos de controle ótimo em cenários estocásticos

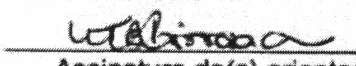
3. Informações de acesso ao documento:

Concorda com a liberação total do documento SIM NÃO¹

Havendo concordância com a disponibilização eletrônica, torna-se imprescindível o envio do(s) arquivo(s) em formato digital PDF da tese ou dissertação.


Assinatura do(a) autor(a)²

Ciente e de acordo:


Assinatura do(a) orientador(a)²

Data: 15 / 06 / 2019

¹ Neste caso o documento será embargado por até um ano a partir da data de defesa. A extensão deste prazo suscita justificativa junto à coordenação do curso. Os dados do documento não serão disponibilizados durante o período de embargo.

Casos de embargo:

- Solicitação de registro de patente;
- Submissão de artigo em revista científica;
- Publicação como capítulo de livro;
- Publicação da dissertação/tese em livro.

² A assinatura deve ser escaneada.

ARLINDO RODRIGUES GALVÃO FILHO

Estratégias para alocação de recursos de controle ótimo em cenários estocásticos

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciências da Computação em rede (UFG-UFMS), como requisito final para obtenção do título de Doutor em Computação.

Área de concentração: Ciência da Computação.

Orientador: Prof. Dra. Telma Woerle Lima Soares

Co-Orientador: Prof. Dr. Clarimar José Coelho

Goiânia
2019

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor, através do Programa de Geração Automática do Sistema de Bibliotecas da UFG.

Galvão Filho, Arlindo Rodrigues
Estratégias para alocação de recursos de controle ótimo em cenários estocásticos [manuscrito] / Arlindo Rodrigues Galvão Filho.
- 2019.
126 f.

Orientador: Profa. Dra. Telma Woerle Lima Soares; co-orientador Dr. Clarimar José Coelho.
Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Goiás, Instituto de Informática (INF), Programa de Pós-Graduação em Ciência da Computação em rede (UFG/UFMS), Goiânia, 2019.

1. Modelagem Estocástica. 2. Controle Ótimo. 3. Epidemiologia Matemática. 4. SIR, SIRC, MBI. 5. Redes Complexas. I. Woerle Lima Soares, Telma , orient. II. Título.

CDU 004



UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS

INSTITUTO DE INFORMÁTICA

ATA DE DEFESA DE TESE

Ata Nº **01/2019** da sessão de Defesa de Tese de **Arlindo Rodrigues Galvão Filho** que confere o título de Doutor em **Ciência da Computação**, na área de concentração em **Ciência da Computação**.

Aos dez dias do mês de junho de dois mil e dezenove, a partir das quatorze horas, na sala 257 do Instituto de Informática, realizou-se a sessão pública de Defesa de Tese intitulada "**Estratégias para alocação de recursos de controle empregando modelagens estocásticas**". Os trabalhos foram instalados pela Orientadora, Professora Doutora Telma Woerle de Lima Soares com a participação dos demais membros da Banca Examinadora: Professor Doutor Anderson da Silva Soares (INF/UFG), membro titular interno; Professor Doutor Wellington Santos Martins (INF/UFG), membro titular interno; Professor Doutor Gustavo Teodoro Laureano (INF/UFG), membro titular externo; Professor Doutor Rafael Viana de Carvalho (IFG - Anápolis), membro titular externo. Durante a arguição os membros da banca **fizeram** sugestão de alteração do título do trabalho para "**Estratégias para alocação de recursos de controle ótimo em cenários estocásticos**". A Banca Examinadora reuniu-se em sessão secreta a fim de concluir o julgamento da Tese tendo sido o candidato **aprovado** pelos seus membros. Proclamados os resultados pela Professora Doutora Telma Woerle de Lima Soares, Presidente da Banca Examinadora, foram encerrados os trabalhos e, para constar, lavrou-se a presente ata que é assinada pelos Membros da Banca Examinadora, aos **dez dias do mês de junho de dois mil e dezenove**.

TÍTULO SUGERIDO PELA BANCA



Documento assinado eletronicamente por **Telma Woerle De Lima Soares, Professor do Magistério Superior**, em 10/06/2019, às 17:18, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Rafael Vaiana de Carvalho, Usuário Externo**, em 10/06/2019, às 17:18, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Gustavo Teodoro Laureano, Professor do Magistério Superior**, em 10/06/2019, às 17:19, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Anderson Da Silva Soares, Professor do Magistério Superior**, em 10/06/2019, às 17:22, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Wellington Santos Martins, Professor do Magistério Superior**, em 10/06/2019, às 19:54, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://sei.ufg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **0697634** e o código CRC **1300AF69**.

Referência: Processo nº 23070.017156/2019-10

SEI nº 0697634

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador(a).

Arlindo Rodrigues Galvão Filho

Mestre em Engenharia Eletrônica e Computação pelo Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA, Bacharel em Engenharia de Computação pela Pontifícia Universidade Católica de Goiás - PUC Goiás. Experiência Tem experiência na área de Ciências da Computação, nas subáreas de Reconhecimento de Padrões, Aprendizado de Máquinas, Análise Multivariada e Mineração de Dados. Recentemente tem aplicado tais experiências nos temas: Epidemiologia Matemática, Química Analítica, *Big Data e Deep Learning*. Atualmente integra o corpo docente da Pontifícia Universidade Católica de Goiás - PUC Goiás.

*À minha esposa,
Carolina Rodrigues Andrade.*

Agradecimentos

É um pouco difícil citar todos que, ao longo desses anos no doutorado, colaboraram de alguma forma para mais este passo da minha vida. Mas agradeço:

À Capes/CNPq pelo auxílio provido no decorrer dos meus estudos.

Ao Rodrigo e todos da família Americas Health Labs, Filipe, Lucas, Rafael e Vinícius pelo apoio e ensinamentos.

À Energia Sustentável do Brasil - Usina de Jirau, pelo auxílio concedido via Projeto P&D - Pesquisa e desenvolvimento (PD-06631-0007/2018).

À Direção, Coordenação e aos colegas professores da PUC-Goiás, pelo apoio dado.

Aos amigos Heber Nogueira, Daniel Correia, Rafael Carvalho, Gustavo Teodoro e todos membros do Laboratório de Computação Científica, pelo apoio dado.

Aos meus orientadores e amigos, Profa. Telma Woerle, Prof. Clarimar José Coelho e Prof. Anderson Soares, pela orientação e confiança em mim depositada.

Aos meus pais, Arlindo e Lúcia, que são minhas maiores referências na vida.

À minha esposa Carolina pela paciência e carinho incondicional.

A todos vocês meu muito obrigado.

"Inteligência é a capacidade de se adaptar à mudança."

Stephen Hawking,
1942-2018.

Resumo

Galvão Filho, Arlindo Rodrigues. **Estratégias para alocação de recursos de controle ótimo em cenários estocásticos**. Goiânia, 2019. 126p. Tese de Doutorado. Instituto de Informática, Universidade Federal de Goiás.

A aplicação de modelos computacionais tem contribuído para o entendimento de diferentes dinâmicas, bem como possíveis estratégias de controle mais eficazes. Três exemplos amplamente utilizados são formulações determinísticas dos modelos compartimentais, modelos baseados em indivíduos e modelos baseados em redes complexas. Uma alternativa a tais modelos é uma abordagem estocástica, que possibilita a inserção de incertezas aos modelos proporcionando resultados mais realistas. Neste contexto, este trabalho propõe o uso de modelos compartimentais determinísticos para obtenção de políticas de controle ótimo, e posteriormente a avaliação de tal política aplicada em um cenário estocástico utilizando uma modelagem baseada em indivíduo equivalente. Também propõe três novas estratégias de controle baseado na dinâmica e topologia para modelos de redes complexas. Os modelos foram validados por meio de um estudo de caso baseado em dinâmicas epidemiológicas. As estratégias propostas resultaram em reduções significativas na quantidade de indivíduos infectados, otimizando o gasto de recursos. A inserção de incerteza nos modelos se mostrou positivo para a análise do comportamento médio das dinâmicas. Adicionalmente, foi proposto um modelo MBI paralelizado para ser processado em placas gráficas. Com este aprimoramento foi possível obter uma redução por um fator de vinte no tempo de processamento.

Palavras-chave

Modelagem Estocástica, Controle Ótimo, Epidemiologia Matemática, SIR, SIRC, MBI, Redes Complexas

Abstract

Galvão Filho, Arlindo Rodrigues. **Strategies for allocating optimal control resources in stochastic scenario**. Goiânia, 2019. 126p. PhD. Thesis. Instituto de Informática, Universidade Federal de Goiás.

Application of computational models has contributed to understanding of different dynamics as well as possible more effective control strategies. Three widely used examples are deterministic formulations of compartmental models, individuals based models, and complex networks based models. An alternative to such models is a stochastic approach, which allows uncertainties insertion to models, providing more realistic results. In this context, this work proposes use of deterministic compartmental models to obtain optimum control policies, and later evaluation of such policy applied in a stochastic scenario using a equivalent individual based model. It also proposes three new control strategies based on dynamics and topology in complex network models. To models validation, a case study based on epidemiological dynamics was done, in which proposed strategies resulted in significant reductions in number of infected individuals, optimizing resource spending. Insertion of uncertainty in models was positive for average behavior analysis of dynamics. In addition, a parallel MBI model was proposed to be processed in graphic cards. With this improvement it was possible to obtain a reduction by a factor of twenty in processing time.

Keywords

Stochastic Modeling, Optimal Control, Mathematical Epidemiology, SIR, SIRC, MBI, Complex Networks

Lista de Símbolos

S - Classe suscetíveis

$S(t)$ - Quantidade de indivíduos suscetíveis no tempo t

I - Classe infectados

$I(t)$ - Quantidade de indivíduos infectados no tempo t

$I_d(t)$ - Representação do indivíduo do modelo MBI no tempo t

R - Classe recuperados

$R(t)$ - Quantidade de indivíduos recuperados no tempo t

C - Classe *cross*-imunes

$C(t)$ - Quantidade de indivíduos *cross*-imune no tempo t

$D(t)$ - Variável associada ao efeito da campanha na modificação dos hábitos da população

$E(t)$ - Restrição isoperimétrica para inserção do controle

$F_n(t)$ - n -ésima característica de indivíduos $I_d(t)$

h - Limite superior para o total de recursos de controle a ser empregado

H - Hamiltoniano

$J(u)$ - Função de custo associado ao controle u

J^* - Função de custo ótimo

J_u - Custo associado ao uso dos dois controles

J_I - Quantidade de indivíduos infectados no decorrer do horizonte de tempo

ν - Taxa de mortalidade

N - Número de indivíduos da população

T - Símbolo de transposição

t - Tempo

t_0 - Tempo inicial

t_f - Tempo final

t_1 - Tempo de aplicação do primeiro pulso de controle

t_2 - Tempo de aplicação do segundo pulso de controle

t^* - Tempo ótimo

$\Delta(t)$ - Tempo entre as iterações

Q_p - Pares de indivíduos a serem considerados no processo de infecção

$Peso$ - Constante associada ao impacto do controle ($P_1 e P_2$)

P_{infec} - Probabilidade de infecção
 P_{rec} - Probabilidade de recuperação
 P_{mor} - Probabilidade de morte
 $P_{reinfect}$ - Probabilidade de re-infecção
 P_{cross} - Probabilidade de se tornar *cross*-imune
 P_{suscep} - Probabilidade de perda da imunidade
 P_{vac} - Probabilidade de vacinação
 P_{barr} - Probabilidade do uso do método de barreira
 $P(t)$ - Representação da população do modelo MBI no tempo t
 u^* - Controle ótimo
 u_v - Controle representando método de vacinação
 u_b - Controle representando método de barreira
 $U[0, 1]$ - Distribuição uniforme no intervalo $[0, 1]$
 $U(t)$ - Taxa temporal de aplicação de recursos de controle na campanha (normalizada entre 0 e 1)
 α - Taxa de perda da imunidade
 β - Taxa de transmissão da doença
 $\beta(t)$ - Taxa de transmissão sazonal da doença no tempo t
 β_0 - Valor máximo para a taxa de transmissão sazonal
 β_1 - Valor máximo para a taxa de transmissão sazonal
 γ - Taxa de recuperação
 ω - Frequência angular fixada para transmissão sazonal ($2\pi/t_f$)
 δ - Taxa de perda da imunidade
 μ - Taxa de natalidade
 σ - Taxa de re-infecção
 τ - Constante de tempo τ para o efeito da campanha na modificação dos hábitos
 λ - Multiplicadores de Lagrange
 $\dot{\lambda}$ - Equação de co-estado
 N - Quantidade de nós da rede
 M - Quantidade de conexões na rede
 v_i - i -ésimo nó da rede
 a_{ij} - Aresta que conecta o i -ésimo nó ao j -ésimo nó da rede
 \mathbf{A} - Matriz de adjacência
 k_i - Grau do i -ésimo nó da rede
 P_k - Grau de distribuição da rede
 B_i - Centralidade de intermediação do i -ésimo nó da rede
 σ_{jk} - Total de menores caminhos entre o j -ésimo nó e o k -ésimo nó da rede
 σ_{jk}^i - Quantidade de menores caminhos da rede passando pelo i -ésimo nó

p - Probabilidade de uma escolha aleatória de um nó da rede
 $\langle k \rangle$ - Grau médio da rede
 C_{N-1}^k - Coeficiente binomial da rede Erdős-Rényi
 m - Quantidade de nós inicialmente inseridos na rede Barabási-Albert
 Π - Probabilidade de um novo nó ser conectado à rede
 γ - Expoente livre associado à lei de potência das redes Barabási-Albert
 β - Taxa de transmissão da doença do modelo SI
 μ - Taxa de natalidade do modelo SI
 ν - Taxa de mortalidade do modelo SI
 $S(t)$ - Quantidade de indivíduos suscetíveis no passo de simulação t
 $I(t)$ - Quantidade de indivíduos infectados no passo de simulação t
 e - Estado atual do nó da rede (S ou I)
 Pop - Vetor de população contendo os nós da rede em seus respectivos estados e
 v^S - Nó suscetível
 v^I - Nó suscetível
 t - Passo de simulação do modelo SI
 t_0 - Passo inicial de simulação
 t_f - Passo final de simulação (Quantidade de iterações)
 pc - Probabilidade de contágio
 f - Foco da infecção
 f_p - Foco primário
 N_f - Conjunto de nó focos da rede
 r^p - Risco primário
 \mathbf{f} - Vetor dos nós focos primários da rede
 \mathbf{r}^p - Vetor de riscos primários dos respectivos nós focos primários da rede
 $\hat{P}_I(i)$ - Probabilidade de infecção do i -ésimo nó da rede
 $P^{DEG}(i)$ - Vetor da centralidade ponderada baseada na centralidade do grau do i -ésimo nó da rede
 $P^{BTW}(i)$ - Vetor da centralidade ponderada baseada na centralidade de intermediação do i -ésimo nó da rede
 T^a - Vetor da estratégia baseada em *tokens* com herança dos marcadores de todos os vizinhos infectados sem repetição
 T^b - Vetor da estratégia baseada em *tokens* com herança dos marcadores de todos os vizinhos infectados com repetição
 T^c - Vetor da estratégia baseada em *tokens* com herança dos marcadores de um dos nós infectantes aleatoriamente escolhido

Lista de Abreviaturas e Siglas

CUDA - *Compute Unified Device Architecture*

GPU - *Graphics Processor Unit*

MBI - Modelo Baseados em Indivíduo

MBI-C - Implementação em linguagem C do Modelo Baseados em Indivíduo

MBI-CUDA - Implementação paralela utilizando a API CUDA do Modelo Baseados em Indivíduo

MBI-SIR - Implementação do Modelo Baseados em Indivíduo equivalente ao Suscetível-Infetado-Recuperado

MBI-SIRC - Implementação do Modelo Baseados em Indivíduo equivalente ao Suscetível-Infetado-Recuperado-Cross-imune

SEIR - Suscetível-Exposto-Infetado-Recuperado

SI - Suscetível-Infetado

SIR - Suscetível-Infetado-Recuperado

SIRC - Suscetível-Infetado-Recuperado-Cross-imune

SIRS - Suscetível-Infetado-Recuperado-Susceptível

ER - Erdős-Rényi

BA - Barabási-Albert

HD - Maior Grau (*High Degree*) HB - Maior Intermediação (*High Betweenness*)

Sumário

Lista de Figuras	16
Lista de Tabelas	20
1 Introdução	21
2 Fundamentação teórica	24
2.1 Modelos compartimentais SIR	25
2.1.1 O modelo Suscetível-Infetado-Recuperado	25
2.1.2 O modelo Suscetível-Infetado-Recuperado- <i>Cross</i> -imune	27
2.2 Modelo baseado em indivíduos	28
2.2.1 MBI-SIR	28
2.2.2 Equivalência entre o SIR e o MBI-SIR	29
2.3 Modelos Baseados em Rede Complexa	30
2.3.1 Propriedades	30
Centralidade de grau	32
Centralidade de intermediação	32
2.3.2 Modelos de redes complexas	33
Redes Erdős-Rényi	33
Redes Barabási-Albert	34
Redes reais	35
3 Uma abordagem estocástica do modelo SIRC usando modelos epidemiológicos baseados em indivíduos	37
3.1 O MBI-SIRC	37
3.2 Equivalência entre o SIRC e o MBI-SIRC	39
3.3 Resultados da equivalência entre os modelos SIRC e MBI-SIRC	39
3.4 Considerações Finais para o uso do MBI-SIRC	41
4 Programação paralela CUDA para simulação de modelos epidemiológicos baseados em indivíduos	43
4.1 A equivalência entre o SIR e o MBI paralelo	43
4.2 A arquitetura das GPUs	44
4.3 Algoritmo MBI-CUDA	45
4.4 Resultados obtidos com MBI paralelo	47
4.4.1 Equivalência entre o algoritmo proposto e o SIR	47
4.4.2 Avaliação do ganho computacional fornecido pelo MBI-CUDA	48
4.5 Considerações finais para o uso do MBI paralelo	50

5	Otimização da alocação temporal de recursos para combate a epidemias com transmissão sazonal através de métodos de barreira	51
5.1	Dinâmica sazonal do contágio	52
5.2	Política de controle	52
5.3	Busca pelo controle ótimo	53
5.4	Material e Métodos	55
5.5	Resultados para epidemias com transmissão sazonal através de métodos de barreira	56
5.6	Considerações finais para epidemias com transmissão sazonal através de métodos de barreira	58
6	Avaliação do controle ótimo com abordagem estocástica utilizando modelos epidemiológicos baseados em indivíduos	60
6.1	Controle aplicado ao SIR	61
6.2	Adicionando o controle ao modelo MBI-SIR	63
6.3	Controle aplicado ao SIRC	65
6.4	Adicionando o controle ao modelo MBI-SIRC	68
6.5	Material e Métodos	69
6.5.1	Estudo de caso	69
6.5.2	Algoritmos empregados	70
6.5.3	Forma de análise dos resultados	71
6.6	Resultados para o uso do MBI para avaliação do controle ótimo	72
6.6.1	SIR	72
6.6.2	SIRC	77
6.7	Considerações finais para os modelos epidemiológicos baseados em indivíduos	80
7	Estratégias para controle de epidemias em redes empregando simulação de Monte Carlo	84
7.1	Dinâmicas de disseminação de epidemias	85
7.2	Estratégias de imunização	88
7.3	Estratégias propostas	88
7.3.1	Foco inicial e risco primário	88
7.3.2	Estratégia baseada em centralidade ponderada	89
7.3.3	Estratégia baseada em <i>tokens</i>	91
7.4	Material e Métodos	94
7.4.1	Algoritmos empregados	95
7.4.2	Forma de análise dos resultados	97
7.4.3	Estudo de caso	99
7.5	Resultados para controle de epidemias em redes com simulação de Monte Carlo	99
7.5.1	Caso nominal	99
7.5.2	Robustez quanto à mudança na topologia de rede	101
7.5.3	Inserindo risco primário	103
7.5.4	Robustez quanto ao descasamento dos riscos primários	103
7.6	Considerações finais para controle de epidemias em redes com simulação de Monte Carlo	106

8	Conclusão	108
8.1	Conclusões referentes à modelagem compartimental	108
8.2	Conclusões referentes à modelagem baseada em indivíduos	109
8.3	Conclusões referentes à modelagem baseada em redes complexas	110
8.4	Contribuições	110
8.5	Trabalhos futuros	111
	Referências Bibliográficas	114

Lista de Figuras

2.1	Representação esquemática do modelo SIR.	26
2.2	Representação esquemática do modelo SIRC.	28
2.3	Fluxograma para simulação do MBI-SIR.	29
2.4	Resultados da simulação confrontando SIR e o MBI-SIR.	31
2.5	<i>a)</i> Esquema de grafo simples <i>b)</i> Matriz de adjacência.	31
2.6	(a) Topologia de uma rede Erdős-Rényi com 100 nós e 200 conexões, em que o tamanho dos nós é proporcional ao seu grau na rede; juntamente com o seu histograma, na parte (b).	34
	(a) Rede Erdős-Rényi	34
	(b) Histograma	34
2.7	(a) Topologia de uma rede Barabási-Albert com 68 nós e 152 conexões, em que o tamanho dos nós é proporcional ao seu grau na rede; juntamente com o seu (b) histograma.	35
	(a) Rede Barabási-Albert	35
	(b) Histograma	35
2.8	(a) Topologia de uma rede de amizade em escolas americanas com 69 nós e 220 conexões, em que o tamanho dos nós é proporcional ao seu grau na rede; juntamente com o seu (b) histograma.	36
	(a) Rede real	36
	(b) Histograma	36
3.1	Fluxograma para simulação do MBI-SIRC.	38
3.2	Resultados das simulações do MBI-SIRC para $N = 1000$ e $\Delta t = 0,005$, para cada estado.	40
3.3	Resultados das simulações do MBI-SIRC para $N = 8000$ e $\Delta t = 0,0001$, para cada estado.	40
3.4	Resultados da simulação confrontando SIRC e o MBI-SIRC.	41
4.1	Esquema da arquitetura de uma GPU.	44
4.2	Resultados da simulação confrontando SIR, C e o CUDA.	48
4.3	Tempo médio por iteração - Comparativo entre MBI-C e MBI-CUDA.	49
5.1	Taxa de infecção sazonal.	52
5.2	Exemplos de controle com (a) um e (b) dois pulsos.	56
5.3	Resultado de três simulações contendo (a) os estados e (b) o controle ótimo para $\tau = 0$, (c) os estados para $\tau = 10$ utilizando o controle obtido em (b) e (d) estados e (e) o controle para $\tau = 10$.	58
5.4	Resultados da otimização empregando um pulso, para diferentes valores de τ .	59

6.1	Fluxograma para simulação do MBI.	63
6.2	Resultados da simulação confrontando SIR e o MBI considerando os controles.	64
	(a) Estados	64
	(b) Controle Ótimo	64
6.3	Comparação entre o modelo SIRC com e sem a utilização do controle .	65
6.4	Fluxograma para simulação do MBI.	68
6.5	Resultados da simulação confrontando SIRC e o MBI considerando os controles.	69
	(a) Estados	69
	(b) Controle Ótimo	69
6.6	Comparação entre o modelo SIRC com e sem a utilização do controle.	70
6.7	Resultados obtidos com a simulação do SIR utilizando somente o controle u_v .	73
6.8	Resultados obtidos com a simulação do SIR utilizando somente o controle u_v .	74
6.9	Resultados obtidos com a simulação do SIR utilizando somente o controle u_b .	74
6.10	Resultados obtidos com a simulação do SIR utilizando somente o controle u_b .	75
6.11	Resultados obtidos com a simulação do SIR utilizando os controles u_v e u_b .	76
6.12	Resultados obtidos com a simulação do SIR utilizando somente os controles u_v e u_b .	77
6.13	Resultados obtidos com a simulação do SIR utilizando os controle u_v e u_b .	77
6.14	Resultados obtidos com a simulação do SIRC utilizando somente o controle u_v .	78
6.15	Resultados obtidos com a simulação do SIRC utilizando somente o controle u_v .	79
6.16	Resultados obtidos com a simulação do SIRC utilizando somente o controle u_t .	80
6.17	Resultados obtidos com a simulação do SIRC utilizando somente o controle u_t .	81
6.18	Resultados obtidos com a simulação do SIRC utilizando os controles u_v e u_t .	81
6.19	Resultados obtidos com a simulação do SIRC utilizando somente os controles u_v e u_t .	82
6.20	Resultados obtidos com a simulação do SIRC utilizando os controle u_v e u_t .	83
7.1	Esquema e Matriz de adjacência de grafo simples com $[v_3^I]$ sendo o nó infectado.	86
7.2	Esquema do grafo com o resultado da simulação com $t = 1$	87
7.3	Esquema do grafo com o resultado da simulação com $t = 2$	87
7.4	Esquema de grafo simples com $N = 9$ e $M = 10$ com nó $[v_1^I]$ infectado	90
7.5	Exemplo da inicialização da rede para a estratégia baseada em <i>tokens</i> , com nó $[v_3^I]$ como foco inicial	92
7.6	Exemplo da rede para a estratégia baseada em <i>tokens</i> na primeira iteração	93
7.7	Exemplo da rede para a estratégia baseada em <i>tokens</i> na segunda iteração	93

7.8	Esquema da simulação: Fase de alocação	96
7.9	Esquema da simulação: Fase de Avaliação	97
7.10	Comparação entre a estratégia baseada na intermediação (<i>Betweenness</i>) e as estratégias propostas de centralidade ponderada (<i>P</i>) e baseada em <i>tokens</i> (<i>Token^a</i>) para o caso nominal. Resultados obtidos nas redes (a) Erdős-Rényi ($N = 100$ e $M = 200$), (b) Barabási-Albert ($N = 68$ e $M = 152$) e (c) Rede de amizades em escolas americanas ($N = 69$ e $M = 220$)	100
	(a) Erdős-Rényi	100
	(b) Barabási-Albert	100
	(c) Rede de estudantes	100
7.11	Comparação entre as três configurações da estratégia baseada em <i>tokens</i> para o caso nominal. Resultados obtidos nas redes (a) Erdős-Rényi ($N = 100$ e $M = 200$), (b) Barabási-Albert ($N = 68$ e $M = 152$) e (c) Rede de amizades em escolas americanas ($N = 69$ e $M = 220$).	101
	(a) Erdős-Rényi	101
	(b) Barabási-Albert	101
	(c) Rede de estudantes	101
7.12	Comparação entre a estratégia baseada na intermediação (<i>Betweenness</i>) e as estratégias propostas de centralidade ponderada (<i>P</i>) e baseada em <i>tokens</i> (<i>Token^a</i>) para o teste de robustez quanto a mudança de $a\% = 10$ arestas na topologia de rede. Resultados obtidos nas redes (a) Erdős-Rényi ($N = 100$ e $M = 200$), (b) Barabási-Albert ($N = 68$ e $M = 152$) e (c) Rede de amizades em escolas americanas ($N = 69$ e $M = 220$).	102
	(a) Erdős-Rényi	102
	(b) Barabási-Albert	102
	(c) Rede de estudantes	102
7.13	Comparação entre a estratégia baseada na intermediação (<i>Betweenness</i>) e as estratégias propostas de centralidade ponderada (<i>P</i>) e baseada em <i>tokens</i> (<i>Token^a</i>) inserindo dois focos iniciais com riscos primários de $R_p(1) = 0,6$ e $R_p(2) = 0,8$ para as fases de alocação e avaliação. Resultados obtidos nas redes (a) Erdős-Rényi ($N = 100$ e $M = 200$), (b) Barabási-Albert ($N = 68$ e $M = 152$) e (c) Rede de amizades em escolas americanas ($N = 69$ e $M = 220$).	104
	(a) Erdős-Rényi	104
	(b) Barabási-Albert	104
	(c) Rede de estudantes	104
7.14	Comparação entre a estratégia baseada na intermediação (<i>Betweenness</i>) e as estratégias propostas de centralidade ponderada (<i>P</i>) e baseada em <i>tokens</i> (<i>Token^a</i>) inserindo dois focos iniciais com riscos primários de $R_p(1) = 0,6$ e $R_p(2) = 0,8$ para a fase de alocação e $R_p(1) = 0,8$ e $R_p(2) = 0,6$ para fase de avaliação. Resultados obtidos nas redes (a) Erdős-Rényi ($N = 100$ e $M = 200$), (b) Barabási-Albert ($N = 68$ e $M = 152$) e (c) Rede de amizades em escolas americanas ($N = 69$ e $M = 220$).	105
	(a) Erdős-Rényi	105
	(b) Barabási-Albert	105

(c) Rede de estudantes	105
7.15 Comparação entre a estratégia baseada na intermediação (<i>Betweenness</i>) e as estratégias propostas de centralidade ponderada (<i>P</i>) e baseada em <i>tokens</i> (<i>Token^a</i>) inserindo dois focos iniciais com riscos primários de $R_p(1) = 0,6$ e $R_p(2) = 0,8$ para a fase de alocação e $R_p(1) = 0,9$ e $R_p(2) = 0,4$ para fase de avaliação. Resultados obtidos nas redes (a) Erdős-Rényi ($N = 100$ e $M = 200$), (b) Barabási-Albert ($N = 68$ e $M = 152$) e (c) Rede de amizades em escolas americanas ($N = 69$ e $M = 220$).	106
(a) Erdős-Rényi	106
(b) Barabási-Albert	106
(c) Rede de estudantes	106

Lista de Tabelas

4.1	Performance (em segundos) e o ganho	49
5.1	Resultado da otimização com um e dois pulsos para $\tau = [0, 5, 10, 15, 20]$	57
6.1	Valores de J_u e J_I obtidos com o SIR variando $Peso$ utilizando o controle u_v	73
6.2	Valores de J_u e J_I obtidos com o SIR variando $Peso$ utilizando o controle u_b	75
6.3	Valores de J_u e J_I obtidos com o SIR variando $Peso$ utilizando os controles u_v e u_b	76
6.4	Valores de J_u e J_I obtidos com o SIRC variando $Peso$ utilizando o controle u_v	78
6.5	Valores de J_u e J_I obtidos com o SIRC variando $Peso$ utilizando o controle u_t	80
6.6	Valores de J_u e J_I obtidos com o SIRC variando $Peso$ utilizando os controles u_v e u_t	82
7.1	Valores de C^{BTW} , \hat{P}_I e P para uma rede simples com $t_f^{MC} = 20$ e $pc = 0,5$.	91
7.2	Valores de C^{BTW} , T^a , T^b e T^c para uma rede simples com $t_f^{MC} = 20$ e $pc = 0,5$.	94
7.3	Resultados dos $R_{\%}$ com e sem a mudança de topologia para as três redes testadas.	103
7.4	Resultados dos $R_{\%}$ sem descasamento ($R_p(1) = 0,6$ e $R_p(2) = 0,8$), com descasamento 1 ($R_p(1) = 0,8$ e $R_p(2) = 0,6$) e com descasamento 2 ($R_p(1) = 0,9$ e $R_p(2) = 0,4$) na fase de avaliação, para as três redes testadas.	104

Introdução

Modelagem estocástica e a simulação envolvem o desenvolvimento e a aplicação de modelos estatísticos e de simulação para a análise de eventos reais com o uso de elementos de incerteza e de caráter aleatório [127]. A modelagem é de fundamental importância para lidar com sistemas complexos, pois possibilita obter informações sobre o sistema antes de efetivamente atuar sobre ele. Informações como custo, risco, tempo gasto, e outras podem gerar tomadas de atitude mais assertivas sobre o fenômeno analisado. Os estudos de modelos passaram por uma grande evolução desde o seu início em meados da década de 1920. Nessa época os modelos predominantes eram analógicos, sendo substituídos por modelos digitais com a chegada dos computadores na década de 1950. Ao longo desse tempo diversos modelos computacionais foram criados para diferentes cenários e aplicações [36].

Um modelo computacional pode ser definido como um protótipo virtual que visa proporcionar um comportamento similar de um cenário real analisado [111]. Em geral, a modelagem computacional pode ser dividida em duas categorias básicas: Modelagem determinística e estocástica [40]. Nos modelos determinísticos é possível determinar os resultados gerados com precisão através da relação entre os estados e eventos da simulação. Em tais modelos, dado uma determinada entrada sempre será produzida a mesma saída [85]. Já os modelos estocásticos associam uma variação aleatória nos dados, sendo possível estimar os resultados gerados. A aleatoriedade é adicionada ao modelo no intuito de se obter uma distribuição de probabilidade para possíveis saídas do modelo. Diferentemente dos modelos determinísticos, dado uma determinada entrada é improvável que a mesma saída seja produzida [123].

A análise da dinâmica proveniente de modelos determinísticos é avaliada sob as mesmas condições e pode não se assemelhar a um cenário realístico. Deste modo, o uso de modelos estocásticos se mostram válidos pois inserem incertezas no modelo. Esse procedimento agrega variabilidade aos resultados que serão analisados em média, possibilitando a verificação de melhores/piiores casos. Acredita-se que assim é possível agregar uma certa robustez ao modelo [3, 85].

A modelagem determinística clássica mais utilizada é a baseada em modelos

compartimentais. Estes modelos consideram que os dados possam ser divididos em compartimentos, ou classes. A dinâmica do modelo é representada por um conjunto de equações diferenciais determinísticas ou estocástica que descrevem a evolução temporal do número de indivíduos em cada uma das classes [10, 75]. Existem relevantes contribuições utilizando tanto modelos compartimentais determinísticos, como em modelos de coagulação sanguínea [6], crescimento celular [89], performance de um motor a diesel [65], redes elétricas com cargas constantes [94], reações enzimáticas [45], dentre outros. Por outro lado, existem relevantes contribuições dos modelos estocásticos, como a modelagem da concentração de um fármaco em pacientes com doença de Parkinson [113], dinâmica de poder social sobre rede de influência [24], ciclo celular de levedura [1], dentre outros.

Uma alternativa aos modelos compartimentais que vem sendo amplamente utilizada é a modelagem baseada em indivíduos [56, 33, 110]. Trata-se de modelos estocásticos que representam cada entidade dos dados como uma entidade única e discreta, possuindo ao menos uma característica que muda ao longo da simulação. Com isso, é possível que a heterogeneidade seja implementada em nível individual, ou seja além das classes utilizadas nos modelos compartimentais é possível que cada entidade dos dados tenha uma ou mais características além da respectiva classe a qual ele pertence. A adição de tal heterogeneidades é feita de maneira mais simples que os compartimentais. Tal simplicidade deve ser interpretada de acordo com a dificuldade na solução de possíveis equações diferenciais adicionais devido a heterogeneidade. No trabalho de Pereira e colaboradores [108, 49, 50] foi demonstrado, em estudos de casos de dinâmicas epidemiológicas, que é possível obter a equivalência entre modelos compartimentais e Modelo Baseado em Indivíduo (MBI), configurando os parâmetros do modelo MBI de forma adequada. Este resultado se mostrou válido tanto em modelos homogêneos quanto heterogêneos, proporcionando comparações diretas entre os resultados de ambos os modelos. Foram encontrados diferentes trabalhos utilizando MBI, como a modelagem da dinâmica de engorda de porcos [18], resposta imune contra tumores [90], várias contribuições em ecologia [134, 120, 61, 126, 33, 70], dentre outras.

Um terceiro modelo alternativo aos anteriormente citados são os baseados em redes complexas [122, 15]. É possível afirmar que este modelo é o mais flexível dos três apresentados até agora. As redes complexas podem representar modelos estocásticos ou determinísticos. Pode contemplar heterogeneidade ou não e ainda proporcionam a inclusão de heterogeneidades topológicas de maneira mais simples que as anteriores [107, 15, 101]. Tais modelos são construídos por meio de grafos. Cada entidade dos dados é representada como um nó da rede e a relação entre entidades é representada por uma ligação entre elas chamada de aresta. Existem inúmeros estudos utilizando redes complexas envolvendo dinâmicas psicopatológicas [17], de energia elétrica [26, 23], de locomoção urbana [141], emissão global de carbono [69], dentre outros.

O potencial das três modelagens possibilita o estudo do uso de cenários estocásticos para a inserção de incertezas aos modelos compartimentais, baseados em indivíduos e baseados em redes complexas. Para isso serão utilizadas dinâmicas epidemiológicas como estudo de caso, devido a pertinência da problemática e a disponibilidade de dados. Como serão analisados diferentes modelos utilizando diferentes estratégias, a contextualização adequada para cada cenário estudado será abordada no decorrer do texto. Vale ressaltar que a modelagem proposta pode ser utilizada em diferentes áreas, como no setor energético por exemplo. Procedimentos de operação, manutenção, alocação de recursos, resiliência de sistemas de geração e distribuição podem se beneficiar da aplicação do método na escolha de estratégias de gestão em sistemas elétricos. Pretende-se usar o resultado da aplicação da modelagem do estudo de caso proposto para apoio a modelagem preditiva de um Gêmeo Digital. Um Gêmeo Digital possibilita observar/controlar todo o sistema sem qualquer intervenção na planta física, aumentando a assertividade geral das ações tomadas. Os modelos propostos neste trabalho serão futuramente validados no processo de construção desse Gêmeo Digital da Usina Hidrelétrica de Jirau conforme projeto PD-06631-0007/2018 [28].

Esta tese está organizada em seis Capítulos que serão apresentados a seguir. O Capítulo 2 descreve uma breve introdução à epidemiologia matemática, juntamente com a formulação básica dos modelos compartimentais, baseados em indivíduos e baseados em redes complexas. O Capítulo 3 apresenta uma abordagem estocástica baseada em indivíduos adicionada a um modelo compartimental. Além disso, é demonstrada a equivalência entre os modelos. O Capítulo 4 propõe uma paralelização do modelo baseado em indivíduos no intuito de reduzir o esforço computacional gasto na simulação do modelo. O Capítulo 5 apresenta um primeiro estudo de estratégia de alocação de recurso de controle. Tal alocação foi obtida considerando uma limitação de recurso e dinâmica sazonal. O Capítulo 6 propõe o uso de uma abordagem estocástica para avaliar diferentes políticas de controle ótimo. Tal abordagem obtém o controle ótimo com um compartimental e utiliza o modelo baseado em indivíduos para inserir incertezas na dinâmica considerando o controle. O Capítulo 7 apresenta uma abordagem estocástica baseada em redes complexas, juntamente com três estratégias de controle. Por fim, o Capítulo 8 apresenta as conclusões do trabalho e as sugestões de trabalhos futuros.

Fundamentação teórica

Epidemiologia é uma área da ciência que envolve o estudo quantitativo e qualitativo de fenômenos associados à saúde das populações humanas, bem como possíveis fatores de risco que possam condicionar doenças [44]. Dentro dessa grande área, um importante campo de investigação consiste na chamada epidemiologia matemática, que se caracteriza pelo uso de modelos matemáticos para o desenvolvimento de estratégias de controle e prevenção de epidemias [7].

Existem diversas classes de modelos epidemiológicos, que incluem diferentes aspectos da população e da doença infecciosa considerada, tais como a disponibilidade de vacinação, aquisição de imunidade após uma primeira infecção, possibilidade da presença de infectados sadios. Um dos modelos mais utilizados é o compartimental, que considera que a população possa ser dividida em três compartimentos ou classes: Suscetíveis, Infectados e Recuperados (SIR). A dinâmica da epidemia é então representada por um conjunto de equações diferenciais determinísticas, que descrevem a evolução temporal do número de indivíduos em cada uma das classes [74, 96, 14]. Tal modelo tem proporcionado bons resultados para investigação de aspectos gerais relacionado à propagação de diversas doenças infecciosas [55, 88, 139].

Uma limitação do SIR clássico é que a única forma de acrescentar indivíduos suscetíveis ao modelo é pelo nascimento, que limita seu uso em relação à algumas dinâmicas de doenças recidivas. Existem diversos aprimoramentos e adaptações do modelo SIR para diferentes dinâmicas [8, 136, 99, 20]. Um aprimoramento que vêm se destacando é o Suscetíveis, Infectados, Recuperados e *Cross*-imunes (SIRC), proposto por Casagrandi [21] para representar a dinâmica da Influenza A [71, 112, 37, 66]. Trata-se de um modelo similar ao SIR, porém com um novo estágio intermediário entre um indivíduo suscetível e um recuperado, chamado de *cross*-imune. Esta nova classe possibilita que os indivíduos suscetíveis sejam expostos mais de uma vez à doença, que os indivíduos naturalmente percam a imunidade, dentre outras características que o tornam mais próximo de uma aplicação real se comparado ao SIR. Existem ainda modificações do modelo SIR considerando heterogeneidades, como a integração de diferentes regiões geográficas às classes [114], conexões heterogêneas de computadores [129] e infecções paralelas [78].

Foi encontrado também até mesmo modelo SIR heterogêneo estocástico como mostrado por Neri [98]. Pode-se então concluir que os modelos compartimentais são de grande valor também para cenários heterogêneos. Porém, ainda assim, estes modelos permanecem limitados por tratarem a heterogeneidade da população como divisão apenas por classes, ou seja diferentes grupos de pessoas que possuem as mesmas características.

Uma segunda alternativa para inclusão de novas características foi proposta por Cisternas [27], utilizando Modelos Baseados em Indivíduos (MBI) de modo equivalente aos modelos compartimentais [97]. Tratam-se de modelos estocásticos que representam cada indivíduo da população como uma entidade única e discreta, possuindo ao menos uma característica que muda ao longo do seu ciclo de vida. Com isso, é possível levar em conta atributos tais como sexo, idade, hábitos sociais, condições de habitação, profissão, condições de higiene, entre outras. Em outras palavras, o MBI possibilita que a heterogeneidade seja implementada em nível individual, ou seja além das classes utilizadas no modelo SIR é possível que cada indivíduo tenha uma ou mais características além da respectiva classe a qual ele pertence. Isso muda o paradigma de análise em que antes era interpretado como apenas classes e subclasses de uma população, para uma população contendo indivíduos com características próprias pertencente a uma determinada classe.

Uma terceira abordagem que têm sido amplamente utilizada são os modelos baseados em redes complexas [15]. Tais modelos são fundamentados em conceitos matemáticos da teoria de grafos, representando cada indivíduo como um nó e a relação entre um ou mais indivíduos como as arestas. O conjunto de nós ligados por suas respectivas arestas são chamados de grafos, que possibilitam então a representação de uma rede complexa. Além das diversas ferramentas que a teoria de grafos proporciona para obtenção de informações na rede, os modelos baseados em redes permitem representar heterogeneidades individuais, diferentes topologias e outras características que o torna ainda mais flexível que os outros modelos anteriormente citados [107, 15, 101].

Neste Capítulo serão descritos os modelos SIR, SIRC, MBI e os baseados em redes complexas. A equivalência dos modelos SIR e MBI-SIR será mostrada e exemplificada.

2.1 Modelos compartimentais SIR

2.1.1 O modelo Suscetível-Infetado-Recuperado

O modelo matemático SIR é constituído por um sistema de equações diferenciais não-lineares a tempo contínuo. Este modelo divide a população em três classes: Suscetíveis (S), Infectados (I) e Recuperados (R). Os Suscetíveis são pessoas que nunca

foram infectadas e estão sujeitos a contágio através do contato com pessoas infectadas. Os Infectados são pessoas que possuem a doença considerada e podem transmiti-la para pessoas suscetíveis. Por fim, os Recuperados são pessoas que já foram infectadas, mas estão curadas e, por hipótese, adquiriram imunidade.

O diagrama de blocos na Figura 2.1 apresenta os principais elementos do modelo SIR [108]. Neste diagrama, μ é a taxa de natalidade de novos indivíduos por unidade de tempo. Considera-se que os recém-nascidos são todos Suscetíveis, não havendo transmissão vertical da doença ou da imunidade por parte dos pais. Supõe-se que a taxa de mortalidade, denotada por ν , é a mesma para as três classes. Os coeficientes β e γ representam as taxas de transmissão da doença e de recuperação, respectivamente. O número total de indivíduos é denotado por N .

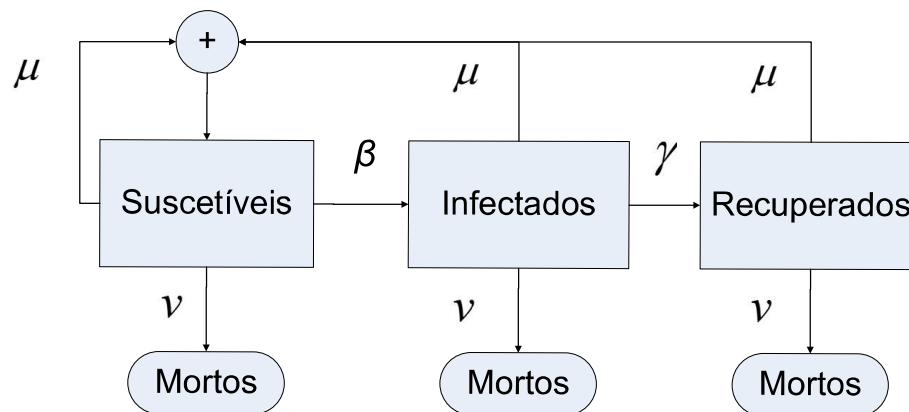


Figura 2.1: Representação esquemática do modelo SIR.

Por simplicidade, considera-se neste trabalho que o tamanho da população se mantém constante ao longo do tempo, ou seja, assume-se que as taxas de natalidade (μ) e mortalidade (ν) são iguais. Deste modo o modelo SIR é dado por

$$\begin{aligned} dS(t)/dt &= \mu N - \mu S(t) - \beta S(t)I(t)/N \\ dI(t)/dt &= \beta S(t)I(t)/N - \gamma I(t) - \mu I(t) \\ dR(t)/dt &= \gamma I(t) - \mu R(t) \end{aligned} \quad (2-1)$$

em que $S(t) + I(t) + R(t) = N$ e t é o tempo.

2.1.2 O modelo Suscetível-Infetado-Recuperado-Cross-imune

O modelo SIRC é similar ao modelo SIR e constitui-se de um sistema de equações diferenciais não-lineares a tempo contínuo. O modelo SIRC divide a população em quatro classes: Suscetíveis (S), Infectados (I), Recuperados (R) e *cross*-imunes (C). A principal vantagem se comparado ao SIR é a classe adicional de indivíduos *cross*-imunes no modelo. Os Suscetíveis são pessoas que nunca foram infectadas ou que uma vez recuperadas perderam a imunidade da doença, e estão sujeitos a contágio através do contato com pessoas infectadas. Os Infectados são pessoas que possuem a doença considerada e podem transmiti-la para pessoas suscetíveis ou *cross*-imunes. Os Recuperados são pessoas que já foram infectadas e adquiriram imunidade, mas não a cura definitiva da doença. Por fim, os *cross*-imunes podem ser interpretados tanto como pessoas que estavam recuperadas e que agora podem perder a imunidade tornando-o susceptível, quanto pessoas que tiveram um novo contato com indivíduos infectados podendo se infectar ou não (caso a doença se instale ou não). Em geral a classe *cross*-imune pode ser entendido como um estágio intermediário entre um indivíduo susceptível e um recuperado [66].

A Figura 2.2 apresenta os principais elementos do modelo SIRC [66]. Considera-se que os recém-nascidos são suscetíveis, não havendo transmissão vertical da doença ou da imunidade por parte dos pais. A variável μ é a taxa de natalidade de novos indivíduos por unidade de tempo. A taxa de mortalidade, denotada por ν , é a mesma para as três classes. Os coeficientes β e γ representam as taxas de transmissão da doença e de recuperação, respectivamente. O coeficiente σ pode ser interpretado como a taxa de re-infecção da doença. A variável δ representa a taxa de perda da imunidade e a variável α é a taxa com que os indivíduos ficam novamente suscetíveis. O número total de indivíduos é denotado por N .

No modelo SIRC também será considerado que o tamanho da população se mantém constante ao longo do tempo, ou seja, assume-se que as taxas de natalidade (μ) e mortalidade (ν) são iguais. O modelo SIRC é dado por

$$\begin{aligned}
 dS(t)/dt &= \mu N - \mu S(t) - \beta S(t)I(t)/N + \alpha C(t) \\
 dI(t)/dt &= \beta S(t)I(t)/N + \sigma \beta C(t)I(t)/N - \mu I(t) - \gamma I(t) \\
 dR(t)/dt &= \beta C(t)I(t)/N - \sigma \beta C(t)I(t)/N + \gamma I(t) - \mu R(t) - \delta R(t) \\
 dC(t)/dt &= \delta R(t) - \beta C(t)I(t)/N - \mu C(t) - \alpha C(t)
 \end{aligned} \tag{2-2}$$

em que $S(t) + I(t) + R(t) + C(t) = N$.

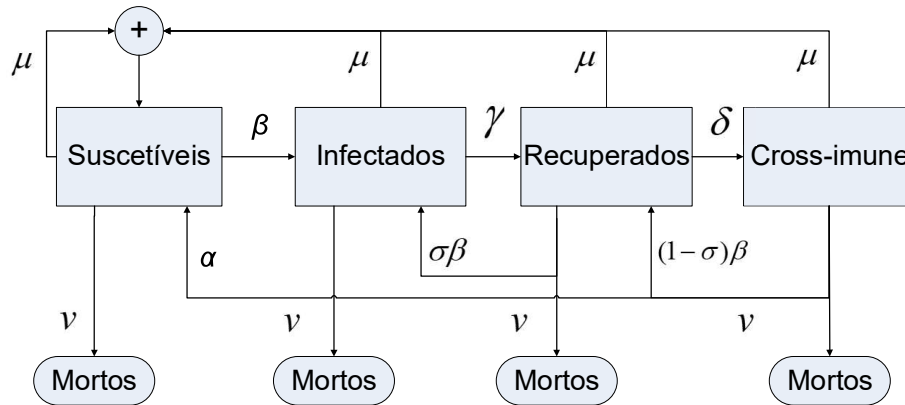


Figura 2.2: Representação esquemática do modelo SIRC.

2.2 Modelo baseado em indivíduos

No modelo MBI proposto por Cisternas [27], cada indivíduo da população é descrito por um conjunto de características de relevância do ponto de vista epidemiológico. A principal característica consiste na condição epidemiológica atual, que pode seguir, por exemplo, a categorização adotada no modelo SIR. Adicionalmente, é possível contemplar características como idade, tempo em que o indivíduo se encontra infectado e localização espacial dentro de uma certa região. Tais características podem ser levadas em conta nos processos de natalidade, contágio e morte ao longo da simulação do modelo.

Formalmente, o d -ésimo indivíduo é associado a um vetor de n características da forma

$$I_d(t) = [F_1(t) \quad F_2(t) \quad \cdots \quad F_n(t)]^T \quad (2-3)$$

sendo t o instante de tempo considerado e T o símbolo de transposto. Nesse instante, a população de N indivíduos é então representada pela seguinte matriz de dimensões $N \times n$:

$$P(t) = [I_{d1} \quad I_{d2} \quad \cdots \quad I_{dN}]^T. \quad (2-4)$$

2.2.1 MBI-SIR

A Figura 2.3 mostra o fluxograma para simulação do MBI respectivo ao SIR. Inicialmente, são definidos o tamanho da população (N), bem como os instantes de tempo inicial (t_0) e final (t_f) da simulação e o incremento de tempo entre as iterações (Δt). Também são definidos os valores dos parâmetros Q_p , P_{infec} , P_{rec} e P_{mor} , que são empregados nas etapas descritas a seguir.

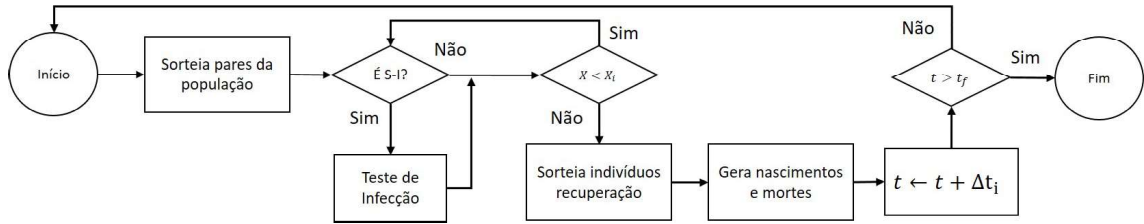


Figura 2.3: Fluxograma para simulação do MBI-SIR.

A simulação do MBI possui caráter estocástico, por envolver eventos aleatórios relacionados aos processos de infecção, recuperação e morte [53]. No começo de cada iteração, são sorteados Q_p pares de indivíduos a serem considerados no processo de infecção. Para cada par da forma (S, I) ou (I, S) gera-se então um número aleatório a partir de uma distribuição $U[0, 1]$ (distribuição uniforme no intervalo $[0, 1]$). Caso tal número seja menor do que uma dada probabilidade de infecção P_{infec} , o indivíduo suscetível (S) do par passa à condição de infectado (I). Vale salientar que outros tipos de pares não dão ensejo à ocorrência de infecção. Após a etapa de infecção, o algoritmo prossegue para a etapa de recuperação. Para isso, gera-se um número aleatório a partir de uma distribuição $U[0, 1]$ para cada indivíduo infectado. Caso tal número seja menor do que uma dada probabilidade de recuperação P_{rec} , o indivíduo em questão passa à condição de recuperado (R). Por fim, um procedimento similar é empregado na etapa de morte, na qual cada um dos N indivíduos da população pode vir a falecer com probabilidade P_{mor} . Os indivíduos falecidos são substituídos por novos indivíduos suscetíveis, considerando que as taxas de mortalidade e natalidade são tais que o tamanho da população se mantém constante.

2.2.2 Equivalência entre o SIR e o MBI-SIR

Como mostrado no trabalho de Galvão Filho e colaboradores [49], é possível escolher os parâmetros Q_p , P_{infec} , P_{rec} e P_{mor} do modelo MBI de modo a obter resultados equivalentes, em média, aos do modelo SIR apresentado na Equação (2-1) da Seção 2.1.2. Dado um passo de tempo Δt a ser utilizado na simulação do MBI, tal equivalência é obtida impondo-se:

- $Q_p = \frac{N\Delta t}{2}$
- $P_{infec} = \beta$
- $P_{rec} = \gamma\Delta t$
- $P_{mor} = \mu\Delta t$

Adicionalmente, o tamanho da população N deve ser o mesmo nos dois modelos. Maiores detalhes sobre a equivalência do SIR e MBI podem ser obtidos no trabalho de Pereira e colaboradores [108].

Para exemplificar a equivalência, o algoritmo para simulação do MBI descrito no fluxograma da Figura 2.3 foi codificado para confrontar com o SIR. Para esse propósito, o modelo SIR foi simulado empregando-se o método numérico de Dormand-Prince [35].

Em ambos os casos, os modelos foram configurados de modo a obter equivalência com um modelo SIR com os seguintes parâmetros:

$$\mu = 0,005$$

$$\beta = 0,8$$

$$\gamma = 1/15.$$

Tais parâmetros são gerados por estimativas baseadas em estudos da dinâmica da doença real e na estabilidade do modelo. Os parâmetros utilizados neste trabalho foram obtidos nas referências [108, 27, 97, 51, 48, 49, 50].

A Figura 2.4 apresenta os resultados de três simulações realizadas com diferentes valores de tamanho da população (N) e passo de tempo no modelo MBI (Δt). As trajetórias consistem na média de 10 realizações da simulação. Como esperado, os resultados obtidos com o MBI tendem a se aproximar daqueles gerados pelo modelo SIR à medida que N aumenta e $\Delta(t)$ diminui.

2.3 Modelos Baseados em Rede Complexa

Os modelos baseados em rede complexas possuem diferentes formações (topologias) e outras características que possibilitam a modelagem de diversos cenários contendo diferentes dinâmicas entre os indivíduos da rede. Cada indivíduo tem sua importância neste processo, principalmente se contemplar seu comportamento em relação aos outros indivíduos da rede. Dessa forma, modelos baseados em redes complexas tem sido uma ferramenta amplamente utilizada para obtenção de características de tais indivíduos da rede, bem como a intervenção/aprimoramento de dinâmicas que os envolvem.

2.3.1 Propriedades

A teoria de grafos é a principal ferramenta utilizada para representar as redes complexas e suas dinâmicas. Cada indivíduo é representado por um nó e a relação entre estes nós é representada por conexões. Um grafo pode ser definido como um conjunto de N nós, também chamados de vértices (v_i) e M arestas, também chamados de conexões (a_{ij}). A aresta a_{ij} conecta o nó v_i à outro nó v_j , e neste caso este nós são chamados de vizinhos.

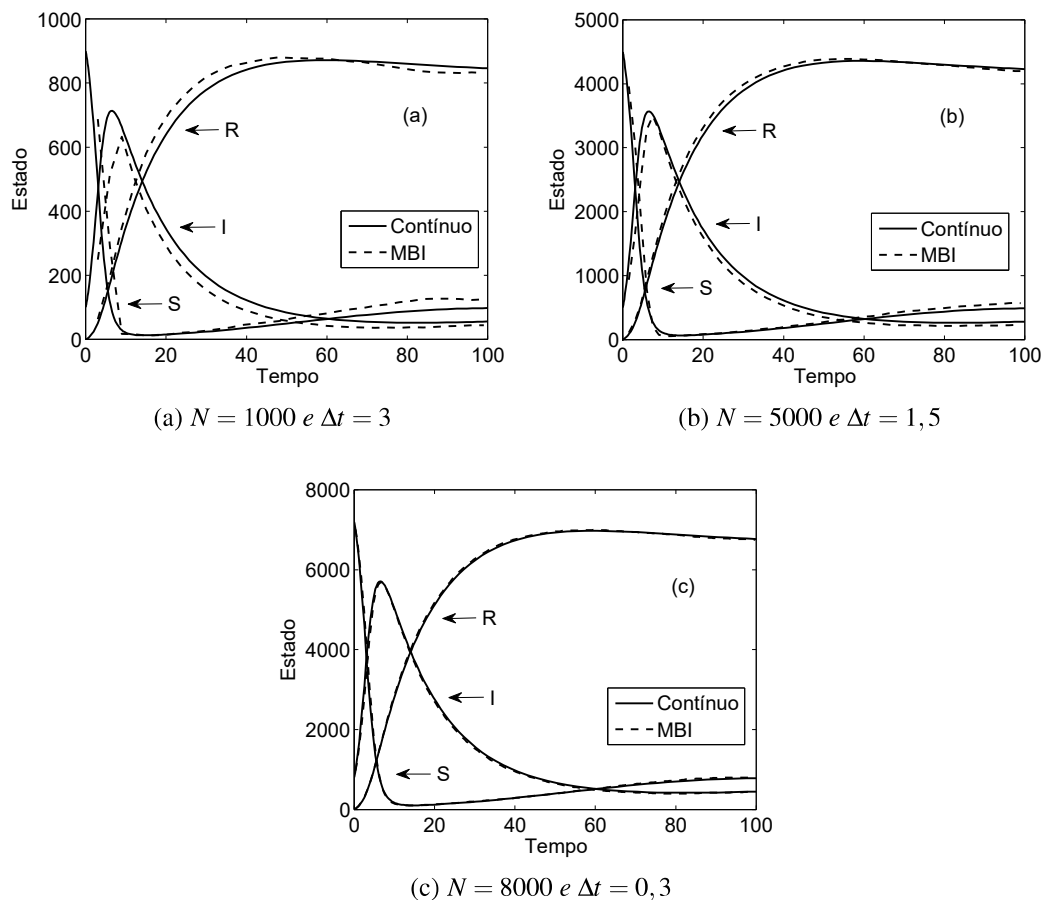


Figura 2.4: Resultados da simulação confrontando SIR e o MBI-SIR.

Uma possibilidade de representação matemática de um grafo é obtida pela matriz de adjacência \mathbf{A} . A matriz possui dimensão $N \times M$ que caracteriza as conexões entre os N nós da rede. Estas assertivas podem ser melhor visualizadas na Figura 2.5 abaixo:

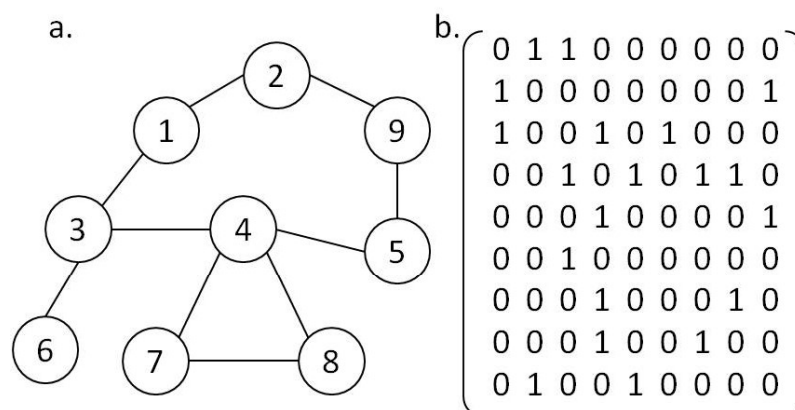


Figura 2.5: a) Esquema de grafo simples b) Matriz de adjacência.

A Figura 2.5 mostra um grafo contendo $N = 9$ nós e $M = 10$ arestas, juntamente com sua matriz de adjacência. Pode-se observar, como um exemplo, que o elemento

$a_{12} = 1$ da matriz representa a conexão entre o vértice v_1 e v_2 , de modo análogo, $a_{32} = 0$ mostra que não há conexão entre os vértices v_3 e v_2 .

Dentre todos os nós da rede, existem aqueles que possuem uma maior importância, também chamados de *hubs*. Dado que a rede possui certa topologia, é possível identificar os nós mais influentes calculando a centralidade de cada um. A medida de centralidade pode ser baseada utilizando várias características dos nós, como sua localização na rede, número de conexões, quantidade de vizinhos indiretos, dentre outras. Existem diversos trabalhos mostrando o uso de tais centralidades para detecção e imunização dos nós *hubs* de modo a reduzir possíveis propagações de epidemias ou ataques na rede [106]. Em particular, duas destas centralidades se destacam: o grau [131, 2] e a intermediação [47, 116, 117] que serão definidos nas seções a seguir.

Centralidade de grau

O grau é obtido pela quantidade de conexões que um nó possui, e pode ser definido por:

$$k_i = \sum_{j=1}^N a_{ij} \quad (2-5)$$

em que k_i corresponde ao grau do nó i , e a_{ij} é o elemento i, j de \mathbf{A} . Calculando o grau da rede mostrada na Figura 2.5 tem-se o resultado respectivo ao índice de cada nó: $k_1 = k_2 = k_5 = k_7 = k_8 = k_9 = 2$, $k_3 = 3$, e $k_4 = 4$. Portanto, segundo a medida do grau tem-se que os vértices v_4 e v_6 possuem o maior e o menor valor, respectivamente.

Uma forma de caracterização da topologia da rede pode ser obtida em termos do grau de distribuição de probabilidade P_k . O grau de distribuição pode ser definido pela probabilidade de um nó aleatoriamente escolhido tenha o grau k . Esta função utiliza o grau para auxiliar a representação da distribuição utilizada na construção da rede. Assim, diferentes redes reais podem ser representadas de acordo com o grau de distribuição adequado. Alguns exemplos serão apresentados na próxima seção para mostrar a distribuição das redes utilizadas neste trabalho.

Centralidade de intermediação

A intermediação de um nó é a quantidade de vezes em que o nó é incluído em um menor caminho entre qualquer outros dois nós da rede, que pode ser definido por:

$$B_i = \sum_{j < k} \sigma_{jk}^i / \sigma_{jk} \quad (2-6)$$

em que σ_{jk} corresponde ao número total de menores caminhos do nó v_j e v_k e σ_{jk}^i é a quantidade de menores caminhos passando pelo nó v_i . Calculando a intermediação da

rede mostrada na Figura 2.5 tem-se o resultado respectivo ao índice de cada nó: $B_1 = 0,25$, $B_2 = 0,12$, $B_3 = 0,62$, $B_4 = 0,73$, $B_5 = 0,16$, $B_6 = B_7 = B_8 = 0$, $B_9 = 0,07$. Portanto, segundo a medida do intermediação tem-se que os vértices v_4 e v_6 possuem o maior e o menor valor, respectivamente.

2.3.2 Modelos de redes complexas

A utilização de redes complexas tem se tornado cada vez mais difundida na modelagem de dinâmicas em populações. Existem diferentes tipos de redes complexas, porém neste trabalho será dada ênfase em três principais tipos: as redes geradas através de modelos estocásticos, redes geradas com base nos nós mais influentes, e as redes baseadas em dados reais. Neste trabalho serão utilizadas as redes Erdős-Rényi, Barabási-Albert e ainda uma rede baseada em dados reais.

Redes Erdős-Rényi

A rede Erdős-Rényi (ER) foi o primeiro modelo que, baseando-se na teoria de grafos aleatórios, descreveu cenários reais [39]. A abordagem clássica proposta por Erdős-Rényi em seu primeiro artigo representa a rede como um grafo convencional, contendo N nós e M arestas, porém as conexões entre os nós são escolhidas aleatoriamente. Para se construir esse tipo de rede começa-se com N nós desconectados, em que pares de nós são conectados aleatoriamente (sem que haja múltiplas conexões) até que a quantidade máxima de conexões M seja alcançada. O número máximo de arestas na rede é dado por $N(N-1)/2$.

Um modelo alternativo para se construir redes ER consiste em conectar cada par de nós com probabilidade $0 < p < 1$ sob uma distribuição uniforme. Este procedimento resulta em redes com diferentes quantidades de conexões. O número total de arestas passa a ser $Np(N-1)/2$ e o grau médio da rede é dado por $\langle k \rangle = pN$ [15].

O grau de distribuição deste modelo alternativo é o modelo binomial [15], que pode ser definido como:

$$P_k = C_{N-1}^k p^k (1-p)^{N-1-k}, \quad (2-7)$$

com o coeficiente binomial C_{N-1}^k

$$C_{N-1}^k = \frac{k!}{(N-1)!(N-1-k)!}. \quad (2-8)$$

A Figura 2.6 mostra um exemplo de uma topologia de rede ER com $N = 100$ nós e $M = 200$ conexões, juntamente com o histograma dos graus de seus respectivos nós. O tamanho dos nós apresentados na Figura 2.6(a) é proporcional ao grau do nó na rede.

É possível verificar que a quantidade de nós com maior grau está distribuído de maneira homogênea na rede, não apresentando uma diferença determinante entre o grau dos nós.

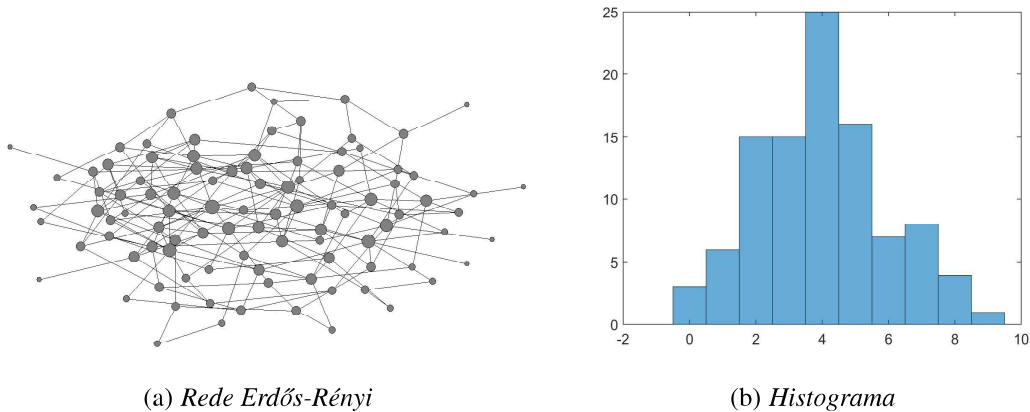


Figura 2.6: (a) Topologia de uma rede Erdős-Rényi com 100 nós e 200 conexões, em que o tamanho dos nós é proporcional ao seu grau na rede; juntamente com o seu histograma, na parte (b).

Redes Barabási-Albert

No intuito de descrever melhor as redes reais, o modelo de redes Barabási-Albert (BA), não propõe a construção de um modo totalmente aleatório [13], como nas redes ER. Trata-se de uma classe de redes pertencente às redes de livre escala (*scale-free*), que geram redes de modo a garantir a distribuição baseada na lei de potência, ou seja, que os nós *hubs* recebam cada vez mais conexões. De maneira geral, a lei de potência representa o efeito do *rico se tornando cada vez mais rico*.

Seguindo a descrição do algoritmo para construção de um modelo de BA, a rede é iniciada com um pequeno número $m + 1$ de nós, que estão completamente conectados através de $m(m - 1)/2$ conexões. Um a um, os nós vão sendo adicionados na rede com um número fixo de conexões m conectados a m diferentes nós que já estavam na rede. A probabilidade Π de um novo nó ser conectado à um nó v_i depende do grau deste mesmo nó k_i em relação a rede. Tal probabilidade pode ser definida como

$$\Pi(v_i) = \frac{k_i}{\sum_j k_j}. \quad (2-9)$$

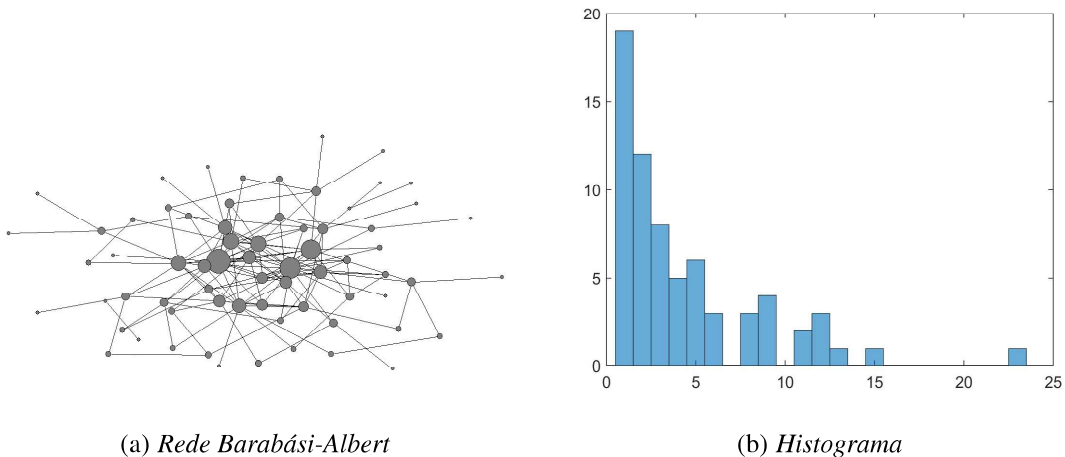
Este procedimento garante uma preferência aos nós de maior grau em receber conexões com novos nós. O algoritmo termina quando um determinado número de $N - m + 1$ nós forem adicionados.

O grau de distribuição segue a lei de potência dada por

$$P(k) = k^{-\gamma} \quad (2-10)$$

em que γ é denominado o expoente de livre escala, sendo $k > 0$ e $\gamma > 0$. O grau médio agora é dado por $\langle k \rangle = 2m - \left(\frac{m^2+m}{N}\right)$ e o número total de conexões é $M = Nm - \left(\frac{m^2+m}{N}\right)$ [15].

A Figura 2.7 mostra o exemplo de uma topologia de rede BA com $N = 68$ nós e $M = 152$ conexões, juntamente com o histograma dos graus de seus respectivos nós. O tamanho dos nós apresentados na Figura 2.7 é proporcional ao grau do nó na rede. É possível verificar que a quantidade de nós com maior grau se concentra mais em alguns nós do que em outros, diferentemente da rede ER mostrado anteriormente na Figura 2.6(a).



(a) Rede Barabási-Albert

(b) Histograma

Figura 2.7: (a) Topologia de uma rede Barabási-Albert com 68 nós e 152 conexões, em que o tamanho dos nós é proporcional ao seu grau na rede; juntamente com o seu (b) histograma.

Redes reais

Além dos estudos de modelos que geram redes no intuito de descrever cenários reais de maneira genérica, existem ainda outras linhas de pesquisas que buscam as características reais da rede e as representam de maneira literal, preservando as características específicas de cada cenário.

É possível encontrar vários trabalhos utilizando redes complexas reais no intuito de compreender melhor o comportamento da rede. Alguns exemplos são trabalhos baseados nas redes aeroportuárias [57], geolocalização real [118] ou baseada na internet [42],

disseminação de rumores [83, 124, 138], rede de reservatórios de água [30, 91], e diversas outras [15, 79, 106].

Neste trabalho será utilizado uma rede do banco de dados cedido por Herrmann [62]. Os dados foram gerados entrevistando 90.118 estudantes de 84 escolas a partir da aplicação de um questionário de avaliação sobre seus laços de amizade [86, 60]. A Figura 2.8 mostra a topologia de uma das redes dos dados da pesquisa com $N = 69$ nós e $M = 220$ conexões com o histograma dos graus de seus respectivos nós. O tamanho dos círculos que representam os nós apresentados na Figura 2.8 é proporcional ao seu respectivo grau. É possível verificar que a quantidade de nós com maior grau é consideravelmente maior, diferenciando das redes BA e ER anteriormente apresentadas.

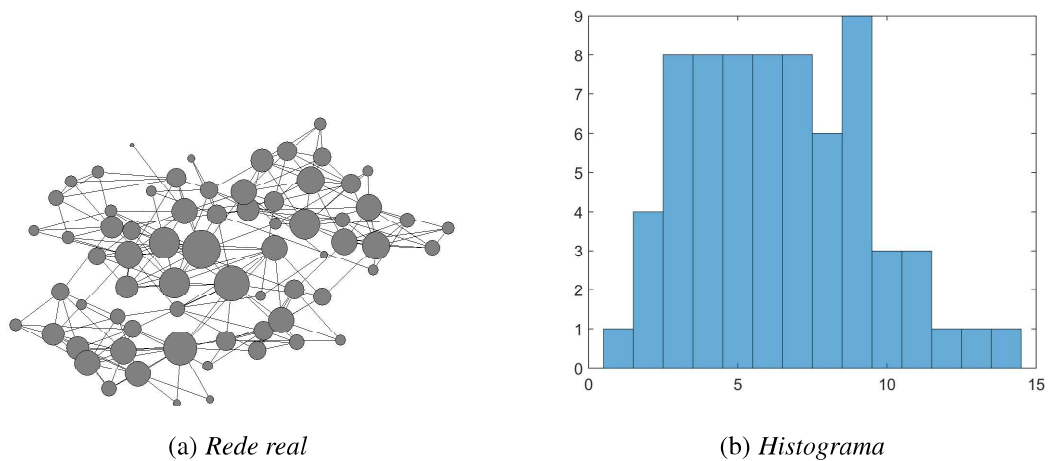


Figura 2.8: (a) Topologia de uma rede de amizade em escolas americanas com 69 nós e 220 conexões, em que o tamanho dos nós é proporcional ao seu grau na rede; juntamente com o seu (b) histograma.

Uma abordagem estocástica do modelo SIRC usando modelos epidemiológicos baseados em indivíduos

Casagrandi propôs inicialmente o modelo SIRC para representar a dinâmica da Influenza A [21]. Trata-se de um modelo similar ao SIR, porém com um novo estágio intermediário entre um indivíduo susceptível e um recuperado, chamado de *cross-immune*. Esta nova classe possibilita algumas vantagens em relação ao modelo SIR. No SIR clássico, a única forma de acrescentar indivíduos susceptível ao modelo é pelo nascimento. No SIRC é possível que os indivíduos naturalmente percam a imunidade, sejam expostos mais de uma vez à doença entre outras características que o tornam mais próximo de uma aplicação real.

No Capítulo 2 foi demonstrado a dinâmica do modelo SIR bem como uma dinâmica equivalente a ela proveniente de um modelo MBI. Tal equivalência foi obtida configurando de maneira apropriada os parâmetros do modelo MBI. Também foi mostrado o modelo SIRC, que foi proposto como um aprimoramento do modelo SIR com o objetivo de representar a dinâmica da influenza.

Nos estudos feitos até o momento da construção deste trabalho, não foi encontrado nenhuma implementação de um modelo MBI equivalente ao modelo SIRC. Seria interessante se o modelo SIRC fosse implementado como um modelo MBI, pois permitiria tanto uma análise da dinâmica em uma abordagem estocástica quanto para a inclusão de heterogeneidades em níveis individuais. Neste contexto, este trabalho propõe a implementação do modelo MBI-SIRC e a demonstração de sua equivalência ao modelo SIRC.

3.1 O MBI-SIRC

A Figura 3.1 mostra o fluxograma para simulação do MBI equivalente ao SIRC. Inicialmente, são definidos o tamanho da população (N), bem como os instantes de tempo inicial (t_0) e final (t_f) da simulação e o incremento de tempo entre as iterações (Δt).

Também são definidos os valores dos parâmetros Q_p , P_{infec} , $P_{reinfec}$, P_{cross} , P_{sucep} , P_{rec} e P_{mor} , que são empregados nas etapas descritas a seguir.

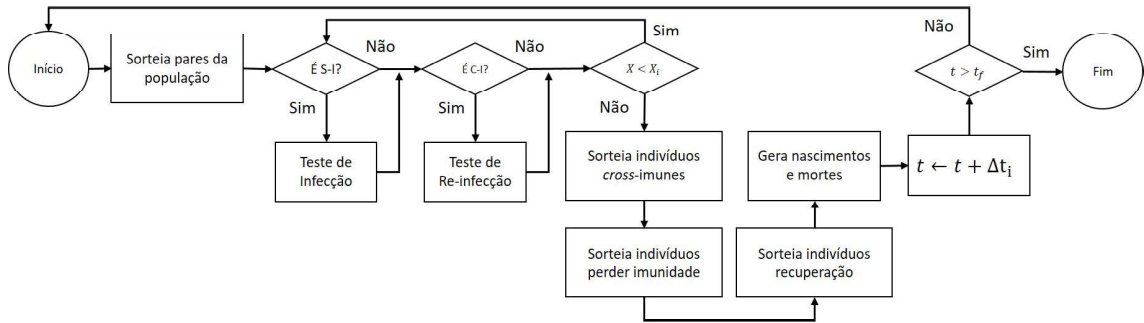


Figura 3.1: Fluxograma para simulação do MBI-SIRC.

Como apresentada na Seção 2.2.1, a simulação do MBI-SIRC também é estocástica, envolvendo eventos aleatórios relacionados aos processos de infecção, re-infecção, *cross*-imunidade, perda da imunidade, recuperação e morte. No começo de cada iteração, são sorteados Q_p pares de indivíduos a serem considerados nos processos de infecção e re-infecção. Para cada par da forma (S, I) ou (I, S) gera-se então um número aleatório a partir de uma distribuição $U[0, 1]$ (distribuição uniforme no intervalo $[0, 1]$). Caso o número aleatório seja menor do que uma dada probabilidade de infecção P_{infec} , o indivíduo suscetível (S) do par passa à condição de infectado (I) . Posteriormente, para cada par da forma (C, I) ou (I, C) gera-se um número aleatório a partir de uma distribuição $U[0, 1]$. Se o número for menor que uma dada probabilidade de re-infecção $P_{reinfec}$, o indivíduo *cross*-ímmune (C) do par passa à condição de infectado (I) . Porém se o número aleatório for maior, o indivíduo *cross*-ímmune (C) do par passa à condição de recuperado (R) . Outros tipos de pares não dão ensejo à ocorrência de infecção ou re-infecção.

O algoritmo MBI-SIRC prossegue, então, para a etapa de *cross*-imunidade. Este processo é feito gerando-se um número aleatório a partir de uma distribuição $U[0, 1]$ para cada indivíduo recuperado. Caso o número aleatório seja menor que uma dada probabilidade de *cross*-imunidade P_{cross} , o indivíduo em questão passa à condição de *cross*-ímmune (C) . Em seguida ocorre o processo de perda natural da imunidade. É gerado um número aleatório a partir de uma distribuição $U[0, 1]$ para cada indivíduo *cross*-ímmune. Caso o número aleatório seja menor do que uma dada probabilidade de perda da imunidade P_{sucep} , o indivíduo em questão passa à condição de suscetível (S) .

A próxima etapa é a recuperação. É gerado um número aleatório a partir de uma distribuição $U[0, 1]$ para cada indivíduo infectado. Caso o número aleatório seja menor do que uma dada probabilidade de recuperação P_{rec} , o indivíduo em questão passa à condição de recuperado (R) . Por fim, um procedimento similar é empregado na etapa de morte, na qual cada um dos N indivíduos da população pode vir a falecer com probabilidade P_{mor} . Os indivíduos falecidos são substituídos por novos indivíduos suscetíveis, considerando

que as taxas de mortalidade e natalidade são tais que o tamanho da população se mantém constante.

3.2 Equivalência entre o SIRC e o MBI-SIRC

Como discutido na Seção 2.2.2, é possível escolher de forma similar os parâmetros Q_p , P_{infec} , $P_{reinfec}$, P_{cross} , P_{sucep} , P_{rec} e P_{mor} do modelo MBI de modo a obter resultados equivalentes, em média, aos do modelo SIRC apresentado na Equação (2-2). Dado um passo de tempo Δt a ser utilizado na simulação do MBI, tal equivalência é obtida impondo-se:

$$\begin{aligned} Q_p &= \frac{N\Delta t}{2}, & P_{infec} &= \beta \\ P_{reinfec} &= \beta\sigma, & P_{cross} &= \delta\Delta t \\ P_{sucep} &= \alpha\Delta t, & P_{rec} &= \gamma\Delta t \\ P_{mor} &= \mu\Delta t \end{aligned}$$

adicionalmente, o tamanho da população N deve ser o mesmo nos dois modelos.

Para exemplificar tal cenário, o modelo SIRC descrito na Seção 2.1.2 foi utilizado para confrontar com o MBI-SIRC equivalente. Para esse propósito, o modelo SIRC foi simulado empregando-se o método numérico de Dormand-Prince [35]. Em ambos os casos, os modelos foram configurados de modo a obter equivalência com os seguintes parâmetros $\mu = 1/75$, $\beta = 150$, $\alpha = 1/2$, $\sigma = 0.078$, $\delta = 1$, $\gamma = 365/6$. Tais parâmetros são gerados por estimativas baseadas em estudos da dinâmica da doença real e na estabilidade do modelo, e os utilizados neste trabalho foram obtidos nas referências [108, 27, 97, 51, 48, 49, 50].

3.3 Resultados da equivalência entre os modelos SIRC e MBI-SIRC

As Figuras 3.2 e 3.3 mostram a média das realizações do MBI-SIRC com $+/- 1$ desvio padrão. Estes resultados são apresentados para cada estado S , I , R e C separadamente. A Figura 3.2 mostra os resultados da simulação para $N = 1000$ e $\Delta t = 0,005$, enquanto que a Figura 3.3 mostra os resultados para $N = 8000$ e $\Delta t = 0,0001$. Se ambos os valores forem comparados, é possível observar uma maior aproximação entre os desvios e a média a medida que N é aumentado e Δt é reduzido.

As Figuras 3.4(a), 3.4(b) e 3.4(c) mostram a comparação entre os modelos SIRC e o modelo MBI-SIRC proposto. Os resultados apresentados foram obtidos em três simulações diferentes realizadas com diferentes valores de tamanho de população (N) e

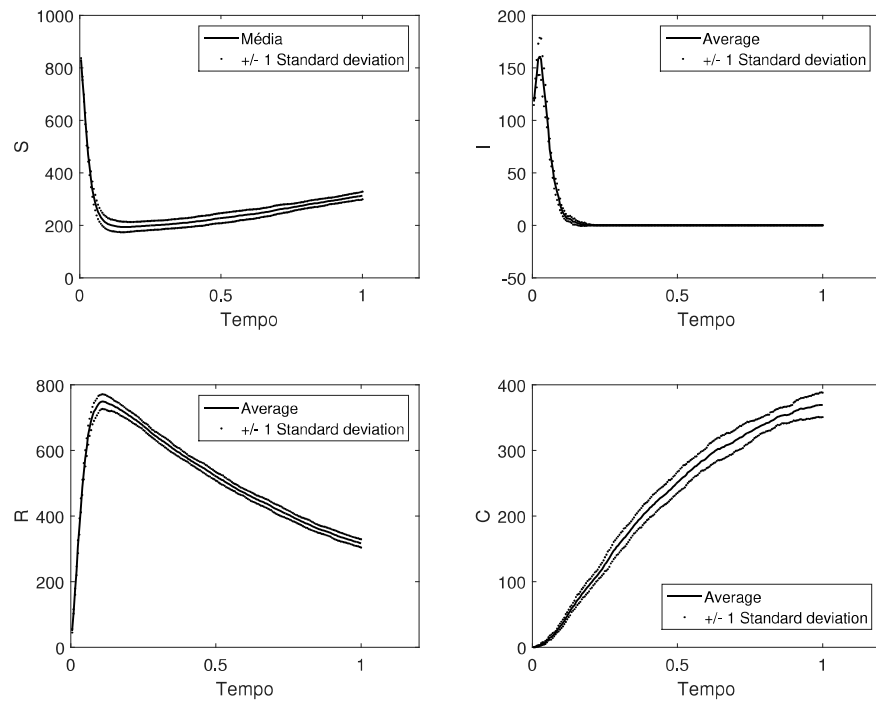


Figura 3.2: Resultados das simulações do MBI-SIRC para $N = 1000$ e $\Delta t = 0,005$, para cada estado.

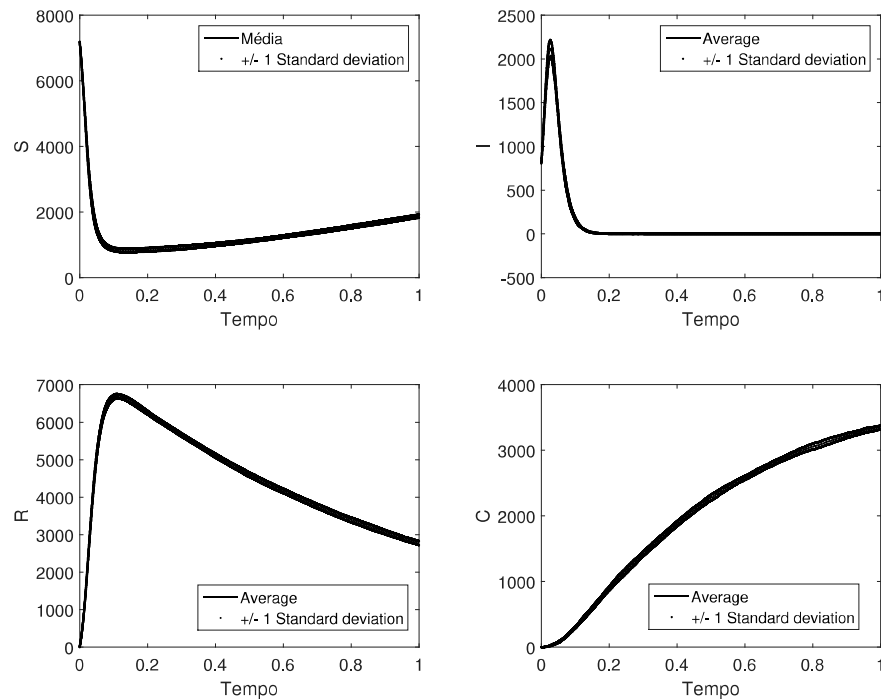


Figura 3.3: Resultados das simulações do MBI-SIRC para $N = 8000$ e $\Delta t = 0,0001$, para cada estado.

intervalo de tempo no modelo MBI (Δt). As trajetórias do MBI-SIRC consistem em uma média de dez realizações de simulação. Como esperado, os resultados obtidos com a MBI

tendem a aproximar os gerados pelo modelo SIRC com os aumentos de N e reduções de Δt .

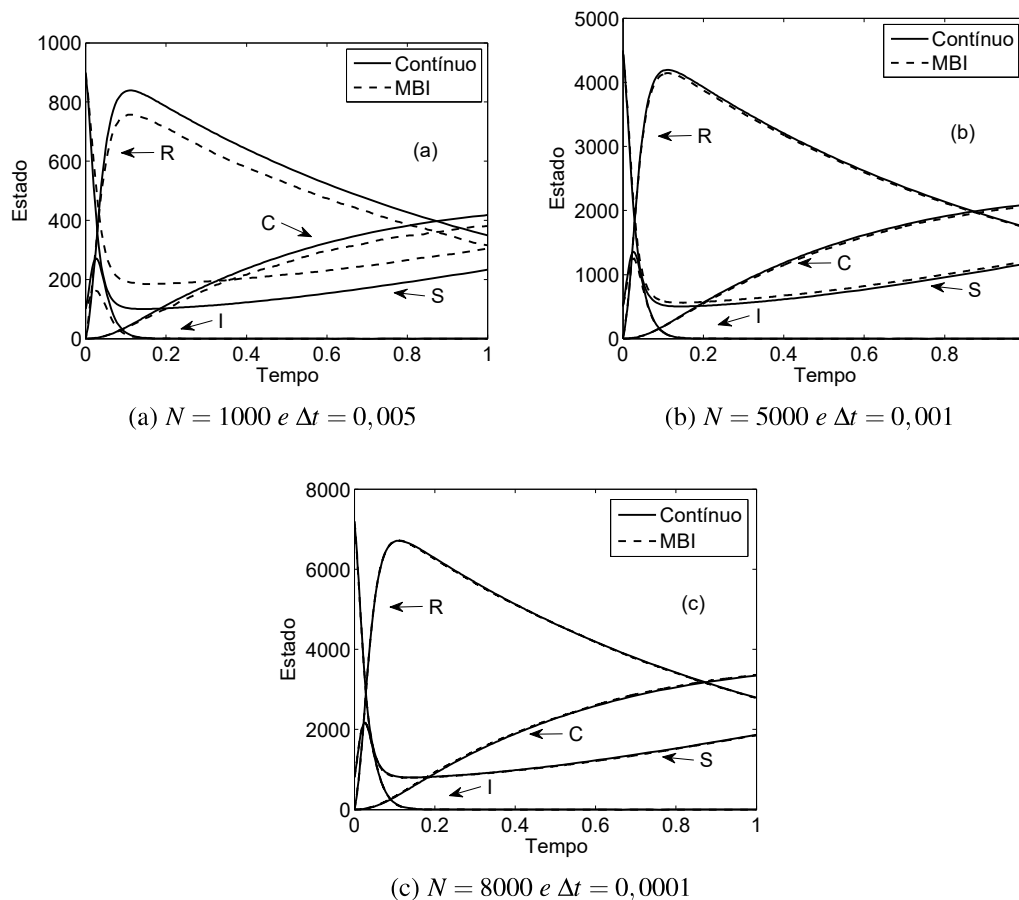


Figura 3.4: Resultados da simulação confrontando SIRC e o MBI-SIRC.

3.4 Considerações Finais para o uso do MBI-SIRC

O modelo MBI proposto, em média é equivalente ao modelo SIRC para estudo de caso apresentado. Essa equivalência depende diretamente dos parâmetros N e Δt . À medida que os valores de N aumentam e Δt diminui, as trajetórias tendem a se aproximar. Cada estado foi analisado individualmente, mostrando que os desvios padrões acompanham os limiares médios. Foi possível observar que a alteração adequada dos parâmetros adotados, o desvio padrão tende a se aproximar da média. Para este estudo de caso, os valores de $N = 8000$ e $\Delta t = 0,0001$ foram considerados suficientes para estabelecer a equivalência entre os modelos.

Os resultados mostrados neste capítulo foram publicados por Galvão Filho e colaboradores [50], como capítulo do livro *Lecture Notes in Computer Science - 1ed, 2017*.

Programação paralela CUDA para simulação de modelos epidemiológicos baseados em indivíduos

O desenvolvimento de modelos matemáticos tem colaborado para a construção de estratégias mais eficazes para o controle epidemiológico. A abordagem clássica consiste em empregar os modelos SIR para modelar os padrões da condição de saúde de uma população. Uma alternativa é o MBI, que consiste em modelar cada indivíduo por um conjunto de atributos e simular computacionalmente os processos de contágio e recuperação. A modelagem com o MBI proporciona maior flexibilidade quanto à caracterização de cada indivíduo da população analisada.

Em comparação com modelos compartimentais tais como o modelo SIR, o custo computacional para a simulação de um MBI é tipicamente mais elevado. No entanto, este custo é associado principalmente à repetições de operações simples e similares de modo não sequencial. Este cenário é bastante favorável para o uso de plataformas de processamento paralelo. Por outro lado, a unidade de processamento gráfico (*Graphics Processing Unit*, GPU), originalmente usada para algoritmos de processamento gráfico, tornou-se amplamente disponível juntamente com a arquitetura de dispositivo de computação unificada (*Compute Unified Device Architecture*, CUDA), transformando o processamento paralelo uma tarefa relativamente fácil [43, 121, 77]. Esta facilidade proporcionada deve ser interpretada no desenvolvimento de rotinas computacionais para o processamento paralelo em GPUs utilizando linguagem de alto nível.

Neste contexto, esta Seção propõe o uso de uma GPU para redução do tempo computacional envolvido na simulação de MBIs.

4.1 A equivalência entre o SIR e o MBI paralelo

De modo análogo a Seção 2.2.2, para mostrar que o MBI é equivalente ao SIR quando N é grande, os parâmetros P_{infec} , P_{rec} e P_{mor} devem ser especificados

correspondentemente. Embora a saída do MBI seja aleatória, a dinâmica média obtida de múltiplas realizações se equivale à solução da equação diferencial correspondente ao modelo SIR. De acordo com a Equação (2-1), a taxa a qual os indivíduos suscetíveis são infectados é dada por

$$P_{infec}(t) = \frac{\beta I(t)S(t)}{N}. \quad (4-1)$$

No trabalho de Galvão Filho [51], a probabilidade P_{infec} é usada para atualizar as características de pares de indivíduos $S(t)$ e $I(t)$ durante um Δt tempo. Contudo, a estratégia de pares pode levar a condição de corrida quando utilizado no contexto de programação paralela. Dessa forma, este trabalho propõe uma adaptação da probabilidade de infecção dada por

$$P_{infec}(t) = \frac{\beta I(t)}{N} \Delta t \quad (4-2)$$

pois, esta probabilidade quando multiplicada pelo número de indivíduos suscetíveis no momento t resulta em

$$P_{infeccao}(t) = S(t) \frac{\beta I(t)}{N} \Delta t. \quad (4-3)$$

Os parâmetros P_{rec} e P_{mor} são os mesmos descritos da Seção 2.2.2.

4.2 A arquitetura das GPUs

As arquiteturas das GPUs que suportam CUDA são tipicamente organizadas como sequências de múltiplos processadores (*Streaming Multiprocessors*, SM) capaz de processar blocos de *threads*. Cada GPU é formado por m SMs contendo n processadores de *streaming* (SP), conforme mostrado na Figura 4.1.

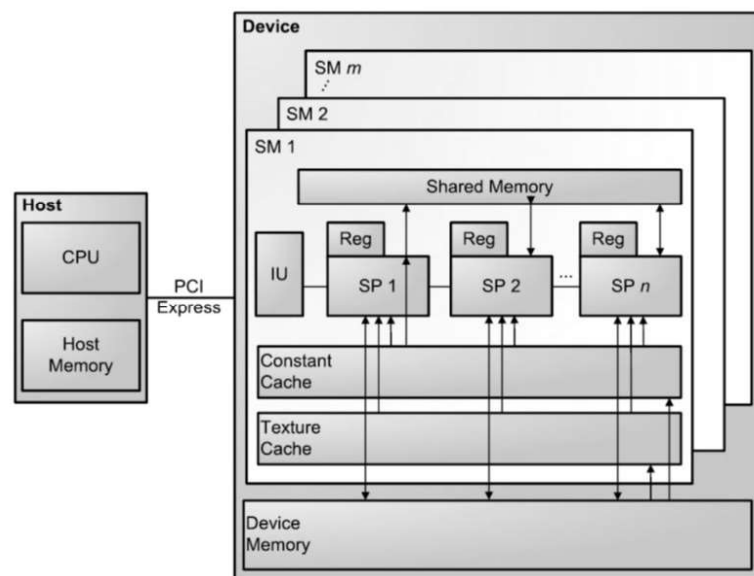


Figura 4.1: Esquema da arquitetura de uma GPU.

Todos os n SPs têm seus respectivos registradores (Reg) e podem acessar a memória da GPU (*Device Memory*, DM) [31]. DM é a memória da placa em si que está em um chip separado na GPU, tornando-se a *memória lenta*". Para reduzir a latência de memória, as GPUs podem ter outras memórias auxiliares, como as memórias de leitura constante e de textura. Cada SM possui uma memória compartilhada que permite acesso rápido e compartilhamento de dados entre os SPs do mesmo SM, por exemplo, compartilhando dados entre *threads* do mesmo bloco.

O programa em CUDA é gerado no computador (*host*) na linguagem C usando formatos de função chamados *kernels*. Os *kernels* são enviados da memória do *host* para a DM como *threads*. Este procedimento é feito pelo próprio *host* através das funções da interface de programação de aplicativos (*Application Programming Interface*, API) CUDA, juntamente com as alocações de memória. As *threads* são agrupados em conjuntos chamados blocos. O conjunto de blocos é chamado de grade. Cada *thread*, bloco, tamanho de bloco e tamanho da grade são identificados por variáveis internas `threadIdx`, `blockIdx`, `blockDim` e `gridDim`, respectivamente.

4.3 Algoritmo MBI-CUDA

O Algoritmo 4.3 mostra como os MBIs podem ser usados para simular a dinâmica de uma epidemia.

Algoritmo 4.3: Simulação do MBI

Entrada :

- *Taxas:* β, μ, γ ;
- *Tempo:* $t_0, t_f, \Delta t$;
- *Condições Iniciais:* S_0, I_0 e R_0 ;
- *Índice:* $max_{iteracao}$.

Passo 1: Faça $i = 1$ até $max_{iteracao} = t_f / \Delta t$

Passo 2: Gerar o vetor da população *Pop* com tamanho N contendo S_0 indivíduos suscetíveis, I_0 infectados e R_0 recuperados.

Passo 3: Gerar três vetores de tamanho N contendo números aleatórios com distribuição $U[0, 1]$ para ser usado no processo de infecção ($Vet_{infeccao}$), recuperação ($Vet_{recuperacao}$) e morte (Vet_{morte}).

Passo 4: Gerar o processo de infecção em todos indivíduos suscetíveis da população de acordo com o número de indivíduos infectados em qualquer tempo dado. Dado o número aleatório correspondente ao indivíduo em questão (no vetor $Vet_{infeccao}$), a

probabilidade de se tornar infectado é testada considerando $P_{infeccao}$. Se o valor aleatório for menor que $P_{infeccao}$, o indivíduo se torna infectado.

Passo 5: Gerar o processo de recuperação em todos indivíduos infectados da população.

Dado o número aleatório correspondente ao indivíduo em questão (no vetor $Vet_{recuperacao}$), a probabilidade de se recuperar é testada considerando P_{rec} . Se o valor aleatório for menor que P_{rec} , o indivíduo infectado se torna recuperado.

Passo 6: Gerar o processo de morte em todos indivíduos da população. Dado o número aleatório correspondente ao indivíduo em questão (no vetor Vet_{morte}), a probabilidade morrer é testada considerando P_{morte} . Se o valor aleatório for menor que P_{mor} , o indivíduo é removido do modelo, e um novo indivíduo é adicionado na classe suscetível.

Passo 7: O número de indivíduos suscetíveis (S), infectados (I) e recuperados (R) são contabilizados sob Pop . Os novos valores são atribuídos às condições iniciais para a próxima iteração $S_0 = S$, $I_0 = I$ e $R_0 = R$.

Passo 8: Salve S , I e R em três vetores de resultados $Vet_S(i)$, $Vet_I(i)$ e $Vet_R(i)$, respectivamente.

Passo 9: Faça $i = i + 1$. Se $i \leq max_{iteracao}$ volte para o Passo 2.

Fim O número de indivíduos pertencentes às três classes estão armazenadas nos vetores $Vet_S(i)$, $Vet_I(i)$ e $Vet_R(i)$.

Saídas: - *Vetores resultantes:* $Vet_S(i)$, $Vet_I(i)$ e $Vet_R(i)$.

As funções usadas neste trabalho são implementadas como *kernels*. O número de *threads* e blocos configurados nos *kernels* foram escolhidos como descrito no guia de programação CUDA [103] para obter o melhor desempenho da placa [121, 75].

O MBI é estocástico por natureza e, conseqüentemente, é necessário gerar números aleatórios para a simulação. Apesar da popularidade dos geradores congruentes lineares (LCG) (como a função `rand` da linguagem C) [105, 9, 73], eles não são fortemente paralelizáveis, impedindo o uso de tal método em GPUs.

Uma solução direta seria gerar os números aleatórios no próprio *host* usando o LCG. No entanto, o tempo necessário seria longo devido a dois fatores: a grande quantidade de números aleatórios a serem gerados e o tempo gasto na transferência de vetores para as memórias da GPU. O MBI requer vetores do tamanho da população em questão, ou seja, preenchidos com números aleatórios de tamanho N . Como a função `rand` é limitada somente à geração de números aleatórios, um laço é necessário para preencher os vetores, levando a um aumento significativo no tempo computacional.

A NVIDIA fornece geradores aleatórios em versões posteriores a *CUDA 3.2*. Neste trabalho, o gerador de números aleatórios escolhido é o método de Mersenne Twis-

ter (MT) [92, 41, 128, 32] disponível no SDK CUDA [104]. Este gerador é chamado na função `RandomGPU`, que gera um vetor aleatório proporcional ao tamanho da população.

A semente necessária no MT é fornecida pela própria CPU chamando a função `rand`, como proposto em [128, 9]. Usando a função `RandomGPU` três vetores aleatórios são gerados com tamanho N contendo as probabilidades de cada indivíduo relacionado à infecção ($Vet_{infeccao}$), recuperação ($Vet_{recuperacao}$) e morte (Vet_{morte}).

É importante saber que a inicialização dos parâmetros, controle de suas iterações, incluindo realizações de Monte Carlo e a contagem dos indivíduos na população é realizada pela CPU do *host*. Todas outras tarefas restantes para a simulação da dinâmica do MBI é executada na GPU.

4.4 Resultados obtidos com MBI paralelo

O modelo SIR foi escolhido para ilustrar o desempenho da implementação do MBI proposto por ser uma dinâmica amplamente conhecida e simples de descrever [119, 132, 139].

O Algoritmo 4.3 para simulação do MBI descrito anteriormente foi codificado em linguagem C empregando uma implementação inteiramente sequencial, bem como uma implementação paralelizada empregando CUDA. Doravante, tais implementações serão denominadas MBI-C e MBI-CUDA, respectivamente. Em ambos os casos, os modelos foram configurados com os mesmos parâmetros usados no mesmo exemplo dado, obtendo também a equivalência com o modelo SIR. Para avaliar o ganho computacional obtido por meio da implementação em CUDA, registrou-se o tempo médio dispendido em cada iteração do MBI-C e MBI-CUDA.

4.4.1 Equivalência entre o algoritmo proposto e o SIR

A verificação experimental da equivalência entre o SIR modelo e o MBI proposto foi realizada com modelos configurados com os mesmos parâmetros descritos na Seção 2.2.2.

A Figura 4.2 apresenta os resultados de três simulações realizadas com diferentes valores de tamanho da população (N) e passo de tempo no modelo MBI (Δt). As trajetórias referentes ao MBI-C e MBI-CUDA consistem na média de 10 realizações da simulação. O mesmo comportamento é obtido, aproximando as curvas do MBI às do SIR à medida que N aumenta e $\Delta(t)$ diminui. Adicionalmente, observa-se que os resultados da implementação MBI-C são similares aos da implementação MBI-CUDA.

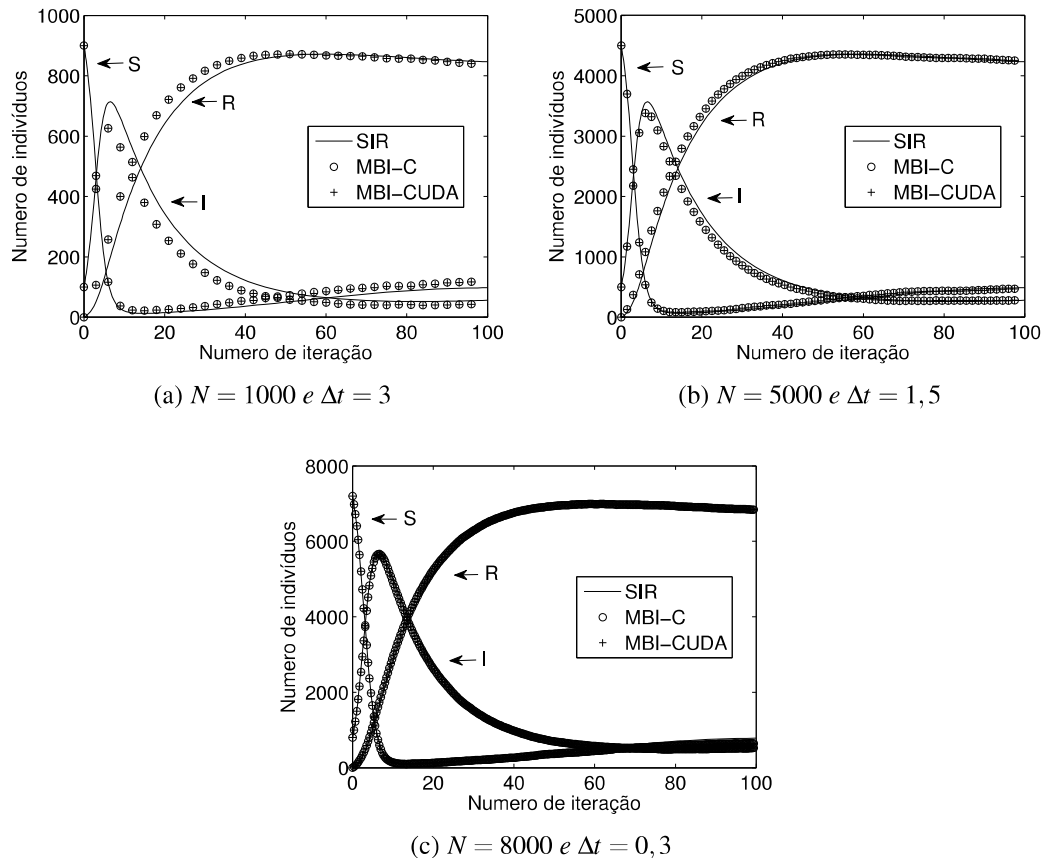


Figura 4.2: Resultados da simulação confrontando SIR, C e o CUDA.

4.4.2 Avaliação do ganho computacional fornecido pelo MBI-CUDA

Para avaliar o desempenho da simulação paralela, o tempo médio gasto foi medido para cada iteração do algoritmo da CPU, escrito em linguagem C executado na CPU do *host* e em CUDA, executado em uma GPU. Os testes foram realizados em um computador com Intel Core 2 Quad 2.33 GHz, 3 GB de RAM com placa gráfica NVIDIA GeForce GTS 250 com 1 GB de RAM e 128 processadores operando a 738MHz, e 256 *threads* por bloco para chamadas de *kernels* como recomenda o guia de programação NVIDIA *Occupancy Calculator*.

A Figura 4.3 apresenta uma comparação entre os tempos computacionais gastos utilizando as implementações MBI-C e MBI-CUDA para diversos tamanhos de população. É possível verificar que o MBI-C requer um esforço computacional que aumenta de forma aproximadamente linear com o tamanho da população. Ampliando o gráfico do tempo gasto pelo MBI-CUDA, observa-se que o tempo também tem aumento linear, porém com taxa de crescimento menos expressiva. Vale ressaltar, contudo, que para populações menores que 7000 indivíduos o MBI-C se mostra mais rápido que o MBI-CUDA. Isso decorre do *overhead* de aproximadamente 1ms associado à paralelização das tarefas

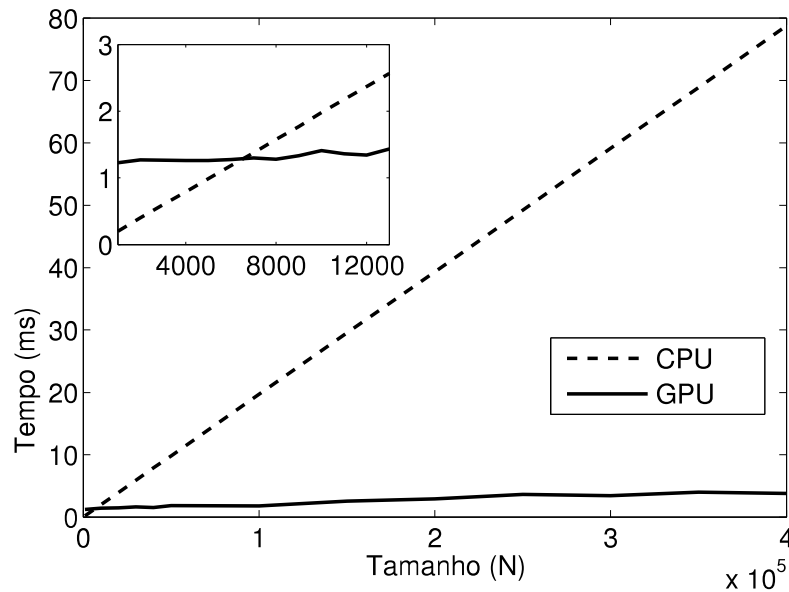


Figura 4.3: Tempo médio por iteração - Comparativo entre MBI-C e MBI-CUDA.

na placa de vídeo. Pode-se concluir, portanto, que o MBI-CUDA seria uma implementação mais apropriada, do ponto de vista de tempo computacional, desde que o tamanho da população empregado seja suficientemente grande para justificar o *overhead* gasto na paralelização.

Tabela 4.1 resume os resultados obtidos. Os valores mostram que o ganho computacional usando GPU é de até 20 vezes comparado CPU.

Tabela 4.1: Performance (em segundos) e o ganho

$N(\times 10^3)$	CPU	GPU	Speedup
1	0,201	1,227	0,164
2	0,401	1,270	0,315
4	0,792	1,260	0,629
6	1,182	1,275	0,927
8	1,577	1,281	1,231
10	1,980	1,412	1,404
100	19,6841	1,776	11,081
200	39,325	2,922	13,459
300	59,107	3,464	17,062
400	78,783	3,816	20,646

4.5 Considerações finais para o uso do MBI paralelo

Este capítulo descreveu uma maneira de acelerar as simulações de modelos epidemiológicos baseados em indivíduos utilizando GPUs. Como o MBI permite uma maior flexibilidade em termos de heterogeneidades e inserção de incertezas no modelo, eles podem ter um papel proeminente na obtenção de estratégias de controle para mitigar a propagação de doenças infecciosas. No entanto, como a determinação não-paramétrica das funções de distribuição de probabilidade requer um grande número de simulações de Monte Carlo, a velocidade de processamento torna-se crucial. Portanto, operações paralelas para simulação do MBI devem ajudar em casos, por exemplo, nos quais as estratégias de controle são otimizadas iterativamente. Além disso, tal estratégia é de fundamental importância para modelos de tempo real, ao qual necessita de respostas em intervalos de tempo pequenos (como mili segundos).

Alguns resultados preliminares obtidos de uma versão parcialmente paralelizada, incluindo somente os processos de infecção, recuperação e nascimento/morte, foram publicados em [51]. Foi possível obter uma redução do tempo computacional por um fator de sete. Já os resultados acima descritos foram obtidos com a paralelização total do algoritmo, resultando na redução do tempo computacional por um fator de vinte. Tais resultados foram publicados em [49].

Otimização da alocação temporal de recursos para combate a epidemias com transmissão sazonal através de métodos de barreira

Uma doença bastante recorrente na população humana é a influenza comum, também chamada de influenza sazonal. A influenza ocorre por todo o ano, mas verifica-se uma maior frequência nos meses mais frios do ano. No Brasil, segundo o Ministério da Saúde, foram registradas 750 mil internações por influenza no ano de 2011 [93]. Segundo a Organização Mundial de Saúde, a influenza sazonal resulta em cerca de 250 a 500 mil mortes no mundo [135].

O vírus da influenza é transmitido facilmente de uma pessoa infectada para outra por meio de perdigotos, ou seja gotículas disseminadas através de espirro, tosse, ou até mesmo contato das mãos com superfícies contaminadas.

A política mais comum e eficaz para a prevenção da epidemia é a vacina, que imuniza o indivíduo através do vírus inativo. Porém as políticas adotadas atualmente também destinam recursos no intuito de prevenir a transmissão da doença pelo uso de métodos de barreiras entre o doente e seus contatos. Pode-se exemplificar tais métodos pelo uso de máscaras ou até mesmo pela adoção de medidas de higiene respiratória, como cobrir a boca ou o nariz ao tossir ou espirrar.

Existem diversos trabalhos propondo adaptações do SIR para representar a dinâmica da influenza e encontrar um controle ótimo para alocação dos recursos, considerando sazonalidade [109], recursos limitados [59], campanha de saúde [14], entre outros aspectos.

Os métodos de barreira são, na maioria dos casos, fornecidos para a população através de campanhas publicitárias de um modo geral. Isso agrega uma desvantagem ao método uma vez que leva-se um tempo para que o indivíduo tenha acesso ao método e o torne efetivo em sua rotina. Desta forma não é uma tarefa trivial saber qual o momento mais oportuno para alocar os recursos, levando em consideração o tempo gasto pela assimilação dos métodos de barreira e a sazonalidade da influenza.

Neste contexto, a proposta desta Seção consiste em explorar o uso do modelo SIR para otimizar a alocação temporal de recursos limitados para combate da influenza sazonal com métodos de barreira.

5.1 Dinâmica sazonal do contágio

Segundo o Ministério da Saúde, no Brasil, o padrão de sazonalidade da gripe varia de acordo com a região analisada, sendo melhor observada naquelas que possuem estações climáticas bem definidas. Porém existe uma maior frequência nos meses mais frios [93].

Uma maneira simples de incluir tal sazonalidade no modelo SIR consiste em substituir a taxa de infecção fixa (β) por uma taxa de infecção variante no tempo. Para esse propósito, adotou-se aqui uma função $\beta(t)$ dada por:

$$\beta(t) = \left(\frac{\beta_0 + \beta_1}{2} \right) - \left(\frac{\beta_1 - \beta_0}{2} \right) \cos(\omega t), \quad (5-1)$$

onde β_0 e β_1 são os valores mínimos e máximos respectivamente e $\omega = 2\pi/t_f$ sendo a frequência angular fixada. A Figura 5.1 mostra a função $\beta(t)$ para $t_f = 100$, $\beta_0 = 0.1$ e $\beta_1 = 1$.

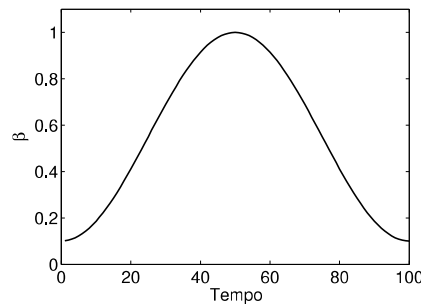


Figura 5.1: Taxa de infecção sazonal.

Vale ressaltar que para o caso da gripe, o modelo aplicado neste trabalho representa somente o contágio por um vírus específico, sem levar em conta possíveis mutações ao longo do período de tempo considerado.

5.2 Política de controle

No intuito de reduzir a disseminação da doença na população este trabalho considera que seja adotada uma campanha para o uso de métodos de barreira. Tal método pode ser aplicado na sociedade através de campanhas de divulgação de bons hábitos de higiene e distribuição de máscaras, entre outras providências. Sua representação no

modelo é dada pelo uso do controle visando à redução da taxa de infecção associada a $\beta(t)$.

Tendo em vista que a campanha requer um determinado tempo para que a sociedade assimile e pratique estes novos hábitos, faz-se necessário representar esta demora no modelo. Com esse intuito, o modelo SIR foi estendido com um estado adicional $D(t)$ na forma:

$$\begin{aligned} dS(t)/dt &= \mu N - \mu S(t) - \beta(t) \frac{I(t)S(t)}{N} D(t) \\ dI(t)/dt &= \beta(t) \frac{I(t)S(t)}{N} D(t) - \gamma I(t) - \mu I(t) \\ dR(t)/dt &= \gamma I(t) - \mu R(t) \\ dD(t)/dt &= (-D(t) + (1 - u(t)))/\tau \end{aligned} \quad (5-2)$$

sendo $D(t)$ uma variável associada ao efeito da campanha na modificação dos hábitos da população com a constante de tempo τ e $u(t)$ a taxa temporal de aplicação de recursos na campanha (normalizada entre 0 e 1).

O problema de controle ótimo aqui considerado consiste em minimizar a função custo dada por:

$$J(u) = \int_{t_0}^{t_f} I(t) dt, \quad (5-3)$$

sujeito às Equações (5-1), (5-2) e à restrição isoperimétrica

$$\int_{t_0}^{t_f} u(t) dt \leq h, \quad (5-4)$$

onde

$$0 \leq u(t) \leq 1, \quad \forall t \in [0, t_f]. \quad (5-5)$$

A restrição dada pela Equação (5-4) impõe um limitante superior h para o total de recursos a ser empregado na campanha.

5.3 Busca pelo controle ótimo

Segundo Morton [96] quando a função custo for linear em u , e as parcelas envolvendo u forem lineares nas equações do modelo, a equação de Bellman da programação dinâmica (e o Hamiltoniano na formulação do Princípio do Mínimo de Pontryagin) também irá conter u linear. Assim, o controle ótimo, se ele existir, será do tipo “bang-bang”¹ [75, 97]. No que segue, será apresentada uma demonstração dessa propriedade para o

¹Na teoria de controle, um controlador do tipo “bang-bang” também é conhecido como controlador de 2 passos, *on-off* ou de histerese. Trata-se de um controlador que alterna abruptamente entre dois estados. Neste trabalho pode ser interpretado alternando com ou sem o método de barreira

modelo específico empregado neste trabalho.

Dado o sistema

$$\begin{aligned}
 dS(t)/dt &= \mu N - \mu S(t) - \beta(t) \frac{I(t)S(t)}{N} D(t) \\
 dI(t)/dt &= \beta(t) \frac{I(t)S(t)}{N} D(t) - \gamma I(t) - \mu I(t) \\
 dR(t)/dt &= \gamma I(t) - \mu R(t) \\
 dD(t)/dt &= (-D(t) + (1 - u(t)))/\tau \\
 dE(t)/dt &= u(t)
 \end{aligned} \tag{5-6}$$

onde $E(t)$ está relacionado à restrição isoperimétrica, deseja-se minimizar o custo dado pela Equação (5-3).

O Hamiltoniano pode ser escrito por

$$\begin{aligned}
 H &= I(t) + \lambda_1 [\mu N - \mu S(t) - \beta(t) \frac{S(t)I(t)}{N} D(t)] \\
 &+ \lambda_2 [\beta(t) \frac{S(t)I(t)}{N} D(t) - \gamma I(t) - \mu I(t)] \\
 &+ \lambda_3 [\gamma I(t) - \mu R(t)] \\
 &+ \lambda_4 [(-D(t) + (1 - u(t)))/\tau] \\
 &+ \lambda_5 [u(t)]
 \end{aligned} \tag{5-7}$$

Com isso, as equações de co-estado, dadas por $\dot{\lambda} = -H_x$, podem ser escritas como:

$$\begin{aligned}
 \dot{\lambda}_1 &= -H_S = [\mu + \beta(t) \frac{I(t)D(t)}{N}] \lambda_1 \\
 &\quad - [\beta(t) \frac{I(t)D(t)}{N}] \lambda_2 \\
 \dot{\lambda}_2 &= -H_I = [\mu - \beta(t) \frac{S(t)D(t)}{N}] \lambda_2 \\
 &\quad + [\beta(t) \frac{S(t)D(t)}{N}] \lambda_1 \\
 &\quad + (\lambda_2 - \lambda_3) \gamma \\
 \dot{\lambda}_3 &= -H_R = \mu \lambda_3 \\
 \dot{\lambda}_4 &= -H_D = \frac{\lambda_4}{\tau} + \beta(t) \frac{S(t)I(t)}{N} [\lambda_1 - \lambda_2] \\
 \dot{\lambda}_5 &= -H_E = 0
 \end{aligned} \tag{5-8}$$

obtendo-se

$$\lambda_5 = c_5 \tag{5-9}$$

onde c_5 é uma constante.

Isolando os termos dependentes do controle $u(t)$ da Equação (5-7), tem-se

$$\left[-\frac{\lambda_4}{\tau} + \lambda_5 \right] u(t) \tag{5-10}$$

substituindo a Equação (5-9) na Equação (5-10), segundo o Princípio do Mínimo de

Pontryagin, pode-se concluir que:

$$u^*(t) = \begin{cases} 0, & \text{se } -\frac{\lambda_4}{\tau} + c_5 > c_5, \\ 1, & \text{se } -\frac{\lambda_4}{\tau} + c_5 < c_5. \end{cases} \quad (5-11)$$

Em outras palavras, se o coeficiente que multiplica $u(t)$ na Equação (5-10) for positivo $u(t)$ deve ser mínimo, e se for negativo deve ser máximo. Demonstra-se assim que o controle será do tipo “*bang-bang*”.

5.4 Material e Métodos

É sabido que o controle ótimo é do tipo “*bang-bang*”, porém não é possível afirmar quantos pulsos o controle apresenta e nem o melhor momento para aplicá-los. Para tentar contornar este problema, este trabalho propõe uma busca em grade por um controle do tipo “*bang*”.

Neste trabalho, o modelo SIR descrito na Seção 2.1.1 foi simulado baseando-se no método numérico de Dormand-Prince [35]. A implementação foi configurada com os seguintes parâmetros normalizados em termos de unidades de tempo, indivíduos e recursos [51]: $t_0 = 0$, $t_f = 100$, $\mu = 0.005$, $\gamma = 1/15$, $\beta_0 = 0.1$, $\beta_1 = 1$, $\omega = 2\pi/t_f$ e $h = 50$. Estes parâmetros são gerados por estimativas baseadas em estudos da dinâmica da doença real e na estabilidade do modelo. Os parâmetros utilizados neste trabalho foram obtidos em [108, 27, 97, 51, 48, 49, 50].

Para analisar o efeito do tempo envolvido na assimilação da campanha, a constante de tempo τ foi variada de 0 a 40. Para cada configuração de τ foi realizado uma busca pela melhor alocação do controle. O pulso teve duração de 50 unidades de tempo, de modo a respeitar a restrição isoperimétrica. Desta forma foi considerado inicialmente apenas um pulso, buscando assim o tempo t_1^* no qual será dado o início. O mesmo cenário foi simulado para dois pulsos, ou seja dividindo os recursos em duas partes de 25 unidades e buscando a melhor alocação para ambos no horizonte de tempo. O tempo de alocação ótimo para os pulsos foram chamados de t_1^* e t_2^* , representando assim o menor custo obtido iniciando o primeiro e o segundo pulso respectivamente. A Figura 5.2 mostra um exemplo, utilizando parâmetros escolhidos empiricamente, para um pulso com $t_1 = 20$ e (b) para dois pulsos com $t_1 = 15$ e $t_2 = 60$.

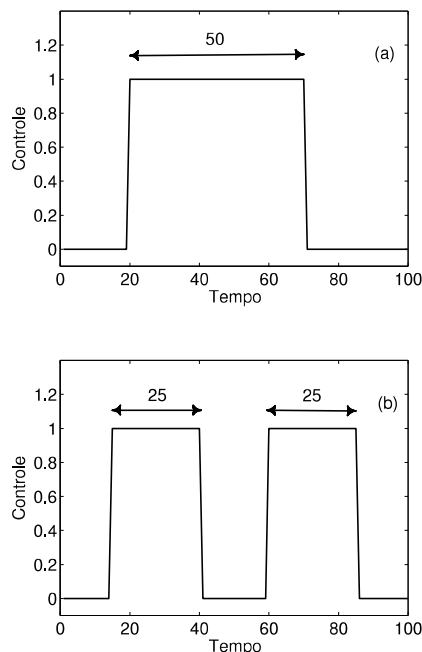


Figura 5.2: Exemplos de controle com (a) um e (b) dois pulsos.

5.5 Resultados para epidemias com transmissão sazonal através de métodos de barreira

A Figura 5.3 apresenta os resultados da simulação utilizando os parâmetros citados na Seção 5.4 com $\tau = 0$ e $\tau = 10$. A Figura 5.3b mostra que o controle ótimo foi alocado aproximadamente no centro do horizonte de tempo, ou seja o mais próximo possível do ápice da sazonalidade. Assim é possível observar na Figura 5.3a que o método de barreira é instantaneamente aplicado, e conseqüentemente neste intervalo de tempo o contágio é eliminado. Nas regiões em que o controle não está atuando a infecção se faz presente, porém no momento mais brando da sazonalidade. A Figura 5.3c mostra o resultado da simulação para $\tau = 10$ considerando o controle apresentado na Figura 5.3b. Observa-se um aumento significativo dos indivíduos recuperados e conseqüentemente a redução dos indivíduos suscetíveis, o que significa que houve um maior número de contágios. Tal aumento se deve ao fato de que a constante de tempo foi adicionada e assim a campanha só será efetiva posteriormente. Portanto a população ficará exposta a uma taxa de infecção maior. Quando o controle ótimo levando em conta a constante de tempo é aplicado, verifica-se uma antecipação da ação de controle em relação ao pico da sazonalidade. Uma vez que a constante de tempo irá atrasar a eficácia do método de barreira, é sensato adiantar a ação de controle para que o método esteja vigorando no pico da sazonalidade. As Figuras 5.3d e 5.3e corroboram tal análise. De modo similar ao primeiro caso, é possível observar uma redução no número de indivíduos infectados no

decorrer do horizonte de tempo.

A Tabela 5.1 mostra o tempo inicial e o custo obtido com o controle contendo um e dois pulsos. Verifica-se que os tempos encontrados são muito próximos comparando

Tabela 5.1: Resultado da otimização com um e dois pulsos para $\tau = [0, 5, 10, 15, 20]$

	1 pulso		2 pulsos	
$\tau = 0$	$t_1^* = 19$	$J^* = 11463$	$t_1^* = 19$ $t_2^* = 47$	$J^* = 9995$
$\tau = 5$	$t_1^* = 15$	$J^* = 11927$	$t_1^* = 15$ $t_2^* = 40$	$J^* = 11927$
$\tau = 10$	$t_1^* = 12$	$J^* = 13038$	$t_1^* = 9$ $t_2^* = 37$	$J^* = 12054$
$\tau = 15$	$t_1^* = 9$	$J^* = 14170$	$t_1^* = 4$ $t_2^* = 33$	$J^* = 13375$
$\tau = 20$	$t_1^* = 6$	$J^* = 14983$	$t_1^* = 6$ $t_2^* = 34$	$J^* = 14541$

os dois cenários. À medida que τ aumenta, os tempos diminuem de maneira similar. É possível observar também que para todos os valores de τ analisados, na estratégia de dois pulsos, o menor custo foi obtido agrupando os dois pulsos (formando assim um pulso só) ou alocando-os próximo um do outro. Isso significa que para a dinâmica sazonal proposta neste trabalho, as duas estratégias resultam em ações de controle similares. Assim, a redução do custo obtida com dois pulsos não foi considerada significativa. Do ponto de vista prático utilizar os dois pulsos seria o mesmo que aplicar a campanha em um período contínuo com uma pequena interrupção. Isso dificulta a logística da campanha, pois seria necessário interromper a campanha no meio por um curto período de tempo. Logo, por ser mais simples, a estratégia utilizando apenas um pulso será recomendada.

A Figura 5.4 apresenta os valores de t_1^* juntamente com as curvas J com seus respectivos t_1 para valores de $\tau = [0, 1, \dots, 40]$.

Pode-se observar na Figura 5.4(a) que à medida que τ aumenta, t_1 tende a diminuir. Tal fenômeno pode ser associado ao fato de que quanto maior o τ mais lenta será a dinâmica da assimilação da campanha e conseqüentemente o controle deverá ser aplicado mais precocemente. A Figura 5.4(b) corrobora a análise anterior, mostrando que, com o aumento de τ , t_1^* diminui e J^* tende a aumentar. Vale salientar que para valores de $\tau > 20$ aproximadamente, as curvas de J mostram uma pequena sensibilidade para variações de t_1 . Este comportamento ilustra que quando a constante de tempo τ é muito grande, a campanha acaba não surtindo efeitos, e assim a escolha de t_1 não irá reduzir o custo expressivamente.

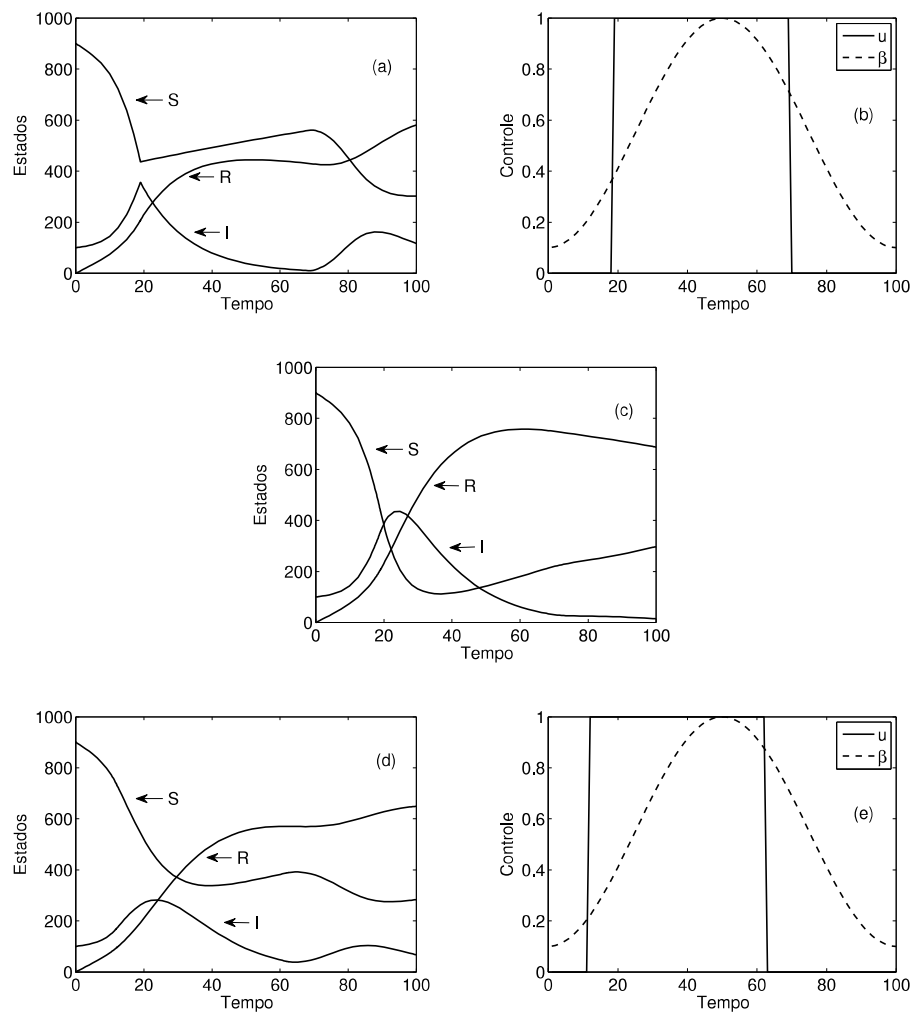


Figura 5.3: Resultado de três simulações contendo (a) os estados e (b) o controle ótimo para $\tau = 0$, (c) os estados para $\tau = 10$ utilizando o controle obtido em (b) e (d) estados e (e) o controle para $\tau = 10$.

5.6 Considerações finais para epidemias com transmissão sazonal através de métodos de barreira

Este trabalho propôs o uso do SIR para alocação temporal de um controle ótimo para a dinâmica da influenza sazonal utilizando métodos de barreira e com recursos limitados. Verificou-se que o controle ótimo escolhido alocou os recursos na região do horizonte de tempo em que o contágio era mais intenso, quando aplicado instantaneamente. Quando a campanha requer um tempo para que se torne efetiva, observou-se que as menores quantidades de indivíduos infectados no decorrer da simulação foram apresentadas adiantando a ação de controle. Os resultados acima mostrados foram publicados em [48].

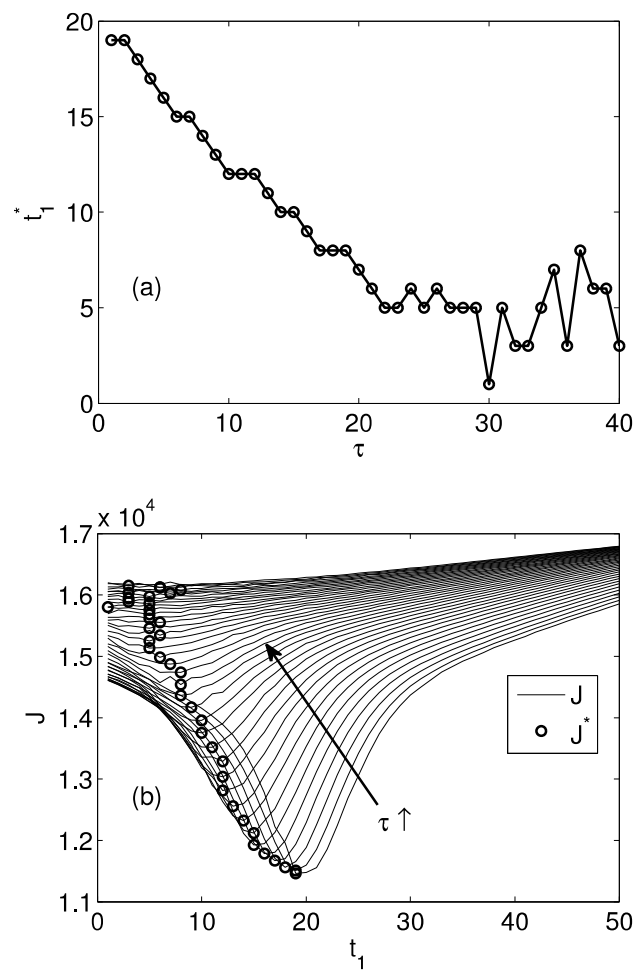


Figura 5.4: Resultados da otimização empregando um pulso, para diferentes valores de τ .

Avaliação do controle ótimo com abordagem estocástica utilizando modelos epidemiológicos baseados em indivíduos

O modelo clássico SIR possibilitou otimizar a alocação temporal de recursos limitados para combate de uma dinâmica epidemiológica sazonal com métodos de barreira.

É possível encontrar na literatura outras dinâmicas baseadas no modelo SIR, considerando tempo de incubação [95, 46], dependência da taxa de natalidade [119, 139], dinâmica sazonal [11, 48], dinâmicas não lineares [20, 38, 137], modelagem discreta [4, 68], estocástica [5, 8], considerando heterogeneidades [78, 98, 114, 129], dentre outras.

Existem ainda diversos estudos propondo estratégias para mitigar a disseminação da epidemia aplicando vacinação pulsada [48, 88, 99, 132], estudos da obtenção do controle ótimo [14, 19, 59, 66, 140], controle considerando comportamento sazonal [81, 109], políticas de isolamento [82, 133], dentre outras. Tais trabalhos conseguiram uma redução considerável na propagação da epidemia ou na contagem final dos indivíduos contaminados.

Modelos compartimentais, como o SIR e o SIRC têm implementação simples e por isso amplamente utilizados na busca por políticas de controle ótimo [11, 37, 112, 136]. Como são modelos determinísticos, a análise da política de controle ótimo em questão será avaliada sob as mesmas condições, o que não se assemelha a um cenário realístico. Deste modo seria interessante inserir incertezas no modelo para avaliar a política de controle ótimo em cenário estocástico. Tal procedimento agregaria variabilidade nos resultados, que seriam agora analisados em média, possibilitando a verificação de melhores/piiores casos. Acredita-se que assim é possível agregar uma certa robustez ao modelo. Existem buscas de controle em modelos compartimentais estocásticos [5, 12, 67] que poderiam ser usados para este fim, porém ainda assim estariam limitados em relação à heterogeneidade.

Dessa forma o MBI pode ser usado tanto para inserção de heterogeneidades

individuais quanto à análise de incertezas do modelo. Neste contexto, este capítulo propõe o uso dos modelos SIR e SIRC determinísticos para obtenção do controle ótimo, e posteriormente avaliação desta política de controle aplicada em um cenário homogêneo utilizando modelo MBI equivalente.

6.1 Controle aplicado ao SIR

Para reduzir a disseminação da doença na população será adotado no modelo SIR com uma campanha para o uso de métodos de barreira em conjunto da vacinação [14, 97, 108]. Tal método pode ser aplicado na sociedade através de campanhas educativas e imunização dos indivíduos infectados. A representação do método de barreira no modelo é dada pelo uso do controle u_b visando à redução da taxa de infecção associada a $\beta(t)$. Já a representação do método de vacinação é dada pelo uso do controle u_v para retirar uma parcela de indivíduos da classe susceptíveis para a classe recuperados. O modelo com os controles acoplados é dado por

$$\begin{aligned} dS/dt &= \mu(N - S(t)) - \beta \frac{I(t)S(t)}{N} (1 - u_b(t)) - S(t)u_v(t) \\ dI/dt &= \beta \frac{I(t)S(t)}{N} (1 - u_b(t)) - (\gamma + \mu)I(t) \\ dR/dt &= \gamma I(t) - \mu R(t) + S(t)u_v(t) \end{aligned} \quad (6-1)$$

onde $S(t) + I(t) + R(t) = N$ e condições iniciais dadas por

$$\begin{aligned} S(0) &= S_0, \quad \forall 0 \leq S_0 \leq N \\ I(0) &= I_0, \quad \forall 0 \leq I_0 \leq N \\ R(0) &= R_0, \quad \forall 0 \leq R_0 \leq N. \end{aligned} \quad (6-2)$$

O problema de controle ótimo consiste em minimizar a função custo dada por

$$J(u) = \int_{t_0}^{t_f} [P_1 I(t) + P_2 (\frac{1}{2} u_v^2(t) + \frac{1}{2} u_b^2(t))] dt, \quad (6-3)$$

onde P indica o peso associado à $I(t)$ e

$$\begin{aligned} 0 &\leq u_v(t) \leq 1, \quad \forall t \in [0, t_f] \\ 0 &\leq u_b(t) \leq 1, \quad \forall t \in [0, t_f]. \end{aligned} \quad (6-4)$$

A busca pelo controle ótimo é determinada pelo seguinte problema: Dado o modelo na Equação (6-1), com condições iniciais da Equação (6-2), determinar os estados S , I e R e os controles u_v e u_b que satisfaçam o sistema da Equação (6-1), as condições

da Equação (6-4) e ainda minimização do custo da Equação (6-3). Assim, o objetivo é determinar a melhor estratégia que minimiza o número de indivíduos infectados e os recursos aplicados nos controles levando em conta os intervalos fixados.

Para o calculo do controle, o Hamiltoniano é definido por

$$\begin{aligned} H(x(t), u(t), \lambda(t)) = & [P_1 I(t) + P_2 (\frac{1}{2} u_v^2(t) + \frac{1}{2} u_b^2(t))] \\ & + \lambda_1(t) [\mu(N - S(t)) - \beta \frac{I(t)S(t)}{N} (1 - u_b(t)) - S(t)u_v(t)] \\ & + \lambda_2(t) [\beta \frac{I(t)S(t)}{N} (1 - u_b(t)) - (\gamma + \mu)I(t)] \\ & + \lambda_3(t) [\gamma I(t) - \mu R(t) + S(t)u_v(t)] \end{aligned} \quad (6-5)$$

onde x são os estados, u os controles e λ os multiplicadores de Lagrange.

Com isso, as Equações de co-estado, dada por $\dot{\lambda} = -H_x$, podem ser escritas como:

$$\begin{aligned} \dot{\lambda}_1(t) &= -\frac{\partial H(x(t), u(t), \lambda(t))}{\partial S(t)} \\ &= -[\lambda_1(t)(-\mu - \beta \frac{I(t)}{N} (1 - u_b(t)) - u_v(t)) + \lambda_2(t)\beta \frac{I(t)}{N} (1 - u_b(t)) + \lambda_3(t)(u_v(t))] \\ \dot{\lambda}_2(t) &= -\frac{\partial H(x(t), u(t), \lambda(t))}{\partial I(t)} \\ &= -[P_1 - \lambda_1(t)\beta \frac{S(t)}{N} (1 - u_b(t)) + \lambda_2(t)(\beta \frac{S(t)}{N} (1 - u_b(t)) - (\mu + \gamma)) + \lambda_3(t)\gamma] \\ \dot{\lambda}_3(t) &= -\frac{\partial H(x(t), u(t), \lambda(t))}{\partial R(t)} \\ &= \lambda_3(t)\mu \end{aligned} \quad (6-6)$$

Isolando os termos dependentes do controle $u(t)$ da Equação (6-5), tem-se

$$\begin{aligned} P_2 (\frac{1}{2} u_v^2(t) + \frac{1}{2} u_b^2(t)) - \lambda_1(t)(-\beta \frac{I(t)S(t)}{N} (1 - u_b(t)) + S(t)u_v(t)) \\ + \lambda_2(t)\beta \frac{I(t)S(t)}{N} (1 - u_b(t)) + \lambda_3(t)S(t)u_v(t) \end{aligned} \quad (6-7)$$

pode-se então calcular os controles

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial u_v} &= P_2 u_v(t) - \lambda_1(t)S(t) + \lambda_3(t)S(t) = 0 \\ u_v^*(t) &= \frac{S(t)}{P_2} (-\lambda_1^*(t) + \lambda_3^*(t)) \end{aligned} \quad (6-8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial u_b} &= P_2 u_b(t) + \lambda_1(t)\beta \frac{I(t)S(t)}{N} - \lambda_2(t)\beta \frac{I(t)S(t)}{N} = 0 \\ u_b^*(t) &= -\beta \frac{I(t)S(t)}{P_2 N} (\lambda_1^*(t) - \lambda_2^*(t)) \end{aligned}$$

Associando a Equação (6-8) e as restrições da Equação (6-4), segundo o Princí-

A equivalência entre os modelos SIR e MBI-SIR considerando o controle é dada escolhendo de modo apropriado os parâmetros P_{vac} e P_{barr} . Dado um passo de tempo Δt a ser utilizado na simulação do MBI, a equivalência é obtida impondo-se $P_{vac} = u_v \Delta t$ e $P_{barr} = u_b \Delta t$. As mesmas considerações quanto aos demais parâmetros apresentados na Seção 2.2.1 devem ser respeitados.

Para exemplificar o cenário, o algoritmo para simulação do MBI-SIR incluindo o controle foi codificado para confrontar com o modelo SIR equivalente. O SIR foi simulado empregando-se o método numérico de Dormand-Prince [35]. O controle ótimo foi obtido utilizando a descida de gradiente. O algoritmo com maiores detalhes pode ser encontrado no trabalho de Kirk [75].

Os parâmetros adicionados ao modelo com o controle também serão os mesmos para o SIR e o MBI-SIR. Os novos parâmetros utilizados pelo MBI e associados à função de custo são $P_1 = 1$, $P_2 = 0.01$, $t_0 = 0$ e $t_f = 100$ e as condições iniciais $S(0) = N * (0.990)$, $I(0) = N * (0.010)$ e $R(0) = 0$.

A Figura 6.2 apresenta os resultados de três simulações realizadas com diferentes valores de tamanho da população (N) e passo de tempo no modelo MBI (Δt). Os resultados obtidos com o MBI tendem a se aproximar daqueles gerados pelo modelo SIR à medida que N aumenta e $\Delta(t)$ diminui.

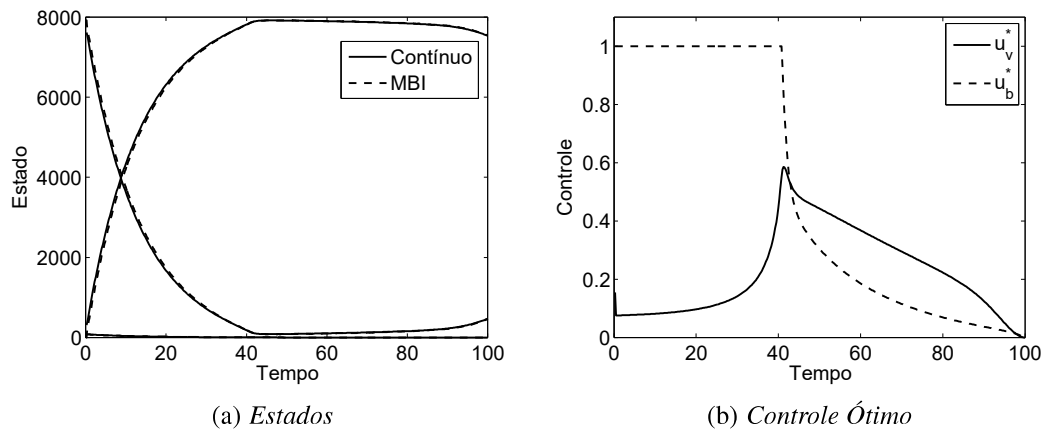


Figura 6.2: Resultados da simulação confrontando SIR e o MBI considerando os controles.

É possível na Figura 6.2b observar que a alocação dos recursos de controle foram despendidos no início do horizonte de tempo. O intervalo de tempo é correspondente ao momento em que a infecção atingiu seu nível máximo, que pode ser observado pelo pico na curva do estado I na Figura 2.4. O resultado da aplicação desse controle pode ser observado na Figura 6.2a com a ausência do pico na curva do estado I citado anteriormente.

O modelo SIR sem o controle foi novamente simulado para confrontar com os resultados obtidos pelo SIR com os controles. A Figura 6.3 mostra que a aplicação do controle gera uma redução considerável na quantidade de indivíduos infectados.

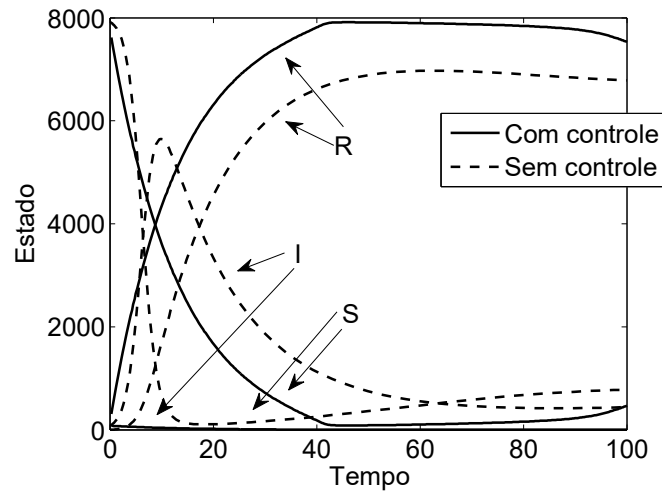


Figura 6.3: Comparação entre o modelo SIRC com e sem a utilização do controle.

6.3 Controle aplicado ao SIRC

Para a redução da disseminação da doença no SIRC será aplicado uma campanha utilizando métodos de tratamento em conjunto da vacinação [21, 66]. O método pode ser aplicado na sociedade através da imunização dos indivíduos susceptíveis e de auxílio médico/medicamentoso dos indivíduos infectados. A representação do método de tratamento no modelo é dada pelo uso do controle u_t retirando uma parcela da classe infectados para a classe recuperados. A representação do método de vacinação continua com a adição do controle u_v no modelo para retirar uma parcela de indivíduos da classe susceptíveis para a classe recuperados. O modelo com os controles é dado por

$$\begin{aligned}
 dS(t)/dt &= \mu(N - S(t)) - \beta \frac{I(t)S(t)}{N} + \alpha C(t) - \rho_1 S(t)u_v(t) \\
 dI(t)/dt &= \beta \frac{I(t)S(t)}{N} + \sigma\beta \frac{C(t)I(t)}{N} - (\mu + \gamma)I(t) - \rho_2 I(t)u_t(t) \\
 dR(t)/dt &= \beta \frac{C(t)I(t)}{N} - \sigma\beta \frac{C(t)I(t)}{N} + \gamma I(t) - (\mu + \delta)R(t) + \rho_1 S(t)u_v(t) + \rho_2 I(t)u_t(t) \\
 dC(t)/dt &= \delta R(t) - \beta \frac{C(t)I(t)}{N} - (\mu + \alpha)C(t)
 \end{aligned} \tag{6-11}$$

onde $S(t) + I(t) + R(t) + C(t) = N$ e condições iniciais dadas por

$$\begin{aligned} S(0) &= S_0, & \forall 0 \leq S_0 \leq N \\ I(0) &= I_0, & \forall 0 \leq I_0 \leq N \\ R(0) &= R_0, & \forall 0 \leq R_0 \leq N \\ C(0) &= C_0, & \forall 0 \leq C_0 \leq N. \end{aligned} \quad (6-12)$$

O problema de controle ótimo considerado consiste em minimizar a função custo dada por

$$J(u) = \int_{t_0}^{t_f} [P_1 I(t) + P_2 (\frac{1}{2} u_v^2(t) + \frac{1}{2} u_t^2(t))] dt, \quad (6-13)$$

onde P indica o peso associado a $I(t)$ e

$$\begin{aligned} 0 &\leq u_v(t) \leq 0,9, & \forall t \in [0, t_f] \\ 0 &\leq u_t(t) \leq 0,9, & \forall t \in [0, t_f]. \end{aligned} \quad (6-14)$$

Desta forma a busca pelo controle ótimo é dada pelo seguinte problema: Dado o modelo da Equação (6-11), com condições iniciais da Equação (6-12), determinar os estados S , I , R e C e os controles u_v e u_t que satisfaçam o sistema da Equação (6-11), as condições da Equação (6-14) e ainda minimize o custo da Equação (6-13). Assim, o objetivo é determinar a melhor estratégia que minimiza o número de indivíduos infectados e os recursos aplicados nos controles levando em conta os intervalos fixados.

Para o cálculo do controle, o Hamiltoniano é definido por

$$\begin{aligned} H(x(t), u(t), \lambda(t)) &= [P_1 I(t) + P_2 (\frac{1}{2} u_v^2(t) + \frac{1}{2} u_t^2(t))] \\ &+ \lambda_1(t) [\mu(N - S(t)) - \beta \frac{I(t)S(t)}{N} + \alpha C(t) - \rho_1 S(t) u_v(t)] \\ &+ \lambda_2(t) [\beta \frac{I(t)S(t)}{N} + \sigma \beta \frac{C(t)I(t)}{N} - (\mu + \gamma) I(t) - \rho_2 I(t) u_t(t)] \\ &+ \lambda_3(t) [\beta \frac{C(t)I(t)}{N} - \sigma \beta \frac{C(t)I(t)}{N} + \gamma I(t) - (\mu + \delta) R(t) \\ &\quad - \rho_1 S(t) u_v(t) + \rho_2 I(t) u_t(t)] \\ &+ \lambda_4(t) [\delta R(t) - \beta \frac{C(t)I(t)}{N} - (\mu + \alpha) C(t)] \end{aligned} \quad (6-15)$$

onde x são os estados, u os controles e λ os multiplicadores de Lagrange.

Com isso, as Equações de co-estado, dadas por $\dot{\lambda} = -H_x$, podem ser escritas

como:

$$\begin{aligned}
\dot{\lambda}_1(t) &= -\frac{H(x(t),u(t),\lambda(t))}{\partial S(t)} \\
&= -[\lambda_1(t)(-\mu - \beta \frac{I(t)}{N} - \rho_1 u_v(t)) + \lambda_2(t)\beta \frac{I(t)}{N} + \lambda_3(t)(\rho_1 u_v(t))] \\
\dot{\lambda}_2(t) &= -\frac{H(x(t),u(t),\lambda(t))}{\partial I(t)} \\
&= -[P_1 - \lambda_1(t)\beta \frac{S(t)}{N} + \lambda_2(t)(\beta \frac{S(t)}{N} + \sigma \beta \frac{C(t)}{N} - (\mu + \gamma) - \rho_2 u_t(t)) \\
&\quad + \lambda_3(t)((1 - \sigma)\beta \frac{C(t)}{N} + \gamma + \rho_2 u_t(t)) - \lambda_4(t)\beta \frac{C(t)}{N}] \\
\dot{\lambda}_3(t) &= -\frac{H(x(t),u(t),\lambda(t))}{\partial R(t)} \\
&= \lambda_3(t)(\mu + \delta) - \lambda_4(t)\delta \\
\dot{\lambda}_4(t) &= -\frac{H(x(t),u(t),\lambda(t))}{\partial C(t)} \\
&= -\lambda_1(t)\alpha - \lambda_2(t)\sigma \beta \frac{I(t)}{N} - \lambda_3(t)(1 - \sigma)\beta \frac{I(t)}{N} - \lambda_4(t)(-\beta \frac{I(t)}{N} - (\mu + \alpha))
\end{aligned} \tag{6-16}$$

Isolando os termos dependentes do controle $u(t)$ da Equação (6-15), tem-se

$$\begin{aligned}
P_2(\frac{1}{2}u_v^2(t) + \frac{1}{2}u_t^2(t)) - \lambda_1(t)\rho_1 u_v(t)S(t) - \lambda_2(t)\rho_2 u_t(t)I(t) \\
+ \lambda_3(t)[\rho_1 u_v(t)S(t) + \rho_2 u_t(t)I(t)]
\end{aligned} \tag{6-17}$$

pode-se então calcular os controles

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H}{\partial u_v} &= P_2 u_v(t) - \lambda_1(t)\rho_1 S(t) + \lambda_3(t)\rho_1 S(t) = 0 \\
u_v^*(t) &= \frac{\rho_1 S(t)}{P_2}(\lambda_1^*(t) - \lambda_3^*(t))
\end{aligned} \tag{6-18}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H}{\partial u_t} &= P_2 u_t(t) - \lambda_2(t)\rho_2 I(t) + \lambda_3(t)\rho_2 I(t) = 0 \\
u_t^*(t) &= \frac{\rho_2 I(t)}{P_2}(\lambda_2^*(t) - \lambda_3^*(t))
\end{aligned}$$

Associando a Equação (6-18) e as restrições da Equações (6-14), segundo o Princípio do Mínimo de Pontryagin, pode-se concluir que:

$$u_v^*(t) = \begin{cases} 0, & \text{se } \frac{\rho_1 S(t)}{P_2}(\lambda_1^*(t) - \lambda_3^*(t)) \leq 0, \\ \frac{\rho_1 S(t)}{P_2}(\lambda_1^*(t) - \lambda_3^*(t)), & \text{se } 0 < \frac{\rho_1 S(t)}{P_2}(\lambda_1^*(t) - \lambda_3^*(t)) < 0,9, \\ 0,9, & \text{se } \frac{\rho_1 S(t)}{P_2}(\lambda_1^*(t) - \lambda_3^*(t)) \geq 0,9. \end{cases} \tag{6-19}$$

$$u_t^*(t) = \begin{cases} 0, & \text{se } \frac{\rho_2 I(t)}{P_2}(\lambda_2^*(t) - \lambda_3^*(t)) \leq 0, \\ \frac{\rho_2 I(t)}{P_2}(\lambda_2^*(t) - \lambda_3^*(t)), & \text{se } 0 < \frac{\rho_2 I(t)}{P_2}(\lambda_2^*(t) - \lambda_3^*(t)) < 0,9, \\ 0,9, & \text{se } \frac{\rho_2 I(t)}{P_2}(\lambda_2^*(t) - \lambda_3^*(t)) \geq 0,9. \end{cases} \tag{6-20}$$

6.4 Adicionando o controle ao modelo MBI-SIRC

A Figura 6.4 mostra o fluxograma do SIRC com os controles. A simulação do

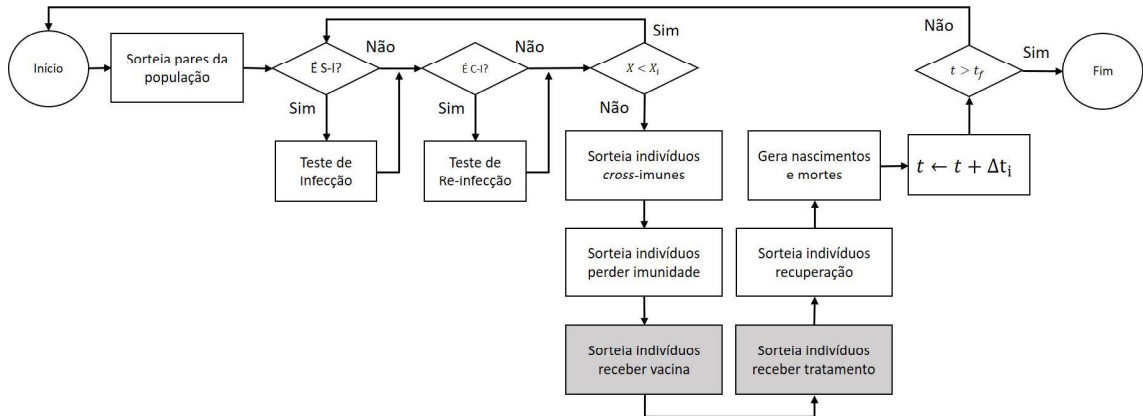


Figura 6.4: Fluxograma para simulação do MBI.

MBI-SIRC com o controle segue a mesma estrutura da simulação feita na Seção 3.1. A ação de controle está destacada nos quadrantes preenchidos. Os controles ótimos u_v e u_t , obtidos por algum método numérico, são passados inicialmente para o algoritmo. Também são definidos os valores dos parâmetros P_{vac} e P_{trat} , que representam a probabilidade de vacinação e a probabilidade de tratamento, respectivamente.

Para cada indivíduo susceptível gera-se um número aleatório a partir de uma distribuição $U[0, 1]$. Caso o número seja menor do que uma dada probabilidade de vacinação P_{vac} , o indivíduo suscetível (S) do par passa à condição de recuperado (R). Posteriormente, para cada indivíduo infectado gera-se um número aleatório a partir de uma distribuição $U[0, 1]$. Caso o número aleatório seja menor do que uma dada probabilidade de tratamento P_{trat} , o indivíduo infectado (I) do par passa à condição de recuperado (R). A simulação prossegue conforme descrito na Seção 3.1.

A equivalência entre os modelos SIRC e MBI-SIRC considerando o controle é dada escolhendo de modo apropriado os parâmetros P_{vac} e P_{trat} . Dado um passo de tempo Δt a ser utilizado na simulação do MBI, essa equivalência é obtida impondo-se $P_{vac} = \rho_1 u_v \Delta t$ e $P_{trat} = \rho_2 u_t \Delta t$. As mesmas considerações quanto aos demais parâmetros apresentados na Seção 3.1 devem ser respeitados.

Para exemplificar o cenário, o algoritmo para simulação do MBI-SIRC incluindo o controle foi codificado para confrontar com o modelo SIRC equivalente. Para esse propósito, o SIRC foi simulado empregando-se o método numérico de Dormand-Prince [35]. O controle ótimo foi obtido utilizando a descida de gradiente. O algoritmo com maiores detalhes pode ser encontrado no trabalho de Kirk [75].

Os parâmetros adicionados ao modelo com o controle também serão os mesmos para o SIRC e o MBI-SIRC. Os novos parâmetros utilizados pelo MBI e associados à

função de custo são $\rho_1 = 2$, $\rho_2 = 2$, $P_1 = 1$, $P_2 = 0.01$, $t_0 = 0$ e $t_f = 1$ e as condições iniciais $S(0) = N * (0.990)$, $I(0) = N * (0.010)$, $R(0) = 0$ e $C(0) = 0$.

A Figura 6.5 apresenta os resultados de três simulações realizadas com diferentes tamanhos da população (N) e passos de tempo no modelo MBI (Δt). Os resultados obtidos com o MBI tendem a se aproximar daqueles gerados pelo modelo SIRC à medida que N aumenta e Δt diminui.

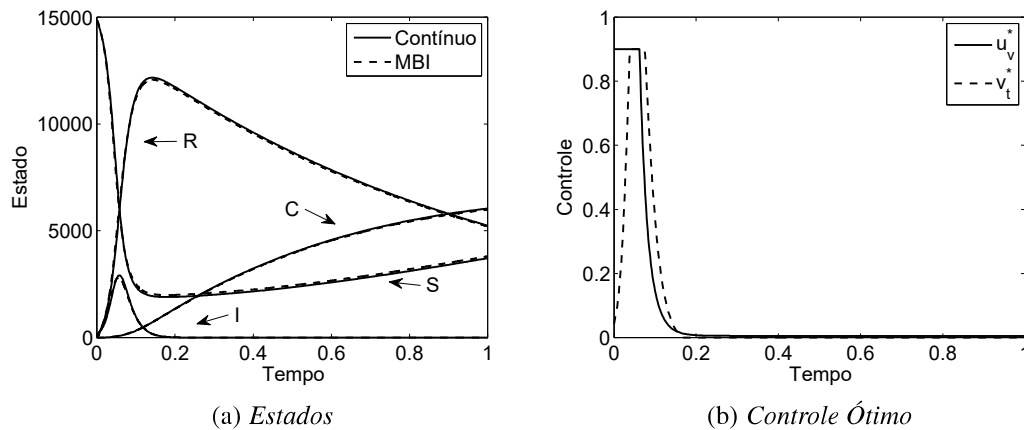


Figura 6.5: Resultados da simulação confrontando SIRC e o MBI considerando os controles.

É possível observar que a alocação dos recursos de controle foram despendidos no início do horizonte de tempo. O intervalo de tempo é correspondente ao momento em que a infecção atingiu seu nível máximo, que pode ser observado pelo pico na curva do estado I .

Para fins de comparação, o modelo SIRC sem o controle foi novamente simulado para confrontar com os resultados obtidos pelo SIRC com os controles. A Figura 6.6 mostra que a atuação do controle gera uma redução na quantidade de indivíduos infectados, porém a redução obtida não é muito expressiva para o exemplo proposto.

6.5 Material e Métodos

6.5.1 Estudo de caso

Pode-se concluir que o SIR e SIRC são bons modelos para simular a dinâmica da influenza. O modelo SIR se limita a representar somente o contágio da influenza por um vírus específico, sem levar em conta possíveis mutações ao longo do período de tempo considerado. Este limitante faz com que o indivíduo uma vez recuperado não se contamine outra vez. O SIRC cobre justamente esta limitação, incluindo a reinfeção do indivíduo, perda de imunidade e etc.

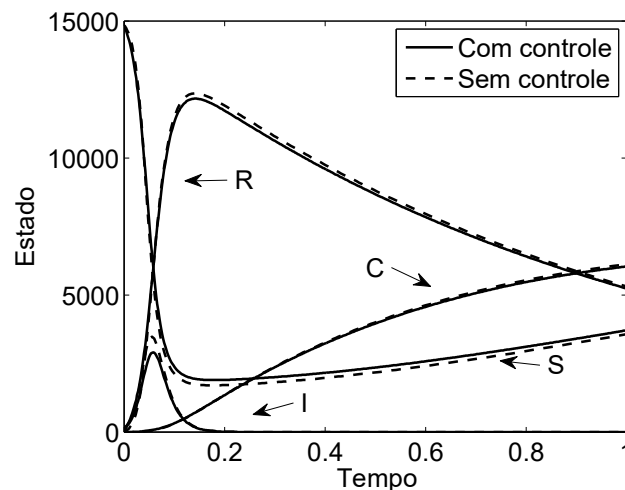


Figura 6.6: Comparação entre o modelo SIRC com e sem a utilização do controle.

Para o estudo de caso, os parâmetros utilizados no modelo SIR foram baseados nos trabalhos de Galvão, Bento e Nepomuceno [51, 97, 108]. Os parâmetros do modelo SIRC foram aplicado mais especificamente para a influenza. Eles foram escolhidos com base nos trabalhos de Casagrandi, Moustafa, Iacovieli, Jodar e Samanta [21, 37, 66, 71, 112].

6.5.2 Algoritmos empregados

Para obtenção do controle ótimo, foi utilizado o método numérico de descida de gradiente, apesar de alguns autores o chamarem de *Forward-Backward Sweep Method* [82, 109, 140]. Este algoritmo pode ser descrito da seguinte maneira:

1. Selecione uma aproximação discreta do controle nominal u como um palpite inicial;
2. Usando as condições iniciais dos estados $x(0)$ e os valores de u , resolva as equações de estados x adiante no tempo (*forward*) de acordo com as equações diferenciais dadas;
3. Usando a condição de transversalidade $\lambda(t_f) = 0$ e os valores de x e u , resolva as equações de co-estados λ retrocedendo o tempo (*backward*) de acordo com as equações diferenciais;
4. Atualize o controle u agregando os novos x e λ no cálculo do controle;
5. Se os valores das variáveis desta iteração forem muito próximos, apresente os resultados. Se não, retorne ao passo 2.

Maiores detalhes podem ser encontrados no trabalho de Kirk [75].

A descida de gradiente utilizada nos algoritmos propostos foi configurada de modo a otimizar três funções de custo diferentes, resultando em três algoritmos diferentes.

A primeira configuração leva em consideração os dois controles utilizados, como mostra a Equação (6-21). A segunda e a terceira levam em consideração apenas um dos controles utilizados, como é apresentado nas Equações (6-22) e (6-23).

$$J_u = \int_{t_0}^{t_f} [P_1 I(t) + P_2 (\frac{1}{2} u_1^2(t) + \frac{1}{2} u_2^2(t))] dt, \quad (6-21)$$

$$J_{u1} = \int_{t_0}^{t_f} [P_1 I(t) + P_2 (\frac{1}{2} u_1^2(t))] dt, \quad (6-22)$$

$$J_{u2} = \int_{t_0}^{t_f} [P_1 I(t) + P_2 (\frac{1}{2} u_2^2(t))] dt, \quad (6-23)$$

onde u_1 e u_2 são os controle utilizados, no SIR u_v e u_b , e para o SIRC u_v e u_t respectivamente, e $I(t)$ é o estado dos infectados em ambos os modelos propostos.

6.5.3 Forma de análise dos resultados

O modelos foram avaliados empregando dois parâmetros relacionados ao recurso gasto com a aplicação do controle e o impacto causado na população com sua aplicação. O gasto do controle, aqui chamado simplesmente de custo do controle, foi aferido com base no custo associado aos dois controles envolvidos no modelo, que é definido como:

$$J_u = \int_{t_0}^{t_f} [\frac{1}{2} u_1^2(t) + \frac{1}{2} u_2^2(t)] dt, \quad (6-24)$$

onde u_1 e u_2 são os controle utilizados.

O efeito provocado pelo uso do controle, chamado de impacto, foi avaliado com base na quantidade de indivíduos infectados no decorrer do horizonte de tempo e pode ser definido como:

$$J_i = \int_{t_0}^{t_f} [I(t)] dt, \quad (6-25)$$

onde $I(t)$ é o estado dos infectados em ambos os modelos propostos.

Estas condições foram escolhidas para verificar eficácia e o custo gerado para os controles sendo utilizados individualmente e em conjunto. As avaliações serão também confrontadas de modo multiobjetivo considerando diferentes pesos P_1 e P_2 . Para simplificar as simulações, as variações dos pesos P_1 e P_2 são configuradas da seguinte maneira:

$$P_1 = 1 \quad P_2 = P_1 / \text{Peso} \quad (6-26)$$

onde *Peso* passa a ser a constante a ser variada.

Nas simulações feitas com o modelo SIR o *Peso* foi variado nos valores de $[0,01;0,05;0,1;0,5;1;2;5;10;20]$. Para o SIRC o peso foi variado entre

[1; 10; 20; 30; 40; 50; 60; 70; 80; 90; 100; 200; 300; 400; 500; 600; 700]. Os limites dos valores empregados ao *Peso* foram obtidos de forma analítica de modo que, para valores acima ou abaixo dos limites, não houvesse alterações significativas nos resultados.

6.6 Resultados para o uso do MBI para avaliação do controle ótimo

Nesta Seção apresentam-se os resultados obtidos com o algoritmo SIR utilizando somente o controle por método de barreira, utilizando somente o controle por vacinação e por ultimo o utilizando as duas abordagens juntas. Será apresentado os resultados obtidos com o SIRC com o controle por vacinação, controle por tratamento e utilizando as duas abordagens simultaneamente. Ambas simulações serão avaliadas quanto ao custo gerado em sua aplicação e quanto ao impacto obtido na população. Em particular, avalia-se o efeito de se variar os pesos referente ao custo e ao impacto. Os resultados são apresentados conjuntamente a fim de formar uma análise comparativa entre os resultados individuais.

6.6.1 SIR

A Figura 6.7 mostra que, em média, quando J_u aumenta, J_I tende a diminuir. Esse comportamento pode ser justificado pelo fato dos indivíduos vacinados não contraírem a doença, e assim não a transmitem. Dessa forma é esperado que a quantidade de indivíduos infectados também caiam. Porém esta redução começa a estabilizar em aproximadamente $J_I = 6,5$ quando J_u alcança aproximadamente 10. A Figura 6.7 mostra o desvio padrão obtido em cada simulação. Os valores obtidos são mostrados na Tabela 6.1.

Para verificar o efeito do controle u_v nos infectados, a Figura 6.8 mostra o estado I obtido do modelo MBI com o controle, comparado ao do modelo SIR sem controle. Pode-se observar uma redução gradual da curva de indivíduos infectados a medida que o *Peso* aumenta.

A Figura 6.9 mostra que o uso somente do controle u_b gera uma bifurcação, ou seja existe um valor crítico para o *Peso* que possibilita uma mudança considerável no uso do recurso de controle. Esta mudança é apresentada, para este estudo de caso, como praticamente utilizar ou não o controle. É possível verificar que para o $Peso \leq 1 * 10^{-4}$ quase não é utilizado os recursos de controle, porém quando com o $Peso \geq 1 * 10^{-4}$ já o utiliza consideravelmente. A redução obtida estabiliza em $J_I = 7$ com o custo de controle em aproximadamente $J_I = 160$, mostrando que o uso do método de barreira também é eficaz porém muito mais caro que a vacinação. Os valores obtidos são mostrados na Tabela 6.2.

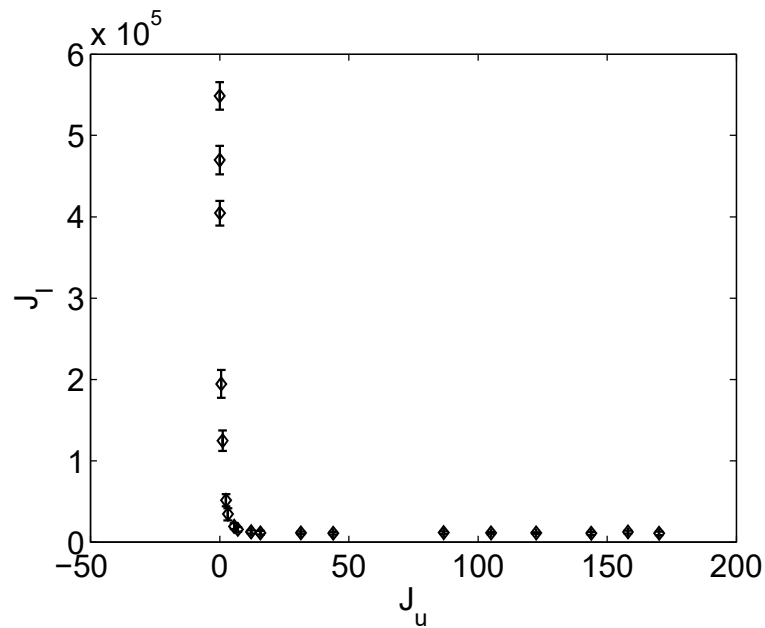


Figura 6.7: Resultados obtidos com a simulação do SIR utilizando somente o controle u_v .

Tabela 6.1: Valores de J_u e J_I obtidos com o SIR variando Peso utilizando o controle u_v

Peso	J_u	$J_I (*10^5)$
$1*10^{-7}$	0,0013	5,4868
$5*10^{-7}$	0,0250	4,6963
$1*10^{-6}$	0,0760	4,0455
$5*10^{-6}$	0,6308	1,9463
$1*10^{-5}$	1,1763	1,2467
$5*10^{-5}$	2,4819	0,5140
$1*10^{-4}$	3,2054	0,3446
$5*10^{-4}$	5,6305	0,1946
$1*10^{-3}$	7,0664	0,1585
$5*10^{-3}$	12,1979	0,1271
0,01	15,8043	0,1153
0,05	31,4599	0,1145
0,1	43,9214	0,1099
0,5	86,6893	0,1173
1	105,0103	0,1130
2	122,4961	0,1120
5	143,8012	0,1090
10	158,0131	0,1241
20	170,0882	0,1089

O efeito do controle u_b nos infectados pode ser observado na Figura 6.10 comparando o estado I obtido do modelo MBI com o controle e o modelo SIR sem controle. É possível observar alguns resultados próximos à curva do modelo sem controle,

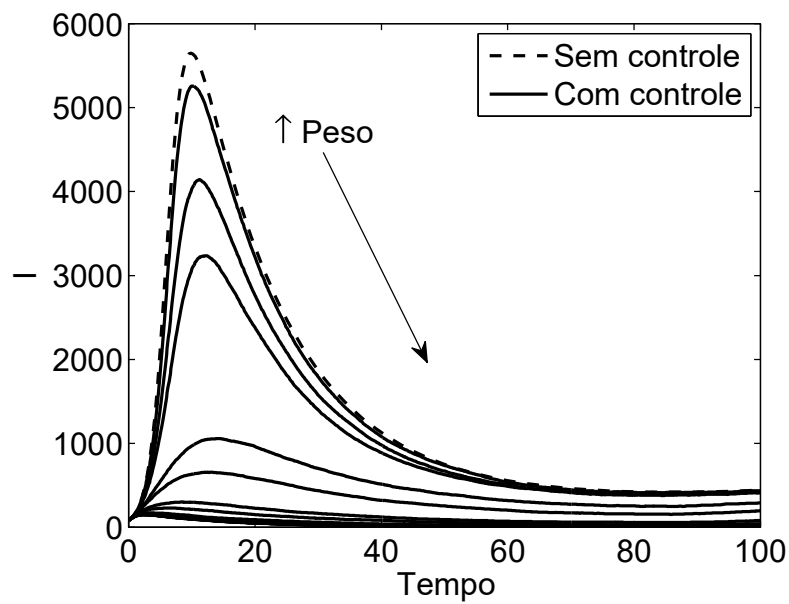


Figura 6.8: Resultados obtidos com a simulação do SIR utilizando somente o controle u_v .

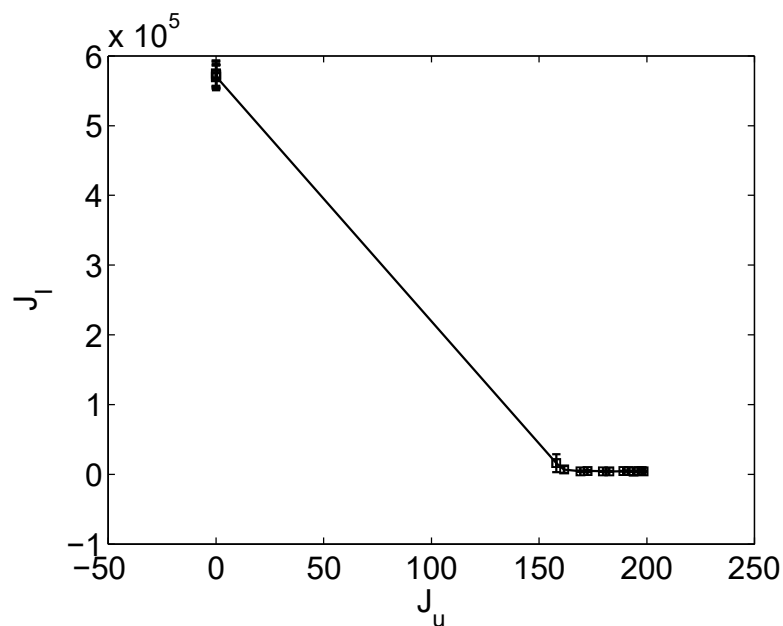


Figura 6.9: Resultados obtidos com a simulação do SIR utilizando somente o controle u_b .

referentes ao não uso do controle. Quando o controle é utilizado as curvas são levadas à zero, porém é possível observar na região próxima ao final do horizonte de tempo que medida que o *Peso* aumenta, menor é o valor final de I .

Figura 6.11 mostra os resultados utilizando ambos os controles. Observa-se também que aumentando J_u , o J_I tende a diminuir. A redução é um pouco mais significativa estabilizando em aproximadamente $J_I = 6,2$, e considerando o esforço de controle se mostrou bem similar à estratégia utilizando somente vacinação. Vale ressaltar que o com-

Tabela 6.2: Valores de J_u e J_I obtidos com o SIR variando Peso utilizando o controle u_b

Peso	J_u	$J_I (*10^5)$
$1*10^{-7}$	0,0000	5,7486
$5*10^{-7}$	0,0000	5,7034
$1*10^{-6}$	0,0000	5,7460
$5*10^{-6}$	0,0002	5,7061
$1*10^{-5}$	0,0008	5,6946
$5*10^{-5}$	0,0198	5,7338
$1*10^{-4}$	0,0817	5,7041
$5*10^{-4}$	158,0373	0,1585
$1*10^{-3}$	161,5955	0,0698
$5*10^{-3}$	169,2565	0,0433
0,01	172,4396	0,0466
0,05	179,6320	0,0437
0,1	182,6209	0,0416
0,5	189,1264	0,0447
1	191,6335	0,0458
2	193,8702	0,0389
5	196,2764	0,0459
10	197,6185	0,0444
20	198,5281	0,0416

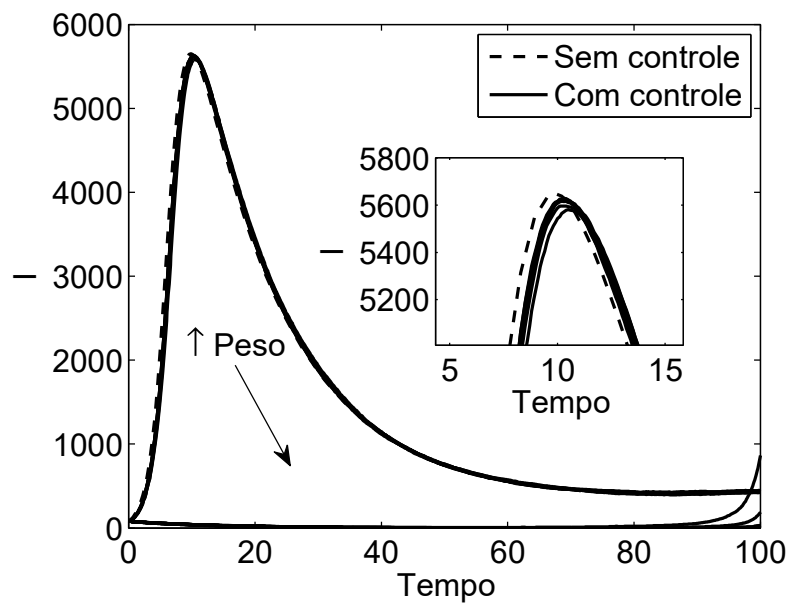


Figura 6.10: Resultados obtidos com a simulação do SIR utilizando somente o controle u_b .

portamento de bifurcação não foi obtido utilizando ambos os controle. Os valores obtidos são mostrados na Tabela 6.3.

O efeito dos dois controles pode ser observado na Figura 6.12 comparando o

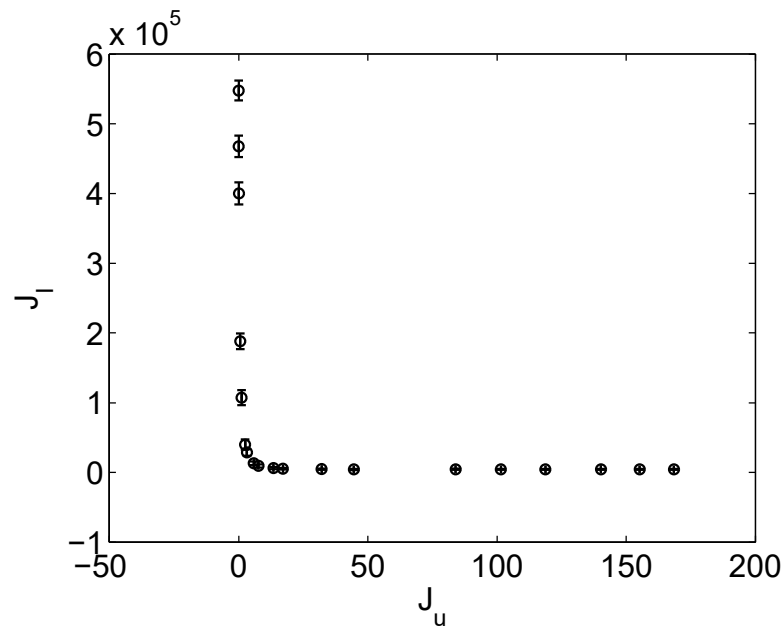


Figura 6.11: Resultados obtidos com a simulação do SIR utilizando os controles u_v e u_b .

Tabela 6.3: Valores de J_u e J_I obtidos com o SIR variando Peso utilizando os controles u_v e u_b

Peso	J_u	$J_I (*10^5)$
$1*10^{-7}$	0,0013	5.4778
$5*10^{-7}$	0,0251	4.6772
$1*10^{-6}$	0,0762	4.0019
$5*10^{-6}$	0,6372	1.8828
$1*10^{-5}$	1,1859	1.0724
$5*10^{-5}$	2,5021	0.3988
$1*10^{-4}$	3,2475	0.2882
$5*10^{-4}$	5,8505	0.1331
$1*10^{-3}$	7,6672	0.0945
$5*10^{-3}$	13,4987	0.0637
0.01	17,1382	0.0521
0.05	32,0863	0.0474
0.1	44,6029	0.0436
0.5	83,9778	0.0462
1	101,5259	0.0439
2	118,6954	0.0436
5	140,2627	0.0445
10	155,2351	0.0442
20	168,4893	0.0431

estado I obtido do modelo MBI com o controle e o modelo SIR sem controle.

Confrontando os resultados anteriores em um só gráfico a contribuição do uso dos dois controles simultaneamente mostrou-se o melhor resultado médio. Porém, ana-

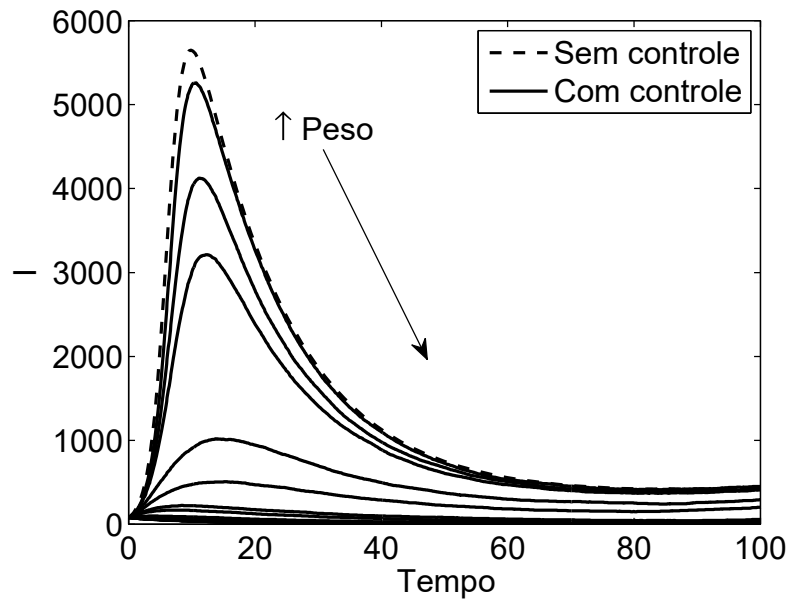


Figura 6.12: Resultados obtidos com a simulação do SIR utilizando somente os controles u_v e u_b .

lisando os desvios padrões, tais resultados foram muito próximos aos obtidos utilizando somente a vacinação.

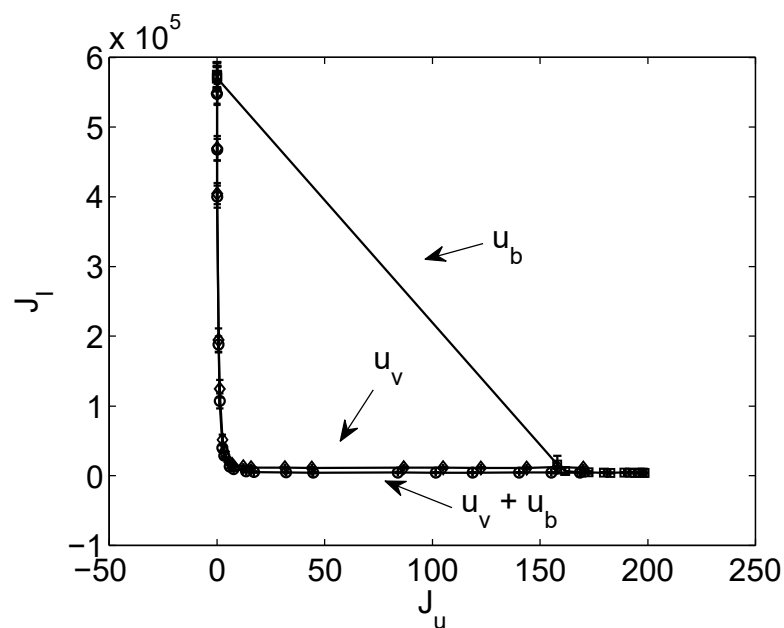


Figura 6.13: Resultados obtidos com a simulação do SIR utilizando os controle u_v e u_b .

6.6.2 SIRC

Na Figura 6.14, é possível observar que, em média, quando J_u aumenta, J_I tende a diminuir. Tal comportamento pode ser justificado pelo fato dos indivíduos vacinados não

contraírem a doença, e assim não transmitem. Dessa forma é esperado que a quantidade de indivíduos infectados caiam. Porém, esta redução começa a estabilizar em aproximadamente $J_I = 6,5$ quando J_u alcança aproximadamente 10. A Figura 6.14 também mostra o desvio padrão obtido em cada simulação. Os valores obtidos são mostrados na Tabela 6.4.

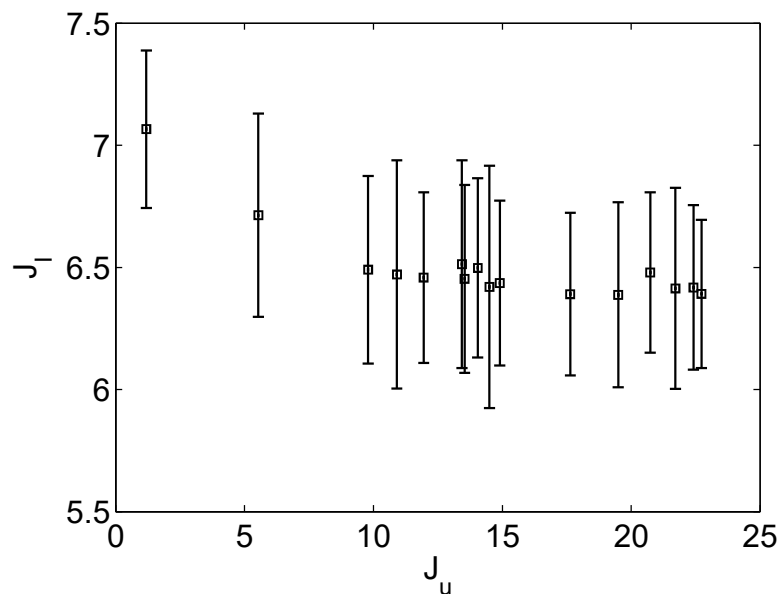


Figura 6.14: Resultados obtidos com a simulação do SIRC utilizando somente o controle u_v .

Tabela 6.4: Valores de J_u e J_I obtidos com o SIRC variando Peso utilizando o controle u_v

Peso	J_u	J_I
10	1,1810	7,0661
20	5,5250	6,7138
30	9,7890	6,4907
40	10,9065	6,4710
50	11,9771	6,4584
60	13,4341	6,5137
70	13,5364	6,4531
80	14,0441	6,4982
90	14,4945	6,4202
100	14,8989	6,4359
200	17,6354	6,3908
300	19,4966	6,3874
400	20,7362	6,4191
500	21,7137	6,4141
600	22,4153	6,4178
700	22,7218	6,3917

Para verificar o efeito do controle u_v nos infectados, a Figura 6.15 mostra o estado I obtido do modelo MBI com o controle, comparado ao do modelo SIRC sem controle.

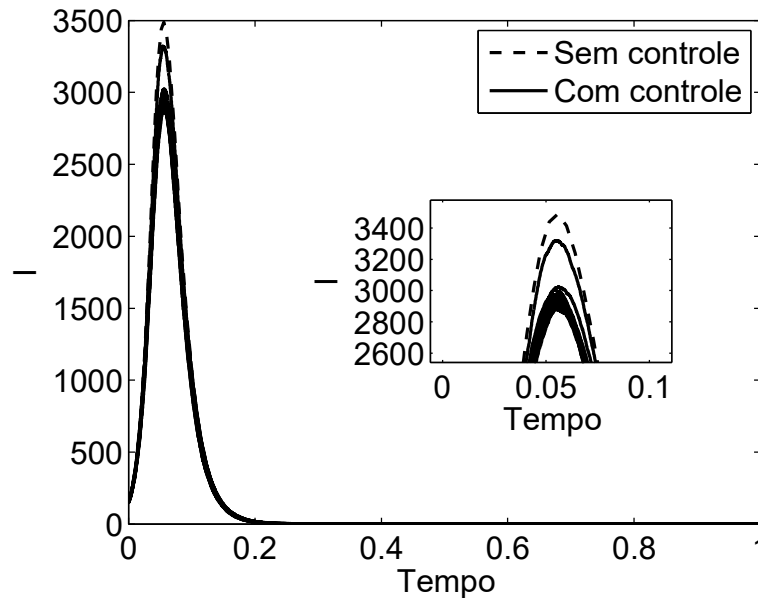


Figura 6.15: Resultados obtidos com a simulação do SIRC utilizando somente o controle u_v .

A Figura 6.16 mostra um comportamento similar a Figura 6.14, porém com uma diminuição mais suave. Tal redução estabiliza em aproximadamente $J_I = 7$, mostrando que o uso do tratamento é sutilmente pior que a vacinação. Quando o desvio padrão é analisado, percebe-se que a redução é relativamente pequena, mostrando que somente o controle por tratamento para o modelo SIRC com os parâmetros escolhidos não é um fator decisivo na redução da infecção. Os valores obtidos são mostrados na Tabela 6.5.

O efeito do controle nos infectados pode ser observado na Figura 6.17 comparando o estado I obtido do modelo MBI com o controle e o modelo SIRC sem controle. A Figura 6.18 mostra que aumentando J_u , J_I tende a diminuir. A diminuição já é mais significativa, estabilizando em aproximadamente $J_I = 6,2$. Os valores obtidos são mostrados na Tabela 6.6.

O efeito dos dois controles pode ser observado na Figura 6.19 comparando o estado I obtido do modelo MBI com o controle e o modelo SIRC sem controle.

Confrontando todos os resultados em um só gráfico, verifica-se que a contribuição do uso dos dois controles simultaneamente é destacada. Pode-se concluir através dos desvios padrões, que o modelo SIRC proposto não se mostrou muito sensível aos controles aplicados.

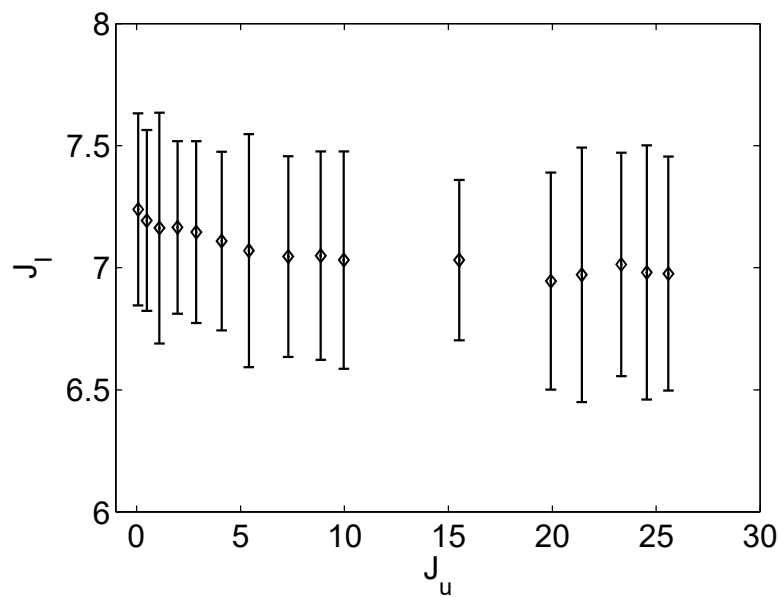


Figura 6.16: Resultados obtidos com a simulação do SIRC utilizando somente o controle u_t .

Tabela 6.5: Valores de J_u e J_I obtidos com o SIRC variando Peso utilizando o controle u_t

Peso	J_u	J_I
10	0,0762	7,2386
20	0,4923	7,1930
30	1,1020	7,1627
40	1,9689	7,1648
50	2,8732	7,1456
60	4,0912	7,1093
70	5,4022	7,0705
80	7,2947	7,0457
90	8,8556	7,0491
100	9,9672	7,0310
200	15,5242	7,0311
300	19,9323	6,9446
400	21,4192	6,9707
500	23,3182	7,0132
600	24,5495	6,9807
700	25,5916	6,9758

6.7 Considerações finais para os modelos epidemiológicos baseados em indivíduos

Nesta etapa investigou-se o uso de um modelo baseado em indivíduos para inserção de incertezas à dinâmica dos modelos SIR e SIRC. Os resultados foram avaliados em um estudo de caso baseados na influenza comum e influenza A em relação ao custo

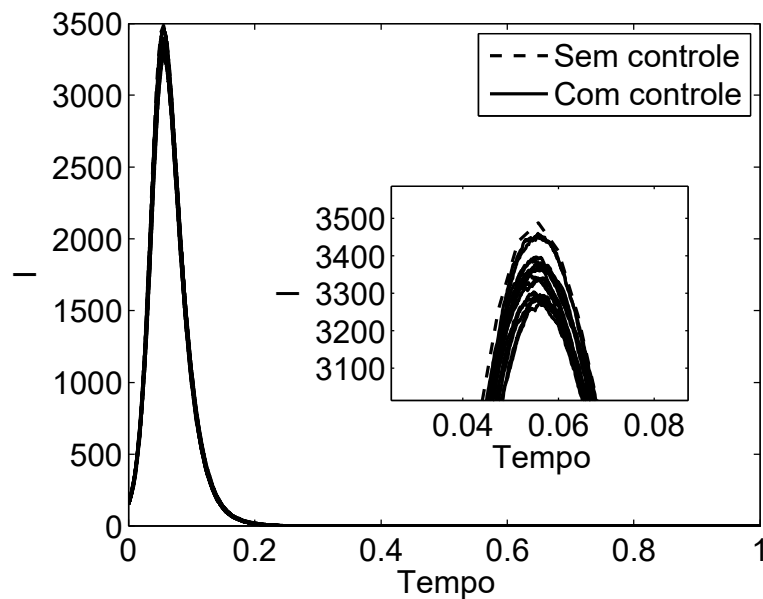


Figura 6.17: Resultados obtidos com a simulação do SIRC utilizando somente o controle u_t .

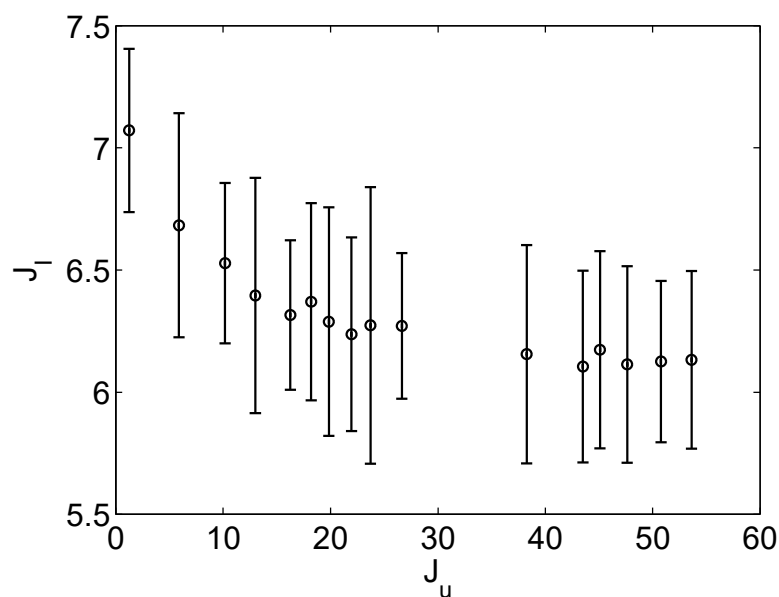


Figura 6.18: Resultados obtidos com a simulação do SIRC utilizando os controles u_v e u_t .

gasto pelo controle e seu impacto gerado na população.

Adicionando o controle de vacinação e barreira no modelo MBI proposto para SIR, verificou-se a redução considerável da quantidade de indivíduos infectados, mostrando que a estratégia de controle é válida e eficaz para a contenção da epidemia. O método de barreira mostrou um comportamento de bifurcação, se mostrando mais caro que o método de vacinação. O método de vacinação se mostrou similar à estratégia utilizando ambos os controles, concluindo-se assim que o método de barreira para este estudo

Tabela 6.6: Valores de J_u e J_I obtidos com o SIRC variando Peso utilizando os controles u_v e u_t

Peso	J_u	J_I
10	1,2295	7,0717
20	5,8841	6,6833
30	10,1642	6,5278
40	12,9989	6,3955
50	16,2480	6,3162
60	18,1939	6,3705
70	19,8458	6,2887
80	21,9387	6,2371
90	23,7233	6,2733
100	26,6415	6,2710
200	45,0821	6,1736
300	38,2615	6,1552
400	43,4972	6,1052
500	47,6157	6,1133
600	50,7696	6,1254
700	53,6168	6,1322

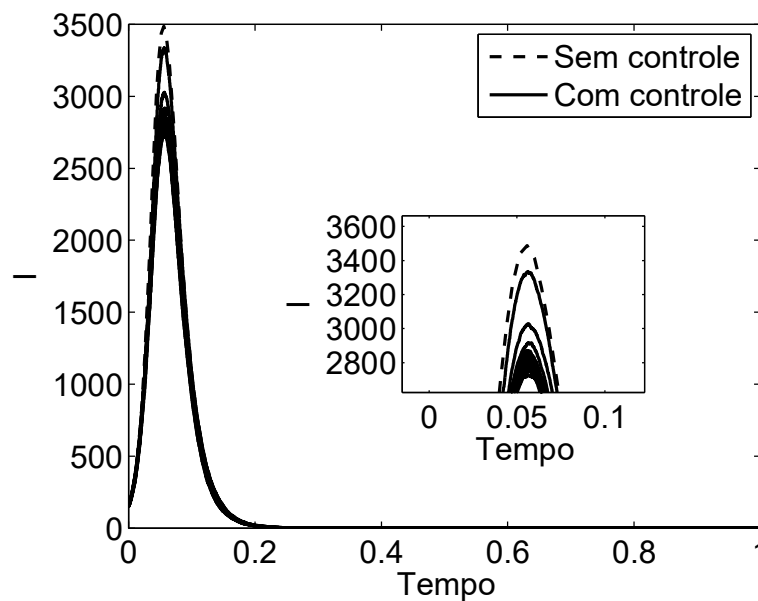


Figura 6.19: Resultados obtidos com a simulação do SIRC utilizando somente os controles u_v e u_t .

não se mostrou satisfatório.

Adicionando o controle de vacinação e tratamento ao modelo MBI proposto para SIRC, verificou-se a redução da quantidade de indivíduos infectados, mostrando que a estratégia de controle é válida porém para o estudo de caso aplicado se mostrou pouco sensível.

Comparando os estudos de casos, o modelo SIR obteve melhores resultados

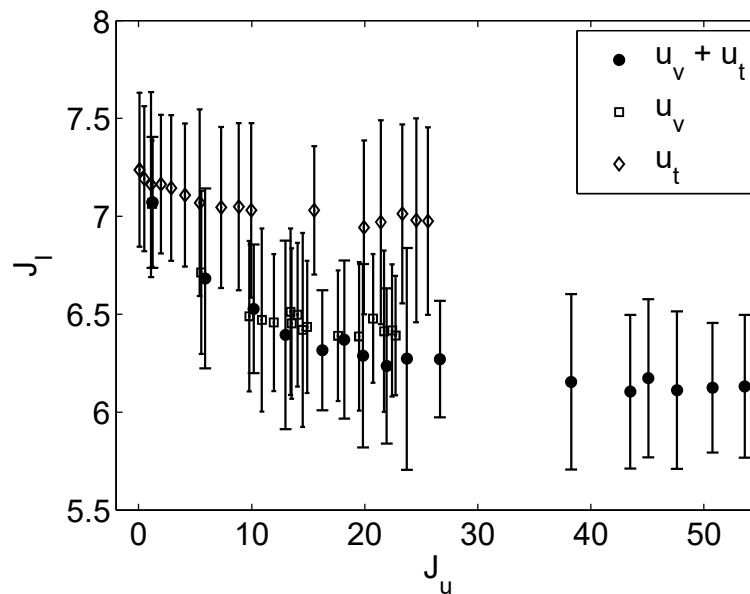


Figura 6.20: Resultados obtidos com a simulação do SIRC utilizando os controle u_v e u_t .

considerando a estratégia de controle utilizada. Verificou-se que o modelo SIR foi mais sensível ao uso dos controle se comparado ao SIRC na média.

O uso do modelo MBI para inserir incertezas possibilitou a análise das dinâmicas em um cenário estocástico. O modelo SIR evidenciou uma diferença expressiva quanto ao uso dos controle individualmente em relação do uso em conjunto. Porém, devido ao fato do modelo SIRC não ter se mostrado tão sensível aos controles utilizados neste estudo de caso, não foi possível obter uma boa visualização da estratégia a ser utilizada. De acordo com os desvios padrões obtidos não há uma diferença expressiva entre os pesos variados.

A análise utilizando o custo gerado pelo controle em conjunto com o impacto dele na população foi de grande valia, uma vez que as simulações não foram feitas com apenas um peso para cada critério de avaliação. Desta forma foi possível verificar 16 cenários para o SIRC e 19 para o SIR.

Os artigos contendo resultados obtidos com a avaliação da alocação de recursos de controle nos modelos MBI-SIR e MBI-SIRC estão em fase de submissão (MBI-SIR) e revisão (MBI-SIRC).

Estratégias para controle de epidemias em redes empregando simulação de Monte Carlo

Uma alternativa aos modelos compartimentais ou baseado em indivíduos discutidos no Capítulo 6, são os modelos baseados em redes complexas [15]. Os modelos baseados em redes complexas proporcionam a representação de heterogeneidades individuais, diferentes topologias e outras características que os tornam ainda mais flexíveis que os outros modelos citados [15, 107, 101].

É possível encontrar na literatura diversas dinâmicas modeladas e aplicadas em redes complexas, como estudos de disseminação de epidemias em redes *free-scale* [52, 84, 107], propagação de rumores na população [83, 124, 138], modelagem em epidemiologia veterinária [34, 79], propagação de doenças sexualmente transmissíveis [54], reconhecimento de padrões de propagação de vírus em celulares [130], ataque a rede de computadores [116, 117], dentre outras.

Existem ainda diversos estudos propondo estratégias para mitigar a disseminação da epidemia [101, 106]. A maioria das estratégias visam reduzir a disseminação buscando pelo nó com um maior potencial para disseminar a epidemia e assim imunizá-lo. A principal maneira de encontrar este nó é associar seu potencial de transmissão com maior grau de centralidade na rede [58, 106]. São exemplos de métricas de centralidade a intermediação [47, 116, 117], o grau [2, 131], autovalores [22, 125], *k-shell* [16, 76], dentre outras. Estes trabalhos conseguiram uma redução considerável na propagação da epidemia ou na contagem final dos indivíduos contaminados.

O estado da arte propõe aprimoramentos utilizando das métricas de centralidade para reduzir a propagação da doença. Alguns trabalhos obtiveram melhores resultados com o uso de algoritmos adaptativos no cálculo das centralidades [64, 115], escolhendo estocasticamente o indivíduo a ser imunizado de acordo com probabilidades baseadas na centralidade [29], buscando os indivíduos a serem imunizados através de caminhadas aleatórias na rede [72, 100], avaliando os vizinhos mais próximos aos indivíduos com maior centralidade [63, 80], entre outras metodologias.

As técnicas citadas se baseiam em informações globais das propriedades da rede,

sem considerar a influência da propagação da epidemia. Dessa forma, a obtenção dos nós mais influentes depende somente da topologia da rede, o que acaba restringindo as informações pelo *ranking* obtido por cada nó [80]. Seria conveniente que, além das informações já obtidas com a centralidade da rede, o espalhamento da epidemia fosse de alguma maneira quantificado e associado à importância do nó em relação ao seu poder de disseminação. Esta métrica poderia evidenciar nós que anteriormente não foram identificados com alto grau de centralidade pelas técnicas clássicas, porém ainda sim possuem uma relevância na disseminação da doença.

Neste contexto, este Capítulo propõe o uso de um novo paradigma em que a importância do nó na rede seja obtida com informações provindas da dinâmica da epidemia, e não somente da centralidade da rede. Esta estratégia utiliza as possíveis localizações de onde a epidemia se originou, ou seja, o foco inicial da doença. Dessa forma é possível verificar quais os nós possuem a maior incidência de contágio de acordo com a propagação da doença. Duas metodologias foram empregadas para a obtenção desta nova métrica: o uso de uma avaliação híbrida, que utiliza tanto o comportamento da epidemia quanto a centralidade dos nós para classificar suas importâncias, e também uma estratégia baseada em *tokens*, sinalizando os indivíduos contaminados com marcadores nas propagações da epidemia.

7.1 Dinâmicas de disseminação de epidemias

Nesta etapa será utilizada a dinâmica do modelo de Suscetíveis e Infectados (SI) para representar a epidemia nas redes anteriormente mostradas. A escolha de tal modelo foi tomada de modo a implementar a propagação da epidemia através de um modelo simples. Contudo, os métodos propostos neste trabalho também são aplicáveis nos casos em que outros modelos de propagação são utilizados, como o modelo SIR.

O modelo matemático SI, também é constituído por um sistema de equações diferenciais não lineares a tempo contínuo. Esse modelo divide a população em duas classes: suscetíveis (*S*) e infectados (*I*). Os suscetíveis são pessoas que nunca foram infectadas e estão sujeitas a contágio através do contato com pessoas infectadas. Os infectados são pessoas que possuem a doença considerada e podem transmiti-la para pessoas suscetíveis.

O modelo SI é dado por

$$\begin{aligned} dS/dt &= \mu N - \mu S - \beta IS/N \\ dI/dt &= \beta IS/N - \mu I \end{aligned} \tag{7-1}$$

onde μ é a taxa de natalidade de novos indivíduos por unidade de tempo, β representa a taxa de transmissão da doença e N é o número total de indivíduos.

A representação do modelo SI em redes complexas segue as mesmas diretrizes, porém não será considerado o nascimento de novos indivíduos na população. A abordagem conseqüentemente não insere novos nós na rede, e assim a rede será estática. A representação do modelo em redes considera também que os nós podem assumir os estados suscetíveis (S) e infectados (I). Formalmente, os N nós da rede são associados a um vetor de população Pop contendo o estado ao qual ele pertence

$$Pop(t) = [v_1^e, v_2^e, \dots, v_N^e] \quad (7-2)$$

onde t o instante de tempo considerado e e é o estado em que o indivíduo está. Indivíduos suscetíveis são então representados por $[v^S]$ e infectados por $[v^I]$. A quantidade de indivíduos infectados no instante t na rede então é dada pela quantidade de $[v^I]$ no vetor $Pop(t)$, e será representada aqui por $I(t)$.

Em cada passo t da simulação, um nó suscetível é testado pela probabilidade de contágio pc de ser infectado, se estiver conectado à algum nó infectado da rede. Pode existir casos em que um nó suscetível esteja conectado a mais de um nó infectado da rede. Neste caso, a quantidade de vezes em que o nó suscetível será testado quanto ao contágio será proporcional à quantidade de indivíduos infectados conectados a ele. A simulação inicia no tempo inicial (t_0) termina quando o tempo final (quantidade de iterações) t_f é alcançado. Vale ressaltar, que a probabilidade de contágio entre os nós deve ser conhecida e homogênea, ou seja, deve-se estipular um valor para o parâmetro pc e ele deve ser o mesmo para todos os indivíduos da rede.

Para exemplificar a propagação simples de uma epidemia, o exemplo da rede mostrado na Figura 2.5 será novamente apresentado, porém com o terceiro nó infectado ($[v_3^I]$). O nó que inicializa a epidemia será nomeado de foco primário (f_p).

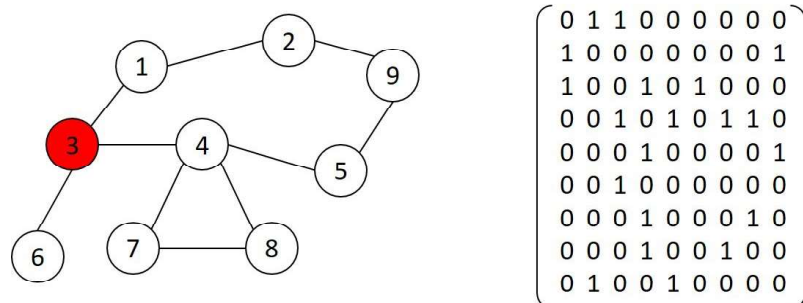


Figura 7.1: Esquema e Matriz de adjacência de grafo simples com $[v_3^I]$ sendo o nó infectado.

Na Figura 7.1 é possível observar tanto no esquema, quanto na matriz de adjacência que a mesma topologia anterior foi mantida, porém o nó três está vermelho

representando seu estado como infectado. Dessa forma, a população é dada por $Pop(t_0) = [v_1^S, v_2^S, v_3^I, v_4^S, v_5^S, v_6^S, v_7^S, v_8^S, v_9^S]$.

No primeiro passo de simulação ($t = 1$), todos os nós suscetíveis que estão conectados à algum nó infectado serão testado pela probabilidade de contágio pc . Tal teste é feito gerando-se um número aleatório, caso este número seja maior que pc , o nó passa a ser infectado. O nós a serem testados no exemplo são $[v_1^S, v_4^S, v_6^S]$, que são vizinhos de $[v_3^I]$. Um resultado da simulação de tal cenário pode ser visto na Figura 7.2.

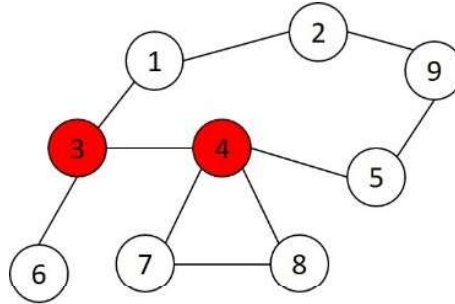


Figura 7.2: Esquema do grafo com o resultado da simulação com $t = 1$

Pode-se observar que um único nó mudou de estado, nesta iteração, o nó $[v_4^S]$. Agora a população passa a ser $Pop(t_0) = [v_1^S, v_2^S, v_3^I, v_4^I, v_5^S, v_6^S, v_7^S, v_8^S, v_9^S]$. Para $t = 2$, todos os nós suscetíveis conectados à algum nó infectado são novamente testados, sendo eles $[v_1^S, v_5^S, v_6^S, v_7^S, v_8^S]$.

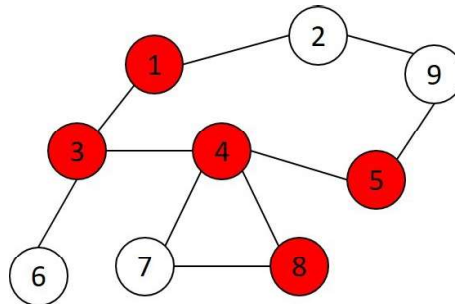


Figura 7.3: Esquema do grafo com o resultado da simulação com $t = 2$

A Figura 7.3 mostra que a epidemia começou a tomar proporções maiores. A população agora é formada por $Pop(t_0) = [v_1^I, v_2^S, v_3^I, v_4^I, v_5^I, v_6^S, v_7^S, v_8^I, v_9^S]$. Vale ressaltar que o nó $[v_7^S]$ agora possui dois vizinhos contaminados $[v_4^I]$ e $[v_8^I]$. Assim para se determinar os estados dos nós em $t = 3$, $[v_7^S]$ será testado duas vezes. Logo, supondo que a simulação da epidemia envolva apenas dois passos ($t_f = 2$), a propagação é finalizada. A quantidade final de indivíduos infectados no exemplo é $I(2) = 5$.

7.2 Estratégias de imunização

Grande parte dos modelos para controle da epidemia em redes complexas tendem a imunizar os nós que possuem maior importância na rede. Como visto anteriormente, os nós mais influentes na rede podem ser obtidos em termos das centralidades, como o grau e a intermediação.

Nas estratégias baseadas no maior grau (*High Degree*, HD) e na maior intermediação (*High Betweenness*, HB), a sequência de imunização é dada de acordo com as centralidades obtidas na rede em seu estado inicial. O termo estado inicial da rede se refere à sua topologia inicial, sem nenhuma dinâmica ou alteração ter sido feita para se obter a estratégia de imunização.

Algumas melhorias das estratégias baseadas em HD e HB foram apresentadas, e obtiveram uma redução no número de indivíduos infectados na rede. Como é o caso das estratégias adaptativas [2, 115, 116], escolha de vizinhos aleatórios [29, 63], particionamento do grafo [25], andarilhos aleatórios na rede [63, 72, 100], dentre outros.

Grande parte das estratégias de imunização estudadas na produção deste trabalho, foi observado que a maioria delas se basearam apenas na topologia inicial da rede, e os nós mais influentes são classificados e imunizados. Algumas alternativas utilizam algum processo estocástico na escolha dos nós a serem vacinados. Seria conveniente que, além das informações já obtidas com a centralidade da rede, o espalhamento da epidemia fosse quantificado e associado à importância do nó em relação ao seu poder de disseminação.

Neste contexto, este trabalho propõe o uso de um novo paradigma que evidencia a importância do nó na rede de acordo com a disseminação da epidemia. Assim, a imunização será aplicada classificando os nós mais influentes na disseminação da epidemia ao longo da rede, e não mais em relação somente à topologia da rede. Dois modelos são propostos, o modelo de centralidade ponderada e o modelo baseado em *tokens*.

7.3 Estratégias propostas

7.3.1 Foco inicial e risco primário

Para que a propagação da epidemia seja utilizada na importância dos nós, primeiramente faz-se necessário detectar o foco que iniciou a epidemia. O foco é um nó infectado no início da simulação a partir da qual a epidemia se espalha. A determinação desse nó é vital para a gravidade da epidemia, uma vez que nós infectados com alta centralidade facilitaria a disseminação, enquanto um nó isolado poderia ser facilmente bloqueado.

A maioria dos trabalhos não se preocupam com a determinação do foco inicial, partindo da premissa que a estratégia de imunização será feita sem o seu conhecimento. No entanto, se a localização do foco inicial fosse perfeitamente conhecida, a estratégia de vacinação a ser tomada seria a trivial imunizando todos os vizinhos do nó, interrompendo dessa forma a propagação da doença. Assim, é interessante que se admita uma probabilidade de que um dado nó possa representar um indivíduo infectado.

Como as estratégias de imunização propostas neste trabalho baseiam-se nas informações provindas da dinâmica da epidemia, o foco inicial da rede é um parâmetro importante. Dado que o foco inicial é conhecido, é possível estimar a probabilidade dos nós da rede de serem infectados. Com esta probabilidade em conjunto com as técnicas de centralidade é esperado que se obtenha uma melhora em relação as técnicas baseadas somente na centralidade. Adicionalmente, é possível obter ainda uma estratégia baseada somente na propagação da epidemia, demarcando os nós que foram contaminados e somando todos os contágios ocasionados com a epidemia.

Para que a localização do foco f não seja arbitrária, um conjunto de N_f nós é fornecido por $\mathbf{f} = [v_1^f, v_2^f, \dots, v_{N_f}^f]$ (com $N_f < N$) com focos iniciais detectados. Para se caracterizar a possibilidade de cada nó ser um foco de fato, é associado um valor fixo para cada um dos possíveis focos, aqui chamado de risco primário $\mathbf{r}^p = [r_1^p, r_2^p, \dots, r_{N_f}^p]$.

Com este procedimento, é possível inserir uma incerteza na simulação quanto à localização dos focos iniciais. Dessa forma, torna-se possível estimar qual a incidência de contágio dos nós através de múltiplas disseminações da epidemia na rede. A estimativa que se fundamenta no risco primário será usada nas estratégias propostas a seguir.

O uso da incerteza associada ao risco primário pode ser comparado em um cenário real como uma triagem médica, onde um profissional de saúde analisa previamente os suspeitos de estarem contaminados e associa a eles um risco de contaminação. Outro cenário recente, é o caso de profissionais de saúde de várias nacionalidades que trabalharam na epidemia de ebola no oeste da África. Alguns destes profissionais ao retornarem aos seus países com sintomas da doença, e dessa forma o potencial foco inicial é conhecido e levado em consideração para estratégias de controle de uma possível epidemia [87, 102].

7.3.2 Estratégia baseada em centralidade ponderada

A estratégia baseada em centralidade ponderada classifica os nós *hubs* da rede levando em consideração as medidas da centralidade e a estimativa da probabilidade de infecção. Nesse caso, a relevância da centralidade utilizada é ponderada pela probabilidade de infecção.

A disseminação da epidemia da rede é representada por um processo iterativo como demonstrado na Sessão 7.1. Para se obter a estimativa de probabilidade de infecção

são feitas múltiplas realizações da disseminação da epidemia, através de uma simulação de Monte Carlo. A estimativa da probabilidade de infecção $\widehat{P}_I(i)$ do i -ésimo nó v_i é obtida pela quantidade média de vezes em que o nó em questão é infectado em t_f^{MC} realizações da disseminação da epidemia, sendo definida como:

$$\widehat{P}_I(i) = \frac{1}{t_f^{MC}} \sum_{i=1}^{t_f^{MC}} I_{v_i}. \quad (7-3)$$

A simulação se inicia com a medida de centralidade sendo calculada na topologia de rede inicial. Qualquer centralidade pode ser usada nesta metodologia, porém neste trabalho será utilizada a intermediação. Com o valor das N centralidades, os nós focos iniciais são sorteados de acordo com seus riscos primários, e então a dinâmica de epidemia é disseminada t_f^{MC} vezes. A cada realização da disseminação, os nós que foram contaminados são contabilizados e armazenados. Quando todas as realizações terminarem, um vetor resultante contém a quantidade total de vezes que os N nós foram infectados. O vetor é dividido pela quantidade de realizações t_f^{MC} , obtendo assim a estimativa da probabilidade de infecção \widehat{P}_I .

Ao final das simulações a ponderação é dada multiplicando o vetor da estimativa \widehat{P}_I pelo vetor de centralidade obtido inicialmente na rede, neste estudo a centralidade de intermediação C^{BTW} . A centralidade ponderada do i -ésimo nó é dada por,

$$\mathbf{P}^{BTW}(i) = \mathbf{C}^{BTW}(i) \times \widehat{P}_I(i). \quad (7-4)$$

Para exemplificar esta estratégia, será utilizado o cenário ilustrado na Figura 7.4, onde o nó $[v_1^I]$ é inicialmente tomado como foco inicial. Primeiramente é calculada a centralidade de intermediação na topologia inicial da rede.

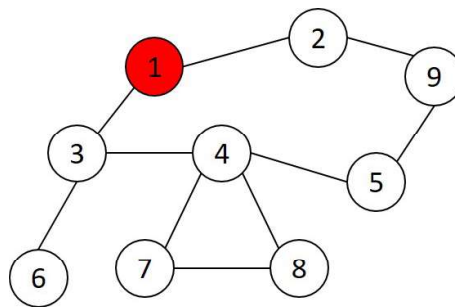


Figura 7.4: Esquema de grafo simples com $N = 9$ e $M = 10$ com nó $[v_1^I]$ infectado

Considerando $t_f^{MC} = 20$ realizações, ou seja vinte propagações da epidemia, e o valor de $pc = 0,5$, a estimativa da probabilidade de infecção de todos os nós suscetíveis com suas respectivas centralidades é apresentado na Tabela 7.1.

Tabela 7.1: Valores de C^{BTW} , \hat{P}_l e P para uma rede simples com $t_f^{MC} = 20$ e $pc = 0,5$.

Nó	C^{BTW}	\hat{P}_l	P^{BTW}
2	0,1250	0,9500	0,1187
3	0,6250	0,9500	0,5938
4	0,7361	0,4000	0,2944
5	0,1667	0,0500	0,0083
6	0	0,4000	0
7	0	0,500	0
8	0	0,1000	0
9	0,0694	0,5000	0,0347

Os resultados mostram que, de acordo com a centralidade utilizada, o nó mais influente da rede é v_4 . Dessa forma, para as estratégias de imunização baseada somente nas centralidade, a melhor estratégia seria imunizar o nó v_4 . No resultado da estimativa da probabilidade de infecção dois nós se destacaram, o v_2 e o v_3 . Tal estimativa é justificada pelo fato dos nós serem vizinhos do nó foco inicial, e portanto foram infectados com mais frequência nas realizações. Porém, ao se aplicar puramente a estratégia de imunização baseada na estimativa, o nó a ser vacinado seria o nó v_2 . Já pela estratégia baseada na centralidade ponderada, o nó a ser imunizado seria o v_3 . Este resultado mostra que a importância da centralidade foi incluída na decisão, porém ponderada pela importância do nó mais infectado pelo processo de disseminação da doença na rede.

Esse simples exemplo mostra que a estratégia ponderada adéqua a centralidade de acordo com o foco inicial da doença, possibilitando melhores resultados que estratégias baseadas apenas na centralidade. Para avaliar esta estratégia em outros cenários mais representativos, um estudo de caso será aplicado levando em consideração o risco primário e outras redes complexas, esperando manter uma melhora nos resultados.

7.3.3 Estratégia baseada em *tokens*

As informações obtidas com a disseminação da epidemia na rede podem ser muito úteis para detectar *hubs* relacionados à epidemia em questão. A estratégia baseada em centralidade ponderada mostra um potencial em evidenciar nós que já são *hubs* de acordo com a centralidade da rede em relação a disseminação da epidemia.

Neste mesmo cenário este trabalho propõe uma segunda estratégia que consiste em empregar marcadores (*tokens*) para rastrear a propagação da epidemia. Dessa forma, além de utilizar a informação de quais nós foram infectados, esta estratégia utiliza também trajetos que a epidemia percorreu até que o nó em questão fosse infectado. Assim, os nós infectantes passam a ser contabilizados na detecção dos nós *hubs* da rede.

Cada marcador T é representado por um número $1 < T < N$, correspondente a um nó específico. A cada nó infectado da rede será associado um conjunto de marcadores \mathbf{T} , contendo os marcadores de todos os nós por onde a infecção se propagou até chegar no nó em questão. Sempre que um nó infectado contagiar um nó susceptível, o conjunto de marcadores do nó infectado será copiado para o nó susceptível, acrescido de um novo marcador correspondente ao número desse nó susceptível (agora infectado). Ao final das realizações da disseminação da epidemia, o nó que possuir a maior contagem de marcadores na rede será considerado o mais importante da rede.

A disseminação da epidemia da rede também será aqui representada por um processo iterativo como demonstrado na Sessão 7.1. Para se obter a contagem total dos marcadores serão feitas múltiplas realizações da disseminação da epidemia, através de uma simulação de Monte Carlo.

Para exemplificar a simulação um novo cenário é apresentado na Figura 7.5. A Figura 7.5 mostra a representação da rede em um grafo com apenas uma realização, juntamente com a lista dos marcadores correspondentes a todos os nós da rede.

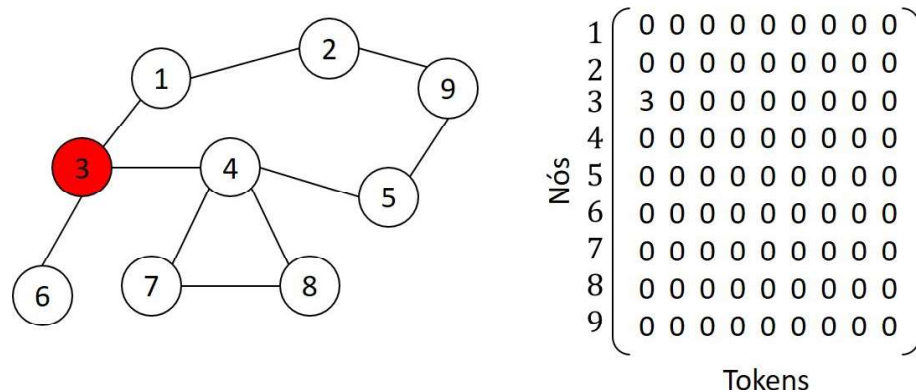


Figura 7.5: Exemplo da inicialização da rede para a estratégia baseada em tokens, com nó $[v_3^I]$ como foco inicial

Inicialmente, foi colocado um marcador no foco primário, que corresponderá à identificação do próprio nó. No exemplo considerado, o marcador foi $T(3) = [3]$, referente ao nó $[v_3^I]$. Desse modo, o conjunto de marcadores do foco primário conterà apenas o marcador **3**.

A Figura 7.6 mostra a primeira iteração da propagação da epidemia. É possível observar que o nó v_4^I foi infectado, e seu marcador recebeu o marcador do nó infectante $T(4) = [3]$ adicionando sua identificação $T(4) = [3, 4]$.

Na próxima iteração os nós $[v_1^I, v_5^I]$ e $[v_7^I]$ foram contaminados, e seus marcadores atualizados, como mostra a Figura 7.7. A lista de marcadores apresentados na figura mostra que o nó $[v_1^I]$ foi contaminado pelo nó $[v_3^I]$, e portanto recebe os marcadores $T(1) = [3, 1]$ referentes ao nó infectante mais seu próprio identificador. Os nós $[v_5^I]$ e

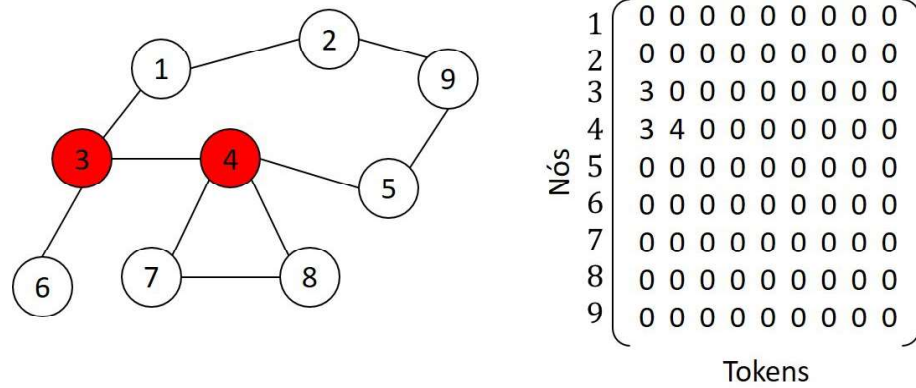


Figura 7.6: Exemplo da rede para a estratégia baseada em tokens na primeira iteração

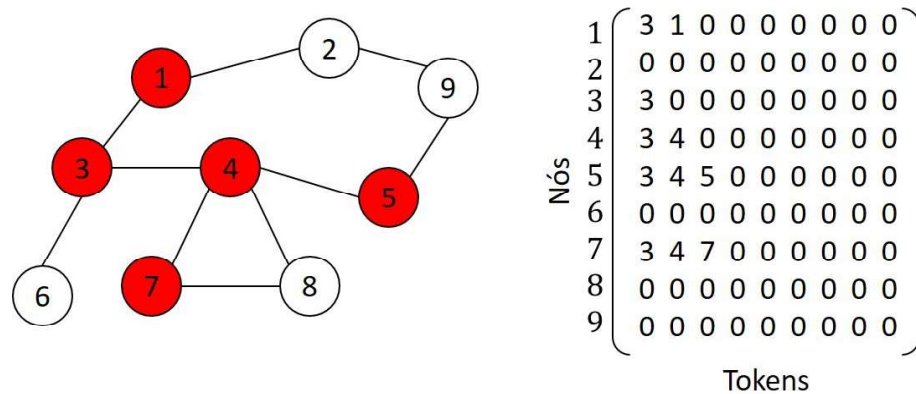


Figura 7.7: Exemplo da rede para a estratégia baseada em tokens na segunda iteração

$[v_7^I]$ têm seus marcadores provindos do nó infectante $[v_4^I]$ adicionando seus respectivos marcadores $T(5) = [3, 4, 5]$ e $T(7) = [3, 4, 7]$.

Vale ressaltar que na próxima iteração, o nó v_8^I será testado com relação à sua infecção. Ele possui dois vizinhos infectados, o nó $[v_4^I]$ e nó $[v_7^I]$. Suponha que ambos os testes de infecção foram positivos, ou seja, ambos nós irão mudar de estado. Assim, faz-se necessário definir como o nó $[v_8^I]$ irá herdar os marcadores dos dois nós infectantes. Como alternativas, têm-se as três possibilidades abaixo:

- Unir os marcadores de todos os nós infectantes, ou seja se um susceptível da rede é infectado por dois ou mais vizinhos, ele herda o marcador de todos vizinhos infectantes. Nesta etapa serão eliminados os marcadores duplicados. No exemplo, o nó $[v_8^I]$ irá receber $T^a(8) = [3, 4, 7, 8]$.
- Idem ao cenário anterior, porém sem eliminar os *tokens* duplicados. Isso significa que o vetor de token resultante do agrupamento permitirá valores repetidos. Para o exemplo, $T^b(8) = [3, 4, 7, 3, 4, 8]$.
- Escolher um (dentre todos os vizinhos infectantes) para que o nó a ser infectado herde

os marcadores. No exemplo, o token do vizinho $[v_4^I]$ foi escolhido aleatoriamente, resultando $T^c(8) = [3, 4, 8]$.

Simulando os três cenários acima para o exemplo em que o nó $[v_1^I]$ é tomado como foco inicial, considerando $t_f^{MC} = 20$ realizações e o valor de $pc = 0,5$, a contagem dos tokens de todos os nós é apresentado na Tabela 7.2.

Tabela 7.2: Valores de C^{BTW} , T^a , T^b e T^c para uma rede simples com $t_f^{MC} = 20$ e $pc = 0,5$.

Nó	C^{BTW}	T^a	T^b	T^c
2	0,1250	34	34	34
3	0,6250	53	53	52
4	0,7361	24	24	23
5	0,1667	8	8	8
6	0	11	11	11
7	0	1	1	1
8	0	4	4	4
9	0,0694	16	16	16

Os resultados mostram que, o nó mais influente da rede é o nó v_3 para as três variações da estratégia baseada em *tokens*. O resultado mostra um comportamento similar aos obtidos com o uso da estimativa proposta anteriormente na Seção 7.3.2. Assim, de acordo com a dinâmica, o nó a ser imunizado é o v_3 . Em contrapartida, como o exemplo da Seção 7.3.2, as centralidades mostraram o nó v_4 como nó *hub* da rede.

Este simples exemplo mostra que a estratégia baseada em *tokens* também possibilita bons resultados utilizando esta nova abordagem baseada na disseminação da epidemia. Porém, faz-se necessário verificar se a estratégia continua a obter bons resultados se o risco primário for levado em consideração e se os resultados são corroborados em outras redes complexas.

7.4 Material e Métodos

Os algoritmos empregados para simulação são divididos em duas fases: a fase de alocação e a de avaliação. A fase de alocação será executada para identificar o nó mais importante de rede em relação às métricas aqui propostas (P e T). Já a fase de avaliação, imunizará o nó mais importante (de acordo com a estratégia analisada) e verificará o impacto dessa imunização na propagação da infecção. Como visto anteriormente, ambas estratégias propostas utilizam a simulação de Monte Carlo para obter os resultados, assim as duas fases aqui apresentadas apresentarão resultados médios provindos de tal simulação.

Para as simulações realizadas neste trabalho, as seguintes hipóteses foram consideradas:

Hipótese 1 - A topologia de rede é conhecida, ou seja, A é conhecida.

Hipótese 2 - As estratégias propostas por este trabalho podem ser aplicadas em cenários em que a epidemia considerada é referente à doenças contagiosas, ou seja, transmitidas de um indivíduo a outro.

Hipótese 3 - Existe uma estimativa de quais seriam potenciais focos.

Como exemplo para *Hipótese 3* seria uma ampla triagem na população. Tal metodologia pode ser eficaz na maioria dos casos, porém pode ser difícil para casos de doenças em que os pacientes podem ser assintomáticos. Desta forma, faz-se necessário configurar a população inicial $Pop(t_0)$, escolhendo um ou mais nós que serão os focos da infecção na rede. Tais focos serão testados quanto à probabilidade de se tornar foco inicial da rede $[v^{I_0}]$ através de seus respectivos riscos primários (r^p), como mostrado na Seção 7.3.1. Assim, deve-se estimar a quantidade de nós focos que possivelmente estarão contaminados com as respectivas taxas de risco primário.

Hipótese 4 - A probabilidade de contágio entre cada nó conectado a um nó infectado deve ser conhecida e homogênea.

Hipótese 5 - Todos os indivíduos da população estão representados na rede, não existindo a possibilidade de novos indivíduos externos serem incluídos.

Um exemplo para a *Hipótese 5* seria um bairro que receberia a visita de um carteiro que não fizesse parte daquela região. O carteiro faz parte de outra população, e poderia trazer a doença para o bairro e depois se ausentar. Portanto esta situação não é contemplada.

Hipótese 6 - A rede utilizada na simulação é estática, ou seja, as conexões entre os nós não sofrem alterações durante as simulações de alocação e avaliação das estratégias.

Hipótese 7 - Não há período de incubação/latência na epidemia considerada.

7.4.1 Algoritmos empregados

A população inicial é gerada identificando os nós suscetíveis e o nó foco da epidemia, juntamente com uma determinada topologia. O nó foco inicial é designado conforme a probabilidade do nó ser ou não o foco inicial da rede. Tal teste é gerado levando em consideração que pelo menos um nó foco seja contaminado, e assim garantindo que

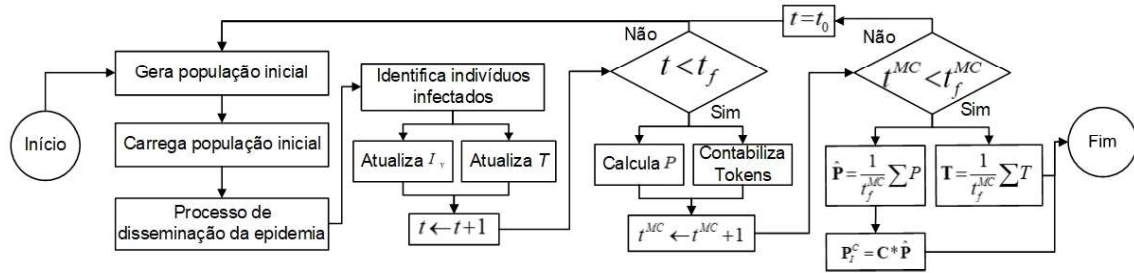


Figura 7.8: Esquema da simulação: Fase de alocação

em todas as realizações a rede possua foco inicial. Para auxiliar no entendimento, um esquema da fase de alocação é mostrado na Figura 7.8.

O processo de disseminação da epidemia é simulada, em que a epidemia é propagada na rede por t_f iterações, como demonstrado na Seção 7.1. Ao final de cada iteração, os nós infectados são identificados e os vetores de indivíduos infectados I_v e de *tokens* T atualizados. Com isso, é possível obter a quantidade de vezes que cada um dos nós da rede que atuaram como um intermediador na propagação da doença neste conjunto de iterações pelo vetor I_v , juntamente com os *tokens* de cada nó em T . Ao final de todas as iterações, o cálculo do P e a contagem dos *tokens* T são feitas, finalizando assim uma realização Monte Carlo. Todo este procedimento é repetido em t_f^{MC} realizações, possibilitando calcular a quantidade média de vezes que cada nó foi considerado um comunicante (contribuinte) com a disseminação da doença $\hat{\mathbf{P}}$ e a quantidade média que cada nó da rede apareceu nos *tokens* da rede \mathbf{T} . Como resultado final, tem-se um vetor $\hat{\mathbf{T}}$ contendo os valores encontrados pela estratégia baseada em *tokens* e um vetor $\hat{\mathbf{P}}^C$ com os valores obtidos com a estratégia baseada em centralidade ponderada no vetor, em que C é a centralidade escolhida.

Com os respectivos valores encontrados pelas estratégias para cada nó da rede, é possível obter um *ranking* dos nós mais importantes e imunizá-los de acordo com a quantidade de recursos de controle da epidemia. Porém nos estudos de casos feito neste trabalho, somente um indivíduo será imunizado. Tal indivíduo será o nó *hub* que obtiver o maior valor, resultando nas estratégias analisadas. A justificativa deste cenário é avaliar as estratégias em um ambiente onde os recursos de imunização são escassos. Portanto independente da quantidade de nó focos iniciais, somente uma imunização será realizada na rede.

Para se obter o nó *hub* da rede para ser imunizado de acordo com as estratégias propostas, o maior valor de ambas estratégias é dado por

$$v_{P_I}^* = \max(\hat{\mathbf{P}}_I^C). \quad (7-5)$$

e,

$$v_T^* = \max(\mathbf{T}). \quad (7-6)$$

em que $v_{p_t}^*$ é o nó a ser imunizado de acordo com a estratégia de centralidade ponderada e $v_{t_f}^*$ é o nó a ser imunizado de acordo com a estratégia baseada em *tokens*.

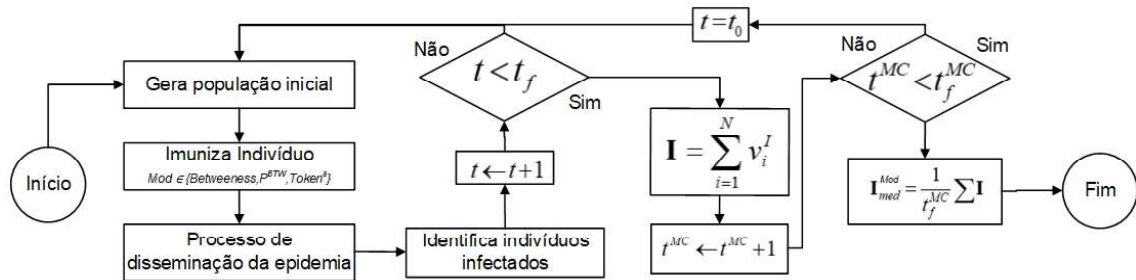


Figura 7.9: Esquema da simulação: Fase de Avaliação

A fase de avaliação verificará qual o impacto causado pela imunização de um nó da rede escolhido pela fase de alocação de acordo com as estratégias a serem avaliadas. Um esquema da fase de avaliação é mostrado na Figura 7.9 para auxiliar no entendimento do algoritmo.

Essa fase será aplicada de modo similar à fase de alocação, baseando-se na propagação da epidemia. A avaliação também é iniciada gerando a população com os nós suscetíveis, o nó foco inicial e o respectivo foco a ser imunizado de acordo com a estratégia a ser avaliada. Posteriormente a propagação da epidemia também é gerada de modo iterativo, até que a quantidade de iterações t_f seja alcançada. Ao final das iterações a quantidade de vezes que cada nó foi identificado como propagador da epidemia em todas iterações são então somadas. Este mesmo procedimento é repetido em t_f^{MC} realizações, e assim é possível calcular a quantidade média de indivíduos infectados \mathbf{I}_{med}^{mod} na simulação.

7.4.2 Forma de análise dos resultados

O ganho obtido com as estratégias propostas serão apresentados na forma de redução percentual em relação à dinâmica sem o uso do controle, dado por

$$\mathbf{R}_{\%} = 100 \frac{(\mathbf{I}_{med} - \mathbf{I}_{med}^{Mod})}{\mathbf{I}_{med}}, \quad (7-7)$$

em que \mathbf{I}_{med}^{Mod} é quantidade média de indivíduos infectados obtida posteriormente a simulação de Monte Carlo considerando a imunização, com $Mod \in \{Betweenness, PBTW, Token^a\}$ sendo a estratégia utilizada, e \mathbf{I}_{med} é a quantidade média de indivíduos infectados obtida posteriormente a simulação de Monte Carlo sem o uso do controle, dado por

$$\mathbf{I}_{med} = \frac{1}{t_F^{MC}} \sum I. \quad (7-8)$$

Para verificar a eficácia da estratégia proposta (aumento do $\mathbf{R}_{\%}$) foram estudados os seguintes cenários:

- O caso nominal, em que a localização do foco inicial foi testada variando-se o nó foco inicial. Cada nó da rede foi alocado como foco inicial e um outro nó foi eleito pela fase de alocação como melhor opção para imunização. Dessa forma, para cada um dos N nós da rede contaminados, existe um nó *hub* eleito para ser imunizado de acordo com as estratégias que foram avaliadas. Tal imunização foi feita na fase de avaliação para verificar a redução média de indivíduos infectados no final da simulação. Ao final da fase de avaliação é possível avaliar as estratégias propostas e verificar se houve alguma contribuição quanto as estratégias clássicas.
- A robustez quanto a alterações na topologia foi testada. Tal cenário foi aplicado obtendo o nó a ser imunizado da fase de alocação considerando a topologia inicial, porém na fase de avaliação a estratégia de imunização foi avaliada em uma topologia em que uma parcela de $a\% = 10\%$ das arestas foram removidas da rede e a mesma quantidade de novas outras arestas foram adicionadas. Dessa forma, espera-se verificar se existe a redução de indivíduos infectados mesmo em topologias diferentes das que a estratégia se baseou para detectar os nós mais importantes.
- A inserção do risco primário foi testada em um cenário contendo dois nós focos iniciais. Tais focos foram aleatoriamente escolhidos e associados aos riscos primários de $R_p(1) = 0,6$ e $R_p(2) = 0,8$ para as fases de alocação e avaliação. A cada par de nó da rede que possivelmente foram contaminados como focos iniciais (devido aos riscos primários), um terceiro nó foi eleito pela fase de alocação como melhor opção para imunização. Dessa forma, para cada combinação de até dois nós da rede contaminados, existe um nó *hub* eleito para ser imunizado de acordo com as estratégias que foram avaliadas. Tal imunização foi feita na fase de avaliação para verificar a redução média de indivíduos infectados no final da simulação, levando em consideração os mesmos riscos primários. Ao final da fase de avaliação é possível avaliar as estratégias propostas e verificar se houve alguma contribuição quanto as estratégias clássicas.
- A robustez quanto ao descasamento dos riscos primários entre as fases de alocação e avaliação foi testada. O descasamento foi gerado associando os riscos primários $R_p(1) = 0,6$ e $R_p(2) = 0,8$ para a fase de alocação e dois descasamentos foram testados na fase de avaliação, o primeiro associando $R_p(1) = 0,8$ e $R_p(2) = 0,6$ e o segundo associando $R_p(1) = 0,9$ e $R_p(2) = 0,4$. Dessa forma, espera-se verificar se existe a redução de indivíduos infectados mesmo considerando o descasamento entre os riscos primários entre as fases.

Em todas as simulações deste trabalho os algoritmos foram configurados com os

seguintes parâmetros:

$$\begin{aligned}pc &= 0,5 \\t_f^{MC} &= 1000 \\t_f &= 3\end{aligned}$$

7.4.3 Estudo de caso

Existem diversas redes complexas sendo utilizadas para simulação de dinâmicas de disseminação de epidemias bem como seus possíveis controles. Nesta sessão, serão apresentadas as configurações das redes utilizadas neste trabalho como estudo de caso.

As redes utilizadas são:

- Uma rede Erdős-Rényi aleatoriamente gerada com $N = 100$ nós, $M = 200$ conexões, e $k = 4$ [39].
- Uma rede Barabási-Albert gerada baseando-se nos nós mais influentes com $\gamma = 2,5$, formada por $N = 68$ nós com $M = 152$ conexões e $k = 4,47$ [13].
- Uma rede real de amizades entre estudantes de escolas americanas, formada por $N = 69$ nós com $M = 220$ conexões e $k = 6,38$ [86, 115, 60, 62].

Para os cálculos da intermediação foram utilizadas as ferramentas *Matlab Tools for Network Analysis* disponíveis em http://strategic.mit.edu/downloads.php?page=matlab_networks.

7.5 Resultados para controle de epidemias em redes com simulação de Monte Carlo

Nesta seção apresentam-se os resultados obtidos com a dinâmica epidemiológica baseada no modelo SI. Inicialmente serão mostrado os resultados da simulação para o caso nominal, com apenas um nó foco inicial na rede. Também será verificado a robustez das estratégias quanto a modificações da topologia na rede. Será verificado ainda a inclusão do risco primário aos nós focos, e para isso um cenário com dois nós focos iniciais será utilizado.

7.5.1 Caso nominal

A Figura 7.10 mostra os resultados alocando o nó foco inicial em cada um dos N nós das redes utilizadas. A linha cheia apresenta a estratégia de imunização utilizando a

estratégia de intermediação, enquanto as tracejadas vermelha e azul apresentam as estratégias baseadas em centralidade ponderada e *tokens*, respectivamente. É possível verificar que, para as três redes utilizadas como estudo de caso neste trabalho, as estratégias propostas foram em média melhores que a imunização baseada na melhor intermediação. Se ambas estratégias propostas forem comparados, a estratégia baseada em *tokens* obteve melhores resultados em relação à baseada na centralidade ponderada.

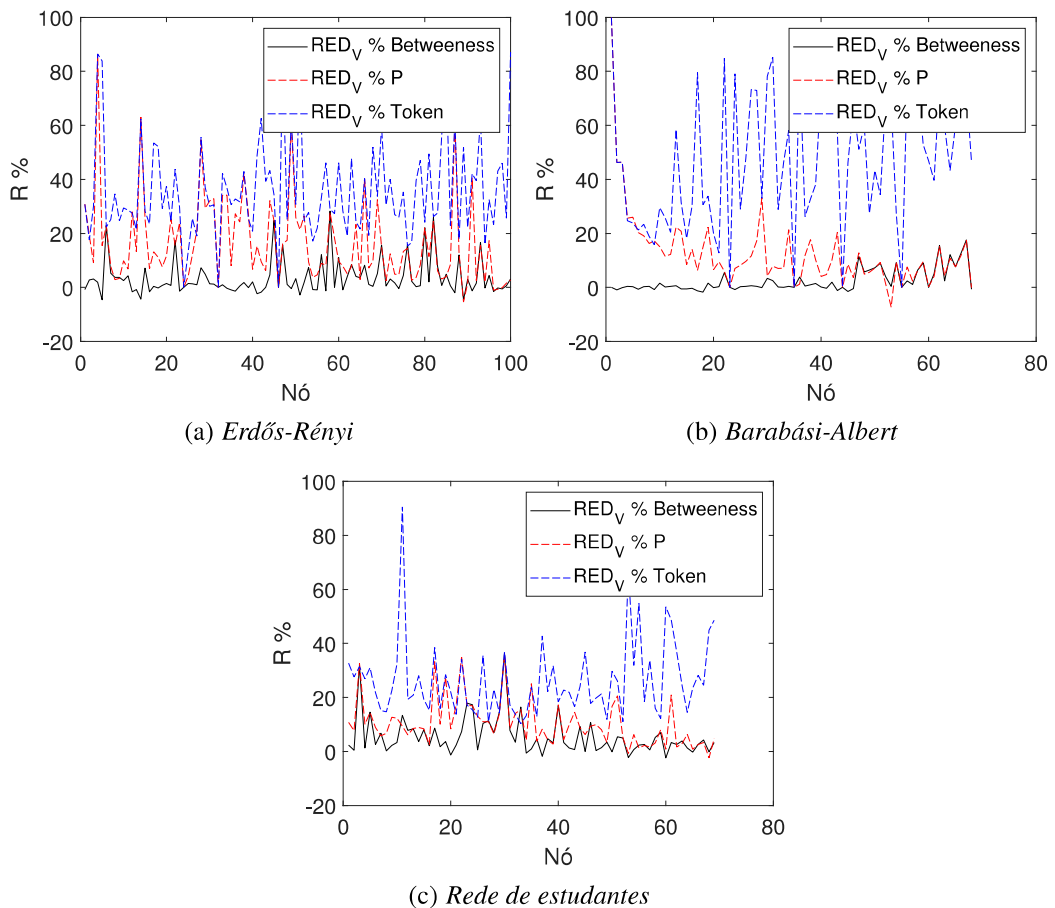


Figura 7.10: Comparação entre a estratégia baseada na intermediação (Betweeness) e as estratégias propostas de centralidade ponderada (P) e baseada em tokens (*Token^a*) para o caso nominal. Resultados obtidos nas redes (a) *Erdős-Rényi* ($N = 100$ e $M = 200$), (b) *Barabási-Albert* ($N = 68$ e $M = 152$) e (c) *Rede de amizades em escolas americanas* ($N = 69$ e $M = 220$)

Já a Figura 7.11 apresenta os resultados obtidos no mesmo cenário anterior, porém comparando as três configurações da estratégia baseada em *tokens*. A linha cheia apresenta os resultados com a estratégia *Token^a*, a linha tracejada vermelha o *Token^b* e a tracejada azul a estratégia *Token^c*. Como pode-se notar, houve pouca alteração entre as estratégias. A mesma comparação entre as três estratégias baseadas em *tokens* foi feita para todos as outras simulações neste trabalho, porém como os resultados mostraram o

mesma similaridade entre as estratégias, será apresentado apenas o resultado para o caso nominal.

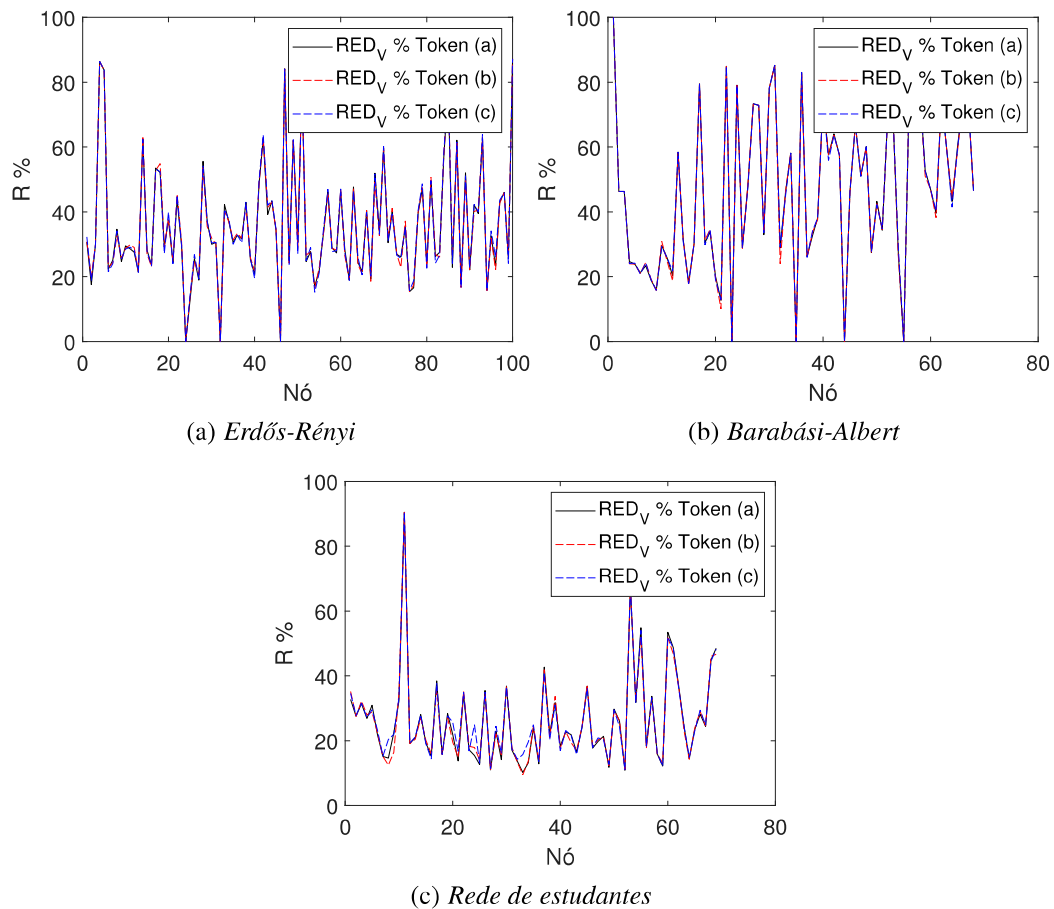


Figura 7.11: Comparação entre as três configurações da estratégia baseada em tokens para o caso nominal. Resultados obtidos nas redes (a) *Erdős-Rényi* ($N = 100$ e $M = 200$), (b) *Barabási-Albert* ($N = 68$ e $M = 152$) e (c) *Rede de amizades em escolas americanas* ($N = 69$ e $M = 220$).

7.5.2 Robustez quanto à mudança na topologia de rede

A Figura 7.12 apresenta os resultados referentes à alteração na topologia de rede na fase de avaliação das estratégias. Tal alteração foi feita removendo uma parcela de $a\% = 10\%$ arestas na fase de avaliação, e posteriormente adicionando a mesma parcela em outras novas arestas. Os resultados mostram que mesmo com essa diferenciação topológica, a melhora obtida com a utilização das estratégias propostas ainda é bastante representativa. Os resultados obtidos com a estratégia baseada em *tokens* novamente se mostrou melhor que as outras analisadas.

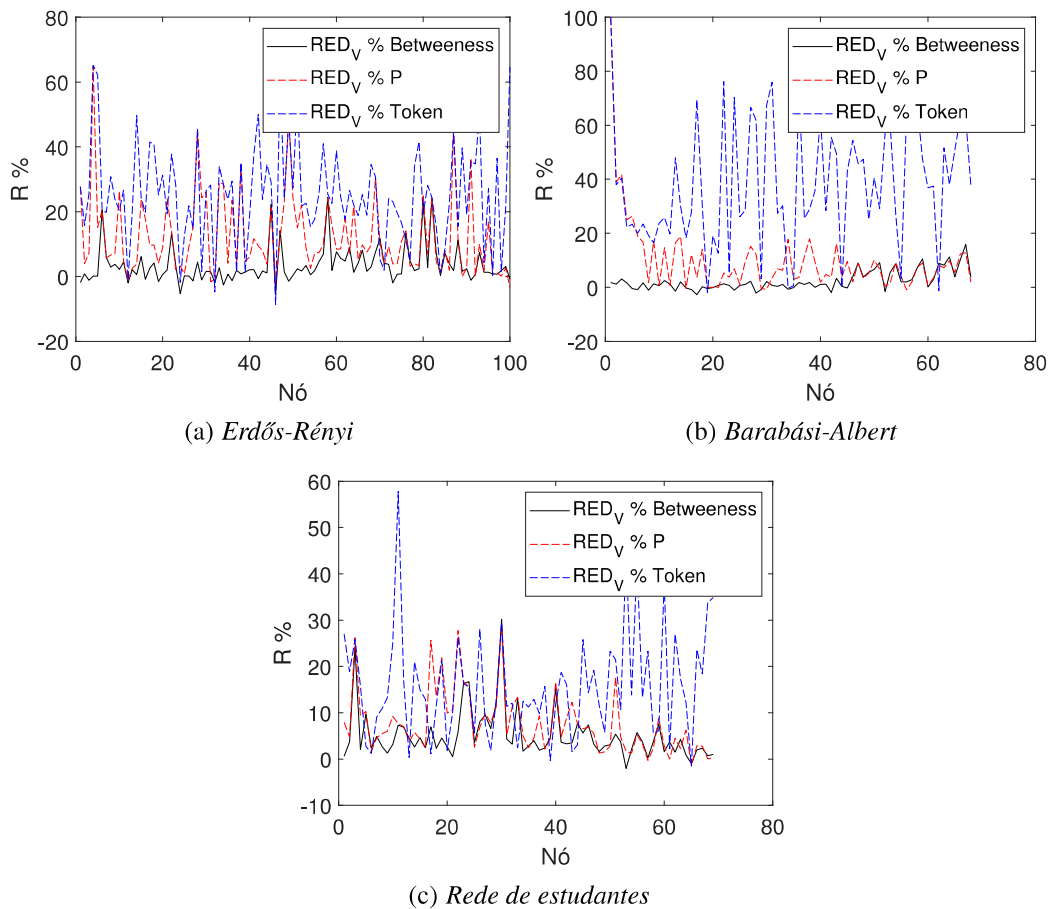


Figura 7.12: Comparação entre a estratégia baseada na intermediação (Betweenness) e as estratégias propostas de centralidade ponderada (P) e baseada em tokens (Token^a) para o teste de robustez quanto a mudança de $a\% = 10$ arestas na topologia de rede. Resultados obtidos nas redes (a) *Erdős-Rényi* ($N = 100$ e $M = 200$), (b) *Barabási-Albert* ($N = 68$ e $M = 152$) e (c) *Rede de amizades em escolas americanas* ($N = 69$ e $M = 220$).

A Tabela 7.3 mostra um comparativo entre a média dos resultados obtidos no caso nominal e no caso onde há mudança na topologia de rede. É possível observar a contribuição das estratégias propostas se comparados com a estratégia clássica, corroborando os resultados anteriormente apresentados. Verifica-se também uma redução dos valores de $R\%$ comparando os resultados com e sem a mudança na topologia de rede, o que é justificável pela diferenciação da rede na fase de alocação e avaliação. Porém, mesmo em tal cenário, as estratégias propostas mostraram-se em média melhores que a estratégia clássica baseado na centralidade de intermediação.

Tabela 7.3: Resultados dos $R_{\%}$ com e sem a mudança de topologia para as três redes testadas.

Diferenciação $a_{\%}$	Erdős-Rényi		Barabási-Albert		Amizade	
	Sem ($a_{\%} = 0\%$)	Com ($a_{\%} = 10\%$)	Sem ($a_{\%} = 0\%$)	Com ($a_{\%} = 10\%$)	Sem ($a_{\%} = 0\%$)	Com ($a_{\%} = 10\%$)
$R_{\%}^{BTW}$	4.0506	3.8839	2.3775	2.4032	5.4780	5.0779
$R_{\%}^P$	16.7653	13.0800	12.5728	9.8539	10.2318	7.5713
$R_{\%}^{Token(a)}$	35.9971	26.2006	46.3575	37.8846	26.3046	15.7829
$R_{\%}^{Token(b)}$	35.9988	26.3803	46.1940	37.7447	26.1680	15.4683
$R_{\%}^{Token(c)}$	35.9310	26.2510	46.3262	37.6812	26.7676	15.6849

7.5.3 Inserindo risco primário

A Figura 7.13 mostra os resultados de 50 realizações da simulação inserindo dois nós focos aleatoriamente escolhidos, com seus respectivos riscos primários $R_p(1) = 0,6$ e $R_p(2) = 0,8$. Tais riscos primários foram utilizados, nesta etapa do trabalho, tanto para a fase de alocação quanto para a fase de avaliação. Como mostra a Figura 7.13, os resultados se mostraram em média melhores com o uso das estratégias propostas. Isto mostra que mesmo em um cenário estocástico, onde os focos iniciais estão em uma configuração desconhecida, as estratégias propostas mostraram uma melhora nos resultados. Novamente a estratégia baseada em *tokens* foi melhor em relação à baseada em centralidade ponderada.

7.5.4 Robustez quanto ao descasamento dos riscos primários

A Figura 7.14 mostra os resultados das simulações gerando o descasamento dos riscos primários $R_p(1) = 0,6$ e $R_p(2) = 0,8$ para fase de alocação e $R_p(1) = 0,8$ e $R_p(2) = 0,6$ para a fase de avaliação. As estratégias propostas se mostraram, me geral, melhores que a estratégia clássica.

A Figura 7.15 mostra os resultados para o mesmo cenário anterior, porém aplicando um descasamento maior, com os riscos primários para a fase de avaliação sendo $R_p(1) = 0,9$ e $R_p(2) = 0,4$. Como mostra o gráfico, as estratégias propostas também se mostraram melhores que a estratégia clássica, porém é possível verificar que a medida que o descasamento aumenta ocorre uma aproximação entre as curvas das estratégias propostas e a da estratégia clássica.

A Tabela 7.4 mostra os resultados obtidos nos três cenários onde o risco primário foi adicionado. Tais cenários foram configurados com os mesmos riscos primários para a fase de alocação de $R_p(1) = 0,6$ e $R_p(2) = 0,8$, e para a fase de avaliação foi configurada sem o descasamento com riscos primários de $R_p(1) = 0,6$ e $R_p(2) = 0,8$, com descasamento 1 com riscos primários de $R_p(1) = 0,8$ e $R_p(2) = 0,6$ e com descasamento 2 com riscos primários de $R_p(1) = 0,9$ e $R_p(2) = 0,4$.

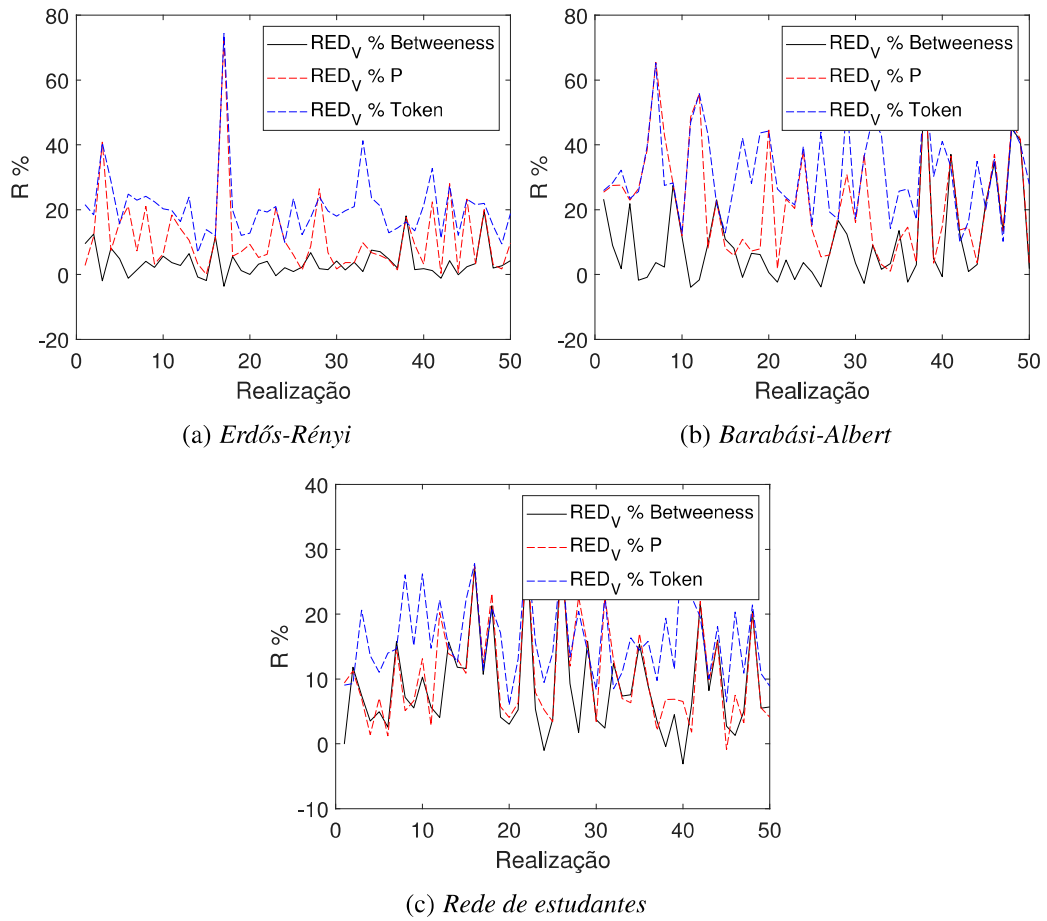


Figura 7.13: Comparação entre a estratégia baseada na intermediação (Betweenness) e as estratégias propostas de centralidade ponderada (P) e baseada em tokens (Token^a) inserindo dois focos iniciais com riscos primários de $R_p(1) = 0,6$ e $R_p(2) = 0,8$ para as fases de alocação e avaliação. Resultados obtidos nas redes (a) Erdős-Rényi ($N = 100$ e $M = 200$), (b) Barabási-Albert ($N = 68$ e $M = 152$) e (c) Rede de amizades em escolas americanas ($N = 69$ e $M = 220$).

Tabela 7.4: Resultados dos $R\%$ sem descasamento ($R_p(1) = 0,6$ e $R_p(2) = 0,8$), com descasamento 1 ($R_p(1) = 0,8$ e $R_p(2) = 0,6$) e com descasamento 2 ($R_p(1) = 0,9$ e $R_p(2) = 0,4$) na fase de avaliação, para as três redes testadas.

	Erdős-Rényi			Barabási-Albert			Amizade		
	Sem descas.	Com descas. 1	Com descas. 2	Sem descas.	Com descas. 1	Com descas. 2	Sem descas.	Com descas. 1	Com descas. 2
$R_{\%}^{BTW}$	3.6789	4.9074	5.8680	9.9739	6.4628	2.9448	8.8105	5.7381	4.5268
$R_{\%}^P$	11.2574	11.4051	11.4476	22.0354	16.1324	24.1075	10.6556	7.2211	5.3309
$R_{\%}^{Token(a)}$	20.6869	16.8763	14.9138	31.3773	31.6060	27.8195	16.1941	13.9255	11.2087
$R_{\%}^{Token(b)}$	20.1823	16.5645	14.8228	31.3166	31.5408	27.9237	16.1729	14.0396	11.7865
$R_{\%}^{Token(c)}$	20.6514	16.5857	15.1686	31.9312	31.5187	28.0848	16.3847	13.8987	11.8924

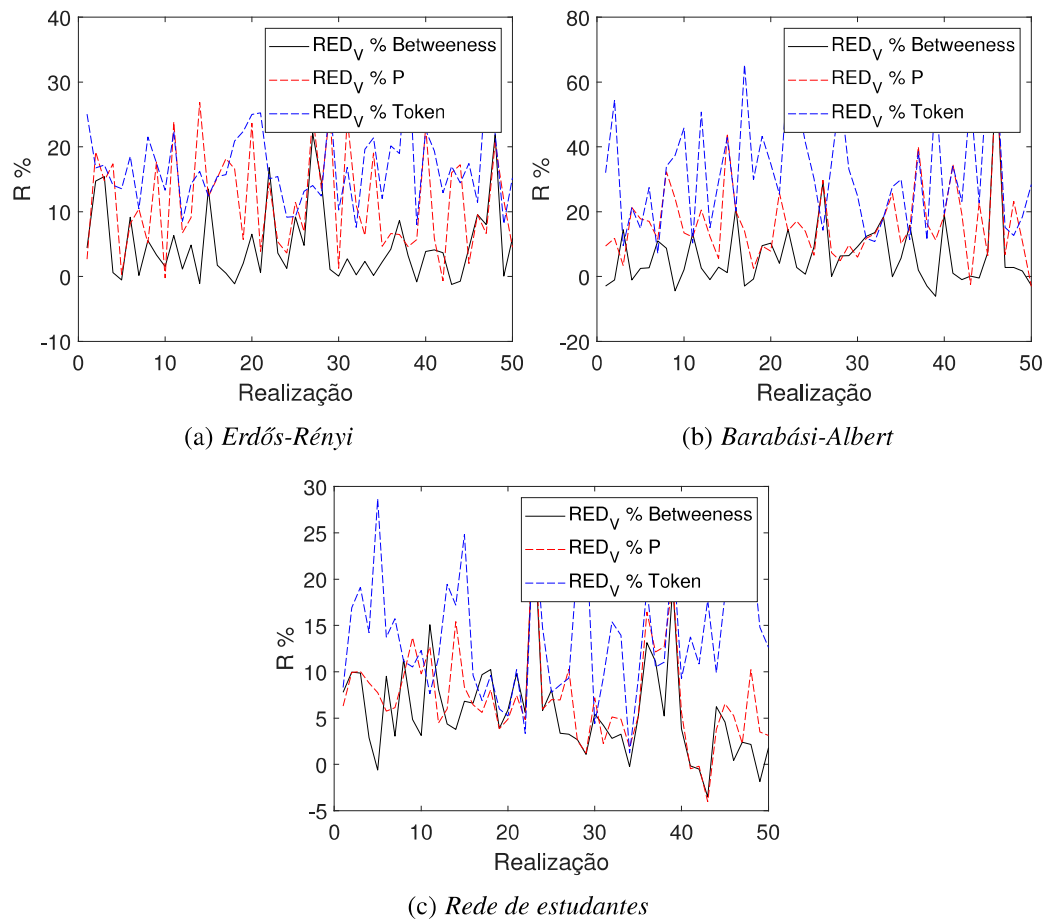


Figura 7.14: Comparação entre a estratégia baseada na intermediação (Betweenness) e as estratégias propostas de centralidade ponderada (P) e baseada em tokens (Token^a) inserindo dois focos iniciais com riscos primários de $R_p(1) = 0,6$ e $R_p(2) = 0,8$ para a fase de alocação e $R_p(1) = 0,8$ e $R_p(2) = 0,6$ para fase de avaliação. Resultados obtidos nas redes (a) Erdős-Rényi ($N = 100$ e $M = 200$), (b) Barabási-Albert ($N = 68$ e $M = 152$) e (c) Rede de amizades em escolas americanas ($N = 69$ e $M = 220$).

É possível constatar a contribuição das estratégias propostas se comparados com a estratégia clássica no cenário com risco primário. O mesmo comportamento é verificado mesmo com a inserção dos descasamentos. Observa-se também que, de acordo com o aumento do descasamento, os valores de $R_{\%}$ obtidos com as estratégias propostas se aproximam dos valores obtidos com a estratégia clássica, corroborando os resultados anteriormente apresentados.

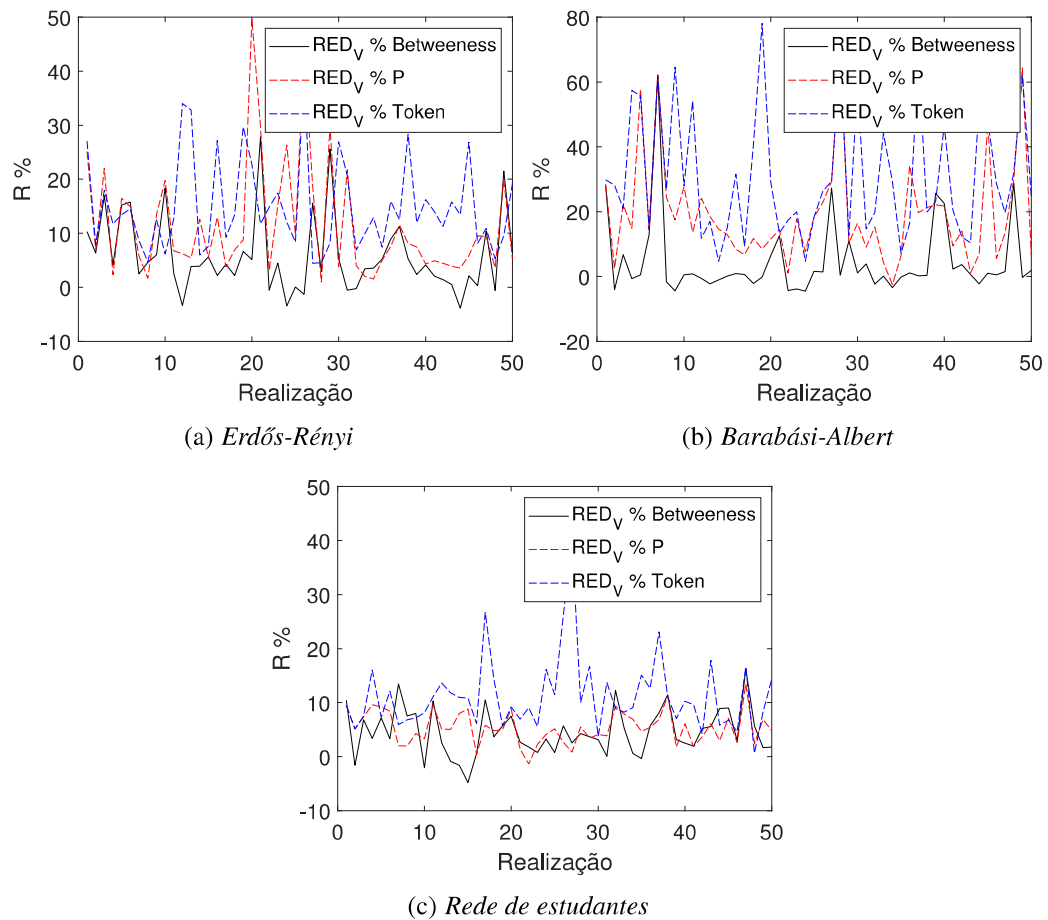


Figura 7.15: Comparação entre a estratégia baseada na intermediação (Betweenness) e as estratégias propostas de centralidade ponderada (P) e baseada em tokens (Token^a) inserindo dois focos iniciais com riscos primários de $R_p(1) = 0,6$ e $R_p(2) = 0,8$ para a fase de alocação e $R_p(1) = 0,9$ e $R_p(2) = 0,4$ para fase de avaliação. Resultados obtidos nas redes (a) Erdős-Rényi ($N = 100$ e $M = 200$), (b) Barabási-Albert ($N = 68$ e $M = 152$) e (c) Rede de amizades em escolas americanas ($N = 69$ e $M = 220$).

7.6 Considerações finais para controle de epidemias em redes com simulação de Monte Carlo

Neste trabalho investigou-se o uso de estratégias baseadas em Monte Carlo, no intuito de obter estratégias de imunização baseadas na dinâmica da epidemia. O modelo utilizado para a disseminação da epidemia foi o modelo SI. Os resultados foram avaliados em três estudos de casos, avaliando as estratégias em redes com diferentes características. As estratégias de utilizar recursos de controle nos contatos de indivíduos infectados já são amplamente utilizadas na prática, com a possibilidade de imunizar grupos de riscos, isolar

ou abater o indivíduo infectado em caso de animais, interromper o contato por métodos de barreira, entre outros. Assim, a proposta deste trabalho corrobora com as ações de controle praticadas no mundo real. As estratégias propostas se mostram, em média, melhores que a estratégia clássica baseado em intermediação. A estratégia baseada em *tokens* mostrou-se melhor que a estratégia baseada em centralidade ponderada. Verificou-se que as três configurações da estratégia baseada em *tokens* propostas mostraram resultados similares. Adicionando alterações na topologia de rede entre as fases de alocação e avaliação, as estratégias propostas se mostraram melhores que a estratégia clássica analisada. A estratégia baseada em *tokens* mais uma vez se mostrou melhor se comparado com as outras estratégias. Com a inclusão do risco primário em um cenário com dois focos iniciais, mais uma vez as estratégias propostas se mostraram melhores que a estratégia clássica. Uma redução dessa melhora foi observada com o descasamento dos riscos primários entre as fases de alocação e avaliação. Tal comportamento foi agravado quando os valores associados ao descasamento foi ampliado. Porém, em todos estes cenários, as estratégias propostas se mostraram em média melhores que a baseada em intermediação. O artigo contendo resultados obtidos neste capítulo está em fase de escrita.

Conclusão

A seguir as conclusões e contribuições deste trabalho são apresentadas, juntamente com as sugestões de trabalhos futuros.

8.1 Conclusões referentes à modelagem compartimental

Este trabalho propôs o uso de um modelo compartimental para estudo de políticas de controle ótimo considerando uma dinâmica sazonal, recursos limitados e atraso na efetividade do controle. Como estudo de caso, o modelo SIR foi utilizado para alocação temporal de um controle ótimo baseado em um métodos de barreira para a dinâmica da influenza sazonal.

Verificou-se que o controle ótimo escolhido alocou os recursos na região do horizonte de tempo em que o contágio era mais intenso, quando aplicado instantaneamente. Observou-se menores quantidades e indivíduos infectados utilizando a ação de controle, mostrando que a estratégia é válida.

Quando a aplicação do controle requer um tempo para que se torne efetiva, observou-se que o controle ótimo escolhido adiantou a alocação dos recursos, na região do horizonte de tempo em que o contágio era mais intenso, de maneira proporcional ao atraso. Observou-se menores quantidades de indivíduos infectados no decorrer da simulação adiantando a ação de controle, validando mais uma vez a estratégia proposta.

Entre as estratégias de aplicar o controle em um ou dois pulsos, o menor custo foi obtido agrupando os dois pulsos (formando assim um pulso só) ou alocando-os próximo um do outro. Isso significa que para a dinâmica sazonal proposta neste trabalho, as duas estratégias resultam em ações de controle similares. Assim, a redução do custo obtida com dois pulsos não foi considerada significativa. Do ponto de vista prático utilizar os dois pulsos seria o mesmo que aplicar a campanha em um período contínuo com uma pequena interrupção. Isso dificulta a logística da campanha, pois seria necessário interromper a campanha no meio por um curto período de tempo. Logo, por ser mais simples, a estratégia utilizando apenas um pulso será recomendada.

8.2 Conclusões referentes à modelagem baseada em indivíduos

Neste trabalho foi proposto uma modelagem baseada em indivíduos para o modelo SIRC bem como a demonstração de sua equivalência. Como esperado, a equivalência dependeu diretamente dos parâmetros N e Δt . À medida que os valores de N aumentam e Δt diminui, as trajetórias do modelo MBI tendem a se aproximar das do SIRC. Este comportamento foi analisado em cada estado, mostrando que os desvios padrão acompanham os limiares médios e com a configuração adequada de N e Δt , o desvio padrão tende a se aproximar da média. Para este estudo de caso, os valores de $N = 8000$ e $\Delta t = 0,0001$ foram considerados suficientes para equivalência entre os modelos.

Foi proposto o uso dos modelos SIR e SIRC determinísticos para obtenção do controle ótimo, e posteriormente avaliação desta política de controle aplicada em um cenário homogêneo utilizando um modelo MBI equivalente. As estratégias de controle escolhidas foram vacinação e método de barreira para o modelo SIR e vacinação e tratamento para o SIRC. Foi aplicado um estudo de caso baseado em uma dinâmica de influenza, em que ambas as estratégias mostraram uma redução na quantidade de indivíduos infectados. Resultados equivalentes foram obtidos nos modelos MBI-SIR e MBI-SIRC com e sem o uso de controle.

Os resultados também foram analisados por dois critérios, o custo associado ao controle e o impacto causado pelo seu uso. Adicionando o controle de vacinação e barreira ao modelo MBI-SIR, verificou-se a redução considerável da quantidade de indivíduos infectados, mostrando que a estratégia de controle é válida e eficaz para a contenção da epidemia. O método de barreira mostrou um comportamento de bifurcação, se mostrando mais caro que o método de vacinação. O método de vacinação se mostrou similar à estratégia utilizando ambos os controles, concluindo-se assim que o método de barreira para este estudo não se mostrou satisfatório. Adicionando o controle de vacinação e tratamento ao modelo MBI-SIRC, verificou-se a redução da quantidade de indivíduos infectados, mostrando que a estratégia de controle é válida. Porém para o estudo de caso aplicado se mostrou pouco sensível.

O uso do modelo MBI para inserir incertezas se mostrou positivo para a análise das dinâmicas. O modelo SIR evidenciou uma diferença expressiva quanto ao uso dos controles individualmente em relação do uso em conjunto. Porém, devido ao fato de o modelo SIRC não ter se mostrado tão sensível aos controles utilizados neste estudo de caso, não foi possível obter uma boa visualização da estratégia a ser utilizada. De acordo com os desvios padrões obtidos não há uma diferença expressiva entre os pesos variados.

A análise utilizando o custo gerado pelo controle em conjunto com o impacto dele na população foi de grande valia, uma vez que as simulações não foram feitas com

apenas um peso para cada critério de avaliação. Desta forma foi possível verificar 16 cenários para o SIRC e 19 para o SIR.

Adicionalmente, em comparação com modelos compartimentais, o custo computacional para a simulação de um MBI é tipicamente mais elevado. Assim foi proposto um modelo MBI paralelizado para ser processado em placas gráficas. O MBI paralelo se mostrou equivalente ao modelo SIR, e resultou em uma redução do tempo computacional por um fator de vinte.

8.3 Conclusões referentes à modelagem baseada em redes complexas

Neste trabalho foi investigado uso de um novo paradigma em que a importância do nó na rede seja obtida com informações provindas da dinâmica da epidemia. Tais informações são obtidas por múltiplas realizações da disseminação da doença na rede, geradas com a simulação de Monte Carlo. Duas metodologias foram empregadas para a obtenção desta nova métrica: o modelo baseado em centralidade ponderada, que utiliza tanto o comportamento da epidemia quanto a centralidade dos nós para classificar suas importâncias, e também uma estratégia baseada em *tokens*, sinalizando os indivíduos contaminados em múltiplas propagações da epidemia.

Foi feito um estudo de caso do uso de políticas de controle epidemiológico utilizando o modelo SI para a dinâmica de disseminação da doença e aplicado as três redes com diferentes características. Os resultados para o caso nominal mostraram que ambos os modelos propostos foram em média melhores que o modelo clássico baseado em intermediação. Tais resultados também foram obtidos quando a topologia de rede da fase de alocação é modificada. Verificou-se que as três configurações da estratégia baseada em *tokens* propostas mostraram resultados similares.

Os modelos propostos também se mostraram melhores quando o risco primário foi incluído no modelo considerando dois focos primários. Os resultados foram validados tanto no cenário em que os riscos primários são equivalentes entre a fase de alocação e validação, quanto nos cenários em que diferentes valores foram utilizados. Em todos os resultados obtidos, se os modelos propostos forem comparados entre si, o modelo baseado em *tokens* se mostrou melhor que o baseado em centralidade ponderada.

8.4 Contribuições

As contribuições deste trabalho são:

- Avaliação de políticas de controle por métodos de barreira aplicado à influenza sazonal no modelo SIR. Publicado em [48]
- O modelo MBI equivalente ao SIR com as ações de controle por vacinação e métodos de barreira.
- O modelo MBI equivalente ao modelo SIRC clássico (proposto em [21]) e o mesmo modelo com a política de controle utilizada em [66]. Publicado em [50].
- O uso do modelo MBI para inserir incertezas aos modelos SIR e SIRC, no intuito de verificar o comportamento médio da dinâmica do modelo determinístico sob efeito das políticas de controle ótimo implementadas. Dois artigos em fase de submissão.
- Avaliação do custo gerado pela aplicação da estratégia de controle, complementando a análise da eficácia do controle aplicado sobre a população efetuada em [66].
- O modelo MBI equivalente ao SIR implementado na plataforma CUDA para explorar o ganho computacional obtido utilizando uma GPU. Publicações em [51, 49].
- Estratégia de imunização baseado na centralidade ponderada, que associa a importância do nó *hub* da rede obtido pelas estratégias de centralidade clássicas, com a importância baseada na dinâmica da disseminação da epidemia. Artigo em construção.
- Estratégia de imunização baseada em *tokens*, que classifica a importância do nó *hub* da rede inteiramente à dinâmica da disseminação da epidemia, associando um marcador à cada nó infectado na rede. Adicionalmente, três diferentes configurações da estratégia baseada em *tokens*: a primeira associa os marcadores de todos possíveis nós infectantes ao nó infectado sem repetição, o segundo idem ao primeiro porém sem repetição e o terceiro escolhendo aleatoriamente dentre os nós infectantes qual o nó infectado irá herdar os marcadores. Artigo em construção.
- De fato as estratégias propostas mostraram maior eficácia se comparadas com as estratégias clássicas nos estudos de caso aqui apresentados, porém existem algumas dificuldades tais como o custo para estimar o foco inicial da epidemia, dificuldade para se levantar alguns parâmetros (por exemplo a probabilidade de contágio e o risco primário) de acordo com a epidemia a ser considerada, dentre outras. Tais dificuldades podem ser aprimoradas em trabalhos futuros.

8.5 Trabalhos futuros

As sugestões para a continuidade do trabalho são:

- Como pode ser observado, o estudo de caso aplicado ao SIRC não se mostrou muito sensível ao uso do controle, porém pode-se considerar outros cenários em que a

infecção seja mais grave e assim tornando o uso do controle mais importante. De modo similar, o uso do método de barreira também não se mostrou muito adequado ao SIR considerando este estudo de caso, podendo ser melhor investigado em outros cenários.

- Estender a análise do compromisso entre o custo gasto pelo controle e o seu impacto na população para cenários ainda mais realista onde haja heterogeneidades individuais na população. Um exemplo seria a associação de vulnerabilidade à doença com a idade do indivíduo. Assim as ações de controle podem ser melhor aproveitadas separando categorias como idosos, crianças dentre outros que receberiam prioritariamente a vacinação e o tratamento. Dessa forma espera-se que com este cenário seja possível classificar com mais precisão qual o grupo prioritário para a determinada ação de controle. Tal análise pode ser feita obtendo-se o controle ótimo com o modelo compartimental determinístico homogêneo e aplica-lo à um modelo MBI incluindo a heterogeneidade individual associada à vulnerabilidade. Inicialmente, a política de controle ótimo (como por exemplo a vacina) pode ser aplicada somente nos indivíduos que se enquadram no caso emergente (como por exemplo idosos, gestantes e portadores de doenças crônicas, considerando que a doença seja a gripe). Deste modo no modelo compartimental o controle aplicado leva em conta que todos os suscetíveis podem receber a vacina, porém este controle não será aplicado em indivíduos que não fazem parte do grupo de risco e assim haverá uma discrepância entre os resultados obtidos pelo modelo homogêneo e heterogêneo. Esta diferença pode então ser mensurada e analisada com o comportamento médio e desvio padrão.
- Estender a análise do compromisso entre o custo gasto pelo controle e o seu impacto na população considerando heterogeneidades espaciais na população. Tal cenário pode ser interpretado como uma rede de computadores em que cada indivíduo da população seja um computador ligado à rede. Dessa forma pode-se aplicar diversas estratégias de controle, tais como a imunização dos computadores por anti-vírus, métodos de barreira entre as regiões dentre outros.
- Verificar a dinâmica do modelo MBI heterogêneo com a inserção da incerteza, e assim analisar os resultados com certa variabilidade. Os resultados obtidos com os modelos heterogêneos serão confrontados com os resultados dos modelos homogêneos aqui apresentados. É esperado que, aplicando uma lei de controle que envolva as heterogeneidades, a quantidade de indivíduos infectados ou o custo envolvendo o controle seja menor devido ao fato dos recursos serem melhores aproveitados.
- Propor um modelo que facilite a escolha da política de controle ótimo, em que os parâmetros de análise impacto e custo da estratégia utilizada sejam convertidas para risco ou retorno financeiro. Como exemplo será considerado que o analista

disponha de um dado recurso inicial. Tal modelo pode ser implementado obtendo-se o controle ótimo do modelo compartimental, considerando os recursos disponíveis inicialmente, e em seguida aplica-lo ao modelo MBI equivalente. Depois, uma função de avaliação ponderaria a estratégia considerando as variações obtidas do modelo MBI, podendo considerar o pior caso por exemplo. O resultado dessa função seria um ponderador indicando o lucro/risco do investimento inicial feito pelo analista. Dessa forma, é possível utilizar tal ponderador para propor uma nova estratégia de controle à ser aplicado na população. Assim será possível fazer uma previsão dos recursos gastos para a estratégia de controle em longo prazo ou em situações de epidemias recorrentes. É importante frisar que o exemplo dado não deve ser associado à modelos aplicados em humanos, tal cenário pode ser melhor exemplificado aplicados em animais. Dinâmicas de animais podem ainda associar outras características como abate, isolamento e etc.

- Estender a análise da estratégia baseada em centralidade ponderada, utilizando em outras centralidades diferentes da intermediação, como por exemplo as centralidade de grau, autovalores, *k-shell* dentre outros.
- Verificar as estratégias propostas sendo baseadas em outras dinâmicas de epidemia além da SI, como por exemplo os modelos SIR, SIRS, e outros citados na sessão 7.1.
- Estender os estudo à estratégias que imunizam arestas, verificando se os mesmos resultados serão encontrados e ainda possibilitando verificar novas abordagens como métodos de barreira, isolamento e etc.
- Estender o mesmo estudo a outras redes, de modo a corroborar os resultados aqui apresentados e verificar possíveis cenários onde a diferença entre as três configurações da estratégias baseada em *tokens* seja mais expressiva.
- As simulações envolvendo redes complexas em geral se mostram custosas em relação ao esforço computacional. Como a paralelização se mostrou uma boa alternativa para a redução de tal esforço nos modelos MBI, seria interessante paralelizar as propostas aqui apresentadas. Esta abordagem resultaria análises em redes maiores e que contemplem heterogeneidades, possibilitando até um modelo equivalente à modelagem compartimental e baseada em indivíduos.

Referências Bibliográficas

- [1] AHMADIAN, M.; TYSON, J.; CAO, Y. **A stochastic model of size control in the budding yeast cell cycle.** In: *Em: Proceedings of the 2018 ACM International Conference on Bioinformatics, Computational Biology, and Health Informatics*, 2018. 22
- [2] ALBERT, R.; JEONG, H.; BARABÁSI, A.-L. **Error and attack tolerance of complex networks.** *nature*, 406(6794):378–382, 2000. 32, 84, 88
- [3] ALDOUS, D. J.; OTHERS. **Deterministic and stochastic models for coalescence (aggregation and coagulation): a review of the mean-field theory for probablists.** *Bernoulli*, 5(1):3–48, 1999. 21
- [4] ALLEN, L. J. S. **Some discrete-time si, sir and sis epidemic models.** *Mathematical biosciences*, 124:83–105, 1994. 60
- [5] ALLEN, L. J. S.; BURGIN, A. M. **Comparison of deterministic and stochastic sis and sir models in discrete time.** *Mathematical Biosciences*, 163:1–33, 2000. 60
- [6] ANAND, M.; LEE, M. Y.; DIAMOND, S. L. **Combining data-driven neural networks of platelet signalling with large-scale ode models of coagulation.** *Sādhanā*, 43(11):180, 2018. 22
- [7] ANDERSON, R. M.; MAY, R. M. **Infectious diseases of humans: Dinamics and control.** Oxford University Press, 1992. 24
- [8] ARIF, S.; OLARIU, S. **Efficient solution of a stochastic si epidemic system.** *Journal of Supercomputing*, 62:1385–1403, 2012. 24, 60
- [9] ARORA, R.; TULSHYAN, R.; DEB, K. **Parallelization of binary and real-coded genetic algorithms on GPU using CUDA.** In: *Proceedings of 2010 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*, 2010. 46, 47
- [10] ASTROM, K. J.; ELMQVIST, H.; AB, D.; MATTSSON, S. E. **Evolution of continuous-time modeling and simulation.** In: *Em: 12th European Simulation Multiconference, ESM'98, Manchester, UK*, 1998. 22

- [11] AUGERAUD-VÉRON, E.; SARI, N. **Seasonal dynamics in an sir epidemic system.** *Journal of Mathematical Biology*, 2013. 60
- [12] BALL, F.; NEAL, P. **A general model for stochastic sir epidemics with two levels of mixing.** *Mathematical Biosciences*, 180:73–102, 2002. 60
- [13] BARABÁSI, A.-L.; ALBERT, R. **Emergence of scaling in random networks.** *science*, 286(5439):509–512, 1999. 34, 99
- [14] BEHNCKE, H. **Optimal control of deterministic epidemics.** *Optimal Control Applications and Methods*, 21:269–285, 2000. 24, 51, 60, 61
- [15] BOCCALETTI, S.; LATORA, V.; MORENO, Y.; CHAVEZ, M.; HWANG, D.-U. **Complex networks: Structure and dynamics.** *Physics reports*, 424(4):175–308, 2006. 22, 25, 33, 35, 36, 84
- [16] BONACICH, P. **Power and centrality: A family of measures.** *American journal of sociology*, p. 1170–1182, 1987. 84
- [17] BRINGMANN, L. F.; ERONEN, M. I. **Don't blame the model: Reconsidering the network approach to psychopathology.** *Psychological Review*, 125(4):606, 2018. 22
- [18] CADÉRO, A.; AUBRY, A.; BROSSARD, L.; DOURMAD, J.-Y.; SALAÜN, Y.; GARCIA-LAUNAY, F. **Modelling interactions between farmer practices and fattening pig performances with an individual-based model.** *animal*, 12(6):1277–1286, 2018. 22
- [19] CAETANO, M. A. L.; YONEYAMA, T. **Optimal and sub-optimal control in dengue epidemics.** *Optimal control applications and methods*, 22:63–73, 2001. 60
- [20] CAPONE, F.; CATALDIS, V. D.; LUCA, R. D. **On the nonlinear stability of an epidemic seir reaction-diffusion model.** *Ricerche di Matematica*, 62:161–181, 2013. 24, 60
- [21] CASAGRANDE, R.; BOLZONI, L.; LEVIN, S. A.; ANDREASEN, V. **The sirc model and influenza a.** *Mathematical Biosciences*, 200:156–169, 2006. 24, 37, 65, 70, 111
- [22] CHAKRABARTI, D.; WANG, Y.; WANG, C.; LESKOVEC, J.; FALOUTSOS, C. **Epidemic thresholds in real networks.** *ACM Transactions on Information and System Security (TISSEC)*, 10(4):1, 2008. 84

- [23] CHEN, B.; LI, J. S.; WU, X. F.; HAN, M. Y.; ZENG, L.; LI, Z.; CHEN, G. Q. **Global energy flows embodied in international trade: A combination of environmentally extended input–output analysis and complex network analysis.** *Applied energy*, 210:98–107, 2018. 22
- [24] CHEN, G.; DUAN, X.; FRIEDKIN, N. E.; BULLO, F. **Social power dynamics over switching and stochastic influence networks.** *IEEE Transactions on Automatic Control*, 62(2):582–597, 2019. 22
- [25] CHEN, Y.; PAUL, G.; HAVLIN, S.; LILJEROS, F.; STANLEY, H. E. **Finding a better immunization strategy.** *Physical review letters*, 101(5):058701, 2008. 88
- [26] CHEN, Z.; WU, J.; XIA, Y.; ZHANG, X. **Robustness of interdependent power grids and communication networks: A complex network perspective.** *IEEE Transactions on Circuits and Systems II: Express Briefs*, 65(1):115–119, 2018. 22
- [27] CISTERNAS, J.; GEAR, C. W.; LEVIN, S.; KEVREKIDIS, I. G. **Equation-free modeling of evolving diseases: coarse-grained computations with individual-based models.** *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 460(2050):2761–2779, 2004. 25, 28, 30, 39, 55
- [28] COELHO, C. J.; (COORD). **Desenvolvimento experimental de gêmeo digital para usinas hidrelétricas.** Projeto P&D - Pesquisa & Desenvolvimento (PD-06631-0007/2018), 2018. 23
- [29] COHEN, R.; HAVLIN, S.; BEN-AVRAHAM, D. **Efficient immunization strategies for computer networks and populations.** *Physical review letters*, 91(24):247901, 2003. 84, 88
- [30] DA CRUZ, J. P.; ARAÚJO, N. A.; RAISCHEL, F.; LIND, P. G. **A thermostistical approach to scale-free networks.** *International Journal of Modern Physics C*, 26(06):1550070, 2015. 36
- [31] DE PAULA, L. C.; SOARES, A. S.; SOARES, T. W.; DELBEM, A. C.; COELHO, C. J.; ARLINDO FILHO, R. **Parallelization of a modified firefly algorithm using gpu for variable selection in a multivariate calibration problem.** *International Journal of Natural Computing Research (IJNCR)*, 4(1):31–42, 2014. 45
- [32] DE SCHRYVER, C.; SCHMIDT, D.; WEHN, N.; KORN, E.; MARXEN, H.; KOSTIUK, A.; KORN, R. **A hardware efficient random number generator for nonuniform distributions with arbitrary precision.** *International Journal of Reconfigurable Computing*, 2012, 2012. 47

- [33] DEANGELIS, D. L. **Individual-based models and approaches in ecology: populations, communities and ecosystems**. CRC Press, 2018. 22
- [34] DORAN, R. J.; LAFFAN, S. W. **Simulating the spatial dynamics of foot and mouth disease outbreaks in feral pigs and livestock in queensland, australia, using a susceptible-infected-recovered cellular automata model**. *Preventive Veterinary Medicine*, 70(1):133–152, 2005. 84
- [35] DORMAND, J. R.; PRINCE, P. J. **A family of embedded runge-kutta formulae**. *Journal of computational and applied mathematics*, 6(1):19–26, 1980. 30, 39, 55, 64, 68
- [36] DUBOIS, G. **Modeling and Simulation: Challenges and Best Practices for Industry**. CRC Press, 2018. 21
- [37] EL-SHAHED, M.; ALSAEDI, A. **The fractional sirc model and influenza a**. *Mathematical Problems in Engineering*, 2011:9, 2011. 24, 60, 70
- [38] ENATSU, Y.; MESSINA, E.; NAKATA, Y.; MUROYA, Y.; RUSSO, E.; VECCHIO, A. **Global dynamics of a delayed sirs epidemic model with a wide class of nonlinear incidence rates**. *Bulletin of Mathematical Biology*, 2012. 60
- [39] ERDŐS, P.; RÉNYI, A. **On the evolution of random graphs**. *Publ. Math. Inst. Hungar. Acad. Sci*, 5:17–61, 1960. 33, 99
- [40] ÉRDI, P.; TÓTH, J. **Mathematical models of chemical reactions: theory and applications of deterministic and stochastic models**. Manchester University Press, 1989. 21
- [41] ERRA, U.; FROLA, B.; SCARANO, V.; COUZIN, I. **An efficient gpu implementation for large scale individual-based simulation of collective behavior**. In: *In: International Workshop on High Performance Computational Systems Biology*, 2009. 47
- [42] FELDMAN, D.; SHAVITT, Y.; ZILBERMAN, N. **A structural approach for pop geolocation**. *Computer Networks*, 56(3):1029–1040, 2012. 35
- [43] FILELIS-PAPADOPOULOS, C. K.; GRAVVANIS, G. A.; MATSKANIDIS, P. I.; GIANNOU-TAKIS, K. M. **On the gpgpu parallelization issues of finite element approximate inverse preconditioning**. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 236:294–307, 2011. 43
- [44] FILHO, N. A.; ROUQUAYROL, M. Z. **Introdução à epidemiologia**. Guanabara Koogan, 2006. 24

- [45] FLONDOR, P.; OLTEANU, M.; ŞTEFAN, R. **Qualitative analysis of an ode model of a class of enzymatic reactions.** *Bulletin of mathematical biology*, 80(1):32–45, 2018. 22
- [46] FLOYD, W.; KAY, L.; SHAPIRO, M. **Some elementary properties of sir networks or, can i get sick because you got vaccinated?** *Bulletin of Mathematical Biology*, 70:713–727, 2008. 60
- [47] FREEMAN, L. C. **A set of measures of centrality based on betweenness.** *Sociometry*, p. 35–41, 1977. 32, 84
- [48] GALVÃO FILHO, A. R.; GALVÃO, R. K. H.; YONEYAMA, T. **Otimização da alocação temporal de recursos para combate a epidemias com transmissão sazonal através de métodos de barreira.** *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics*, 1(1), 2013. 30, 39, 55, 58, 60, 111
- [49] GALVÃO FILHO, A. R.; MARTINS DE PAULA, L. C.; COELHO, C. J.; DE LIMA, T. W.; DA SILVA SOARES, A. **Cuda parallel programming for simulation of epidemiological models based on individuals.** *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 39(3):405–411, 2016. 22, 29, 30, 39, 50, 55, 111
- [50] GALVÃO FILHO, A. R.; DE LIMA, T. W.; DA SILVA SOARES, A.; COELHO, C. J. **A stochastic approach of sirc model using individual-based epidemiological models.** In: *EPIA Conference on Artificial Intelligence*, p. 778–788. Springer, 2017. 22, 30, 39, 42, 55, 111
- [51] GALVÃO FILHO, A. R.; ARRUDA, F. D. B.; GALVÃO, R. K. H.; YONEYAMA, T. **Programação paralela CUDA para simulação de modelos epidemiológicos baseados em indivíduos.** In: *Em: Anais do X Simpósio Brasileiro de Automação Inteligente, São João del-Rei, MG*, 2011. 30, 39, 44, 50, 55, 70, 111
- [52] GANG, Y.; TAO, Z.; JIE, W.; ZHONG-QIAN, F.; BING-HONG, W. **Epidemic spread in weighted scale-free networks.** *Chinese Physics Letters*, 22(2):510, 2005. 84
- [53] GIANCOTTI, K. H. O.; DE ASSIS DIAS, F.; M. TEXEIRA, W. W.; NEPOMUCENO, E. G.; KURCBART, S. M. **Análise da estrutura do MBI: sensibilidade da taxa de infecção e da população.** In: *Em: Anais do XVIII Congresso Brasileiro de Automática, Bonito, MS*, 2010. 29
- [54] GÓMEZ-GARDEÑES, J.; LATORA, V.; MORENO, Y.; PROFUMO, E. **Spreading of sexually transmitted diseases in heterosexual populations.** *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 105(5):1399–1404, 2008. 84

- [55] GRENFELL, B. T.; BJONSTAD, O. N.; FINKENSTADT, B. F. **Dinamics of measles epidemic: scaling noise, determination, and predictability with the TSIR model.** *Ecological Modelling*, 72:185–202, 2002. 24
- [56] GRIMM, V.; BERGER, U.; BASTIANSEN, F.; ELIASSEN, S.; GINOT, V.; GISKE, J.; GOSS-CUSTARD, J.; GRAND, T.; HEINZ, S. K.; HUSE, G.; OTHERS. **A standard protocol for describing individual-based and agent-based models.** *Ecological modelling*, 198(1-2):115–126, 2006. 22
- [57] GUIMERA, R.; AMARAL, L. A. N. **Modeling the world-wide airport network.** *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, 38(2):381–385, 2004. 35
- [58] HADJICHRYSANTHOU, C.; SHARKEY, K. J. **Epidemic control analysis: Designing targeted intervention strategies against epidemics propagated on contact networks.** *Journal of theoretical biology*, 365:84–95, 2015. 84
- [59] HANSEN, E.; DAY, T. **Optimal control of epidemics with limited resources.** *Mathematical Biology*, 62:423–451, 2011. 51, 60
- [60] HARRIS, K. M. **The add health study: design and accomplishments.** *Carolina Population Center, University of North Carolina at Chapel Hill*, 2013. 36, 99
- [61] HAUENSTEIN, S.; FATTEBERT, J.; GRÜEBLER, M.; NAEF-DAENZER, B.; PE'ER, G.; HARTIG, F. **Calibrating an individual-based movement model to predict functional connectivity for little owls.** *Ecological Applications*, p. e01873, 2019. 22
- [62] HERRMANN, H. J. Comunicação pessoal: Os dados foram gentilmente cedidos pelo Prof. Hans Herrmann, 13-01-2014. 36, 99
- [63] HOLME, P. **Efficient local strategies for vaccination and network attack.** *EPL (Europhysics Letters)*, 68(6):908, 2004. 84, 88
- [64] HOLME, P.; KIM, B. J.; YOON, C. N.; HAN, S. K. **Attack vulnerability of complex networks.** *Physical Review E*, 65(5):056109, 2002. 84
- [65] HÖCKERDAL, E.; FRISK, E.; ERIKSSON, L. **Real-time performance of dae and ode based estimators evaluated on a diesel engine.** *Science China Information Sciences*, 61(7):70202, 2018. 22
- [66] IACOVIELLO, D.; STASIO, N. **Optimal control for sirc epidemic outbreak.** *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, 110:333–342, 2013. 24, 27, 60, 65, 70, 111

- [67] JI, C.; JIANG, D.; YANG, Q.; SHI, N. **Dynamics of a multigroup sir epidemic model with stochastic perturbation.** *Automatica*, 48:121–131, 2012. 60
- [68] JIAN-QUAN, L.; JIE, L.; MEI-ZHI, L. **Some discrete si and sis epidemic models.** *Applied Mathematics and Mechanics*, 29:113–119, 2008. 60
- [69] JIANG, M.; GAO, X.; GUAN, Q.; HAO, X.; AN, F. **The structural roles of sectors and their contributions to global carbon emissions: A complex network perspective.** *Journal of Cleaner Production*, 208:426–435, 2019. 22
- [70] JUDSON, O. P. **The rise of the individual-based model in ecology.** *Trends in ecology & evolution*, 9(1):9–14, 1994. 22
- [71] JÓDAR, L.; VILLANUEVA, R. J.; ARENAS, A. J.; GONZÁLEZ, G. C. **Nonstandard numerical methods for a mathematical model for influenza disease.** *Mathematics and Computers in Simulation*, 79:622–633, 2008. 24, 70
- [72] KE, H.; YI, T. **Immunization for scale-free networks by random walker.** *Chinese Physics*, 15(12):2782, 2006. 84, 88
- [73] KE, Y.; LI, Y.; LI, D. **Image matching using genetic algorithm on GPU.** In: *International Conference on Control, Automation and Systems Engineering (CASE)*, 2011. 46
- [74] KERMACK, W.; MCKENDRICK, A. **A contribution to the mathematical theory of epidemics.** *Proceedings of the Royal Society of London - Series A*, 115:700 – 721, 1927. 24
- [75] KIRK, D. E. **Optimal control theory: an introduction.** Prentice-Hall, 1970. 22, 46, 53, 64, 68, 70
- [76] KITSAK, M.; GALLOS, L. K.; HAVLIN, S.; LILJEROS, F.; MUCHNIK, L.; STANLEY, H. E.; MAKSE, H. A. **Identification of influential spreaders in complex networks.** *Nature physics*, 6(11):888–893, 2010. 84
- [77] KNIBBE, H.; OOSTERLEE, C. W.; VUIK, C. **Gpu implementation of a helmholtz krylov solver preconditioned by a shifted laplace multigrid method.** *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 236:281–293, 2011. 43
- [78] KOROBEINIKOV, A. **Global properties of sir and seir epidemic models with multiple parallel infectious stages.** *Mathematical Biology*, 71:75–83, 2009. 24, 60

- [79] LANZAS, C.; CHEN, S. **Complex system modelling for veterinary epidemiology.** *Preventive veterinary medicine*, 118(2):207–214, 2015. 36, 84
- [80] LAWYER, G. **Understanding the influence of all nodes in a network.** *Scientific reports*, 5, 2015. 84, 85
- [81] LEE, J.; JUNGEUNKIM.; HEE-DAEKWON. **Optimal control of an influenza model with seasonal forcing and age-dependent transmission rates.** *Journal of Theoretical Biology*, 317:310–320, 2013. 60
- [82] LEE, S.; CHOWELL, G.; CASTILLO-CHÁVEZ, C. **Optimal control for pandemic influenza: The role of limited antiviral treatment and isolation.** *Journal of Theoretical Biology*, 265:136–150, 2010. 60, 70
- [83] LI, D.; MA, J.; TIAN, Z.; ZHU, H. **An evolutionary game for the diffusion of rumor in complex networks.** *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 433:51–58, 2015. 36, 84
- [84] LI, T.; WANG, Y.; GUAN, Z.-H. **Spreading dynamics of a siqrs epidemic model on scale-free networks.** *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 19(3):686–692, 2014. 84
- [85] LIN, M.-H.; TSAI, J.-F.; YU, C.-S. **A review of deterministic optimization methods in engineering and management.** *Mathematical Problems in Engineering*, 2012, 2012. 21
- [86] LIND, P. G.; DA SILVA, L. R.; ANDRADE JR, J. S.; HERRMANN, H. J. **The spread of gossip in american schools.** *EPL (Europhysics Letters)*, 78(6):68005, 2007. 36, 99
- [87] LIU, Y.; DENG, Y.; JUSUP, M.; WANG, Z. **A biologically inspired immunization strategy for network epidemiology.** *Journal of Theoretical Biology*, 400:92–102, 2016. 89
- [88] LU, Z.; CHI, X.; CHEN, L. **The effect of constant and pulse vaccination on SIR epidemic model with horizontal and vertical transmission.** *Mathematical and Computer Modelling*, 36:1039 – 1057, 2002. 24, 60
- [89] LUZYANINA, T. B.; BOCHAROV, G. A. **Markov chain monte carlo parameter estimation of the ode compartmental cell growth model.** *Mat. Biolog. Bioinform.*, 13(2):376–391, 2018. 22

- [90] MACFARLANE, F. R.; CHAPLAIN, M. A.; LORENZI, T. **A stochastic individual-based model to explore the role of spatial interactions and antigen recognition in the immune response against solid tumours.** *arXiv preprint arXiv:1904.02979*, 2019. 22
- [91] MAMEDE, G. L.; ARAÚJO, N. A.; SCHNEIDER, C. M.; DE ARAÚJO, J. C.; HERRMANN, H. J. **Overspill avalanching in a dense reservoir network.** *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 109(19):7191–7195, 2012. 36
- [92] MATSUMOTO, M.; NISHIMURA, T. **Mersenne twiter: a 623-dimensionally equidistributes uniform pseudo-random number gerator.** *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, 8(1), 1998. 47
- [93] MINISTÉRIO DA SAÚDE. **Boletim informativo de influenza.** <http://portalsaude.saude.gov.br/portalsaude/noticia/6651/785/boletim-informativo-de-influenza:-semana-epidemiologica-32.html>, 2012. [Online; acessado 1-maio-2013]. 51, 52
- [94] MONSHIZADEH, N.; DE PERSIS, C.; VAN DER SCHAFT, A. J.; SCHERPEN, J. **A novel reduced model for electrical networks with constant power loads.** *IEEE Transactions on Automatic Control*, 63(5):1288–1299, 2018. 22
- [95] MONTEIRO, L. H. A.; SASSO, J. B.; BERLINCK, J. G. C. **Continuous and discrete approaches to the epidemiology of viral spreading in populations taking into account the delay of incubation time.** *Ecological Modelling*, 201:553–557, 2007. 60
- [96] MORTON, R.; WICKWIRE, K. H. **On the optimal control of a deterministic epidemic.** *Advances in Applied Probability*, 6(4):622–635, 1974. 24, 53
- [97] NEPOMUCENO, E. G. **Dinâmica, modelagem e controle de epidemias.** PhD thesis, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, 2005. 25, 30, 39, 53, 55, 61, 70
- [98] NERI, F. M.; PÉREZ-RECHE, F. J.; TARASKIN, S. N.; GILLIGAN, C. A. **Heterogeneity in susceptible infected removed sir epidemics on lattices.** *Journal of the Royal Society Interface*, 8:201–209, 2011. 25, 60
- [99] NIE, L.-F.; TENG, Z.-D.; GUO, B.-Z. **A state dependent pulse control strategy for a sirs epidemic system.** *Bulletin of Mathematical Biology*, 2013. 24, 60
- [100] NOH, J. D.; RIEGER, H. **Random walks on complex networks.** *Physical review letters*, 92(11):118701, 2004. 84, 88

- [101] NOWZARI, C.; PRECIADO, V. M.; PAPPAS, G. J. **Analysis and control of epidemics: A survey of spreading processes on complex networks.** *IEEE Control Systems*, 36(1):26–46, 2016. 22, 25, 84
- [102] NUNES, J. A. **The uncertain and the unruly: complexity and singularity in biomedicine and public health.** *Centro de Estudos Sociais*, 2003. 89
- [103] NVIDIA, C. **Cuda programming guide.** <http://developer.nvidia.com>, 2012. [Online; accessed 15-September-2012]. 46
- [104] NVIDIA, C. **Nvidia gpu computing sdk.** <http://developer.nvidia.com>, 2012. [Online; accessed 15-September-2012]. 47
- [105] PARK, S. K.; MILLER, K. W. **Random number generators: Good ones are hard to find.** *Communications of the ACM*, 31(10), 1988. 46
- [106] PASTOR-SATORRAS, R.; CASTELLANO, C.; VAN MIEGHEM, P.; VESPIGNANI, A. **Epidemic processes in complex networks.** *Reviews of modern physics*, 87(3):925, 2015. 32, 36, 84
- [107] PASTOR-SATORRAS, R.; VESPIGNANI, A. **Epidemic spreading in scale-free networks.** *Physical review letters*, 86(14):3200, 2001. 22, 25, 84
- [108] PEREIRA, E. B. **Modelos baseados em indivíduos para análise e controle de epidemias em populações heterogêneas e metapopulações.** Master's thesis, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos, SP, 2008. 22, 26, 29, 30, 39, 55, 61, 70
- [109] PROSPER, O.; SAUCEDO, O. **Modeling control strategies for concurrent epidemics of seasonal and pandemic H1N1 influenza.** *Mathematical Biosciences and Engineering*, 8(1):141–170, 2011. 51, 60, 70
- [110] RAILSBACK, S. F.; GRIMM, V. **Agent-based and individual-based modeling: a practical introduction.** Princeton university press, 2019. 22
- [111] SABATER, J.; SIERRA, C. **Review on computational trust and reputation models.** *Artificial intelligence review*, 24(1):33–60, 2005. 21
- [112] SAMANTA, G. P. **Global dynamics of a nonautonomous sirc model for influenza a with distributed time delay.** *Differential Equations and Dynamical Systems*, 18:341–362, 2010. 24, 60, 70
- [113] SAQLAIN, M.; ALAM, M.; BRANDT, D.; RÖNNEGÅRD, L.; WESTIN, J. **Stochastic differential equations modelling of levodopa concentration in patients with**

- parkinson's disease.** In: *Em: The 40th Conference on Stochastic Processes and their Applications—SPA, Gothenburg*, 2018. 22
- [114] SATTENSPIEL, L.; DIETZ, K. **A structured epidemic model incorporating geographic mobility among regions.** *Mathematical Biosciences*, 128:71–91, 1995. 24, 60
- [115] SCHNEIDER, C. M.; MIHALJEV, T.; HAVLIN, S.; HERRMANN, H. J. **Suppressing epidemics with a limited amount of immunization units.** *Physical Review E*, 84(6):061911, 2011. 84, 88, 99
- [116] SCHNEIDER, C. M.; MIHALJEV, T.; HERRMANN, H. J. **Inverse targeting—an effective immunization strategy.** *EPL (Europhysics Letters)*, 98(4):46002, 2012. 32, 84, 88
- [117] SCHNEIDER, C. M.; MOREIRA, A. A.; ANDRADE, J. S.; HAVLIN, S.; HERRMANN, H. J. **Mitigation of malicious attacks on networks.** *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 108(10):3838–3841, 2011. 32, 84
- [118] SHAVITT, Y.; ZILBERMAN, N. **A geolocation databases study.** *Selected Areas in Communications, IEEE Journal on*, 29(10):2044–2056, 2011. 35
- [119] SONG, M.; MA, W.; TAKEUCHI, Y. **Permanence of a delayed sir epidemic model with density dependent birth rate.** *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 201:389–394, 2007. 47, 60
- [120] SOULARUE, J.-P.; THÖNI, A.; ARNOUX, L.; LE CORRE, V.; KREMER, A. **Metapop: An individual-based model for simulating the evolution of tree populations in spatially and temporally heterogeneous landscapes.** *Molecular ecology resources*, 19(1):296–305, 2019. 22
- [121] STPICZYNSKI, P.; POTIOPA, J. **Solving a kind of boundary-value problem for ordinary differential equations using fermi - the next generation cuda computing architecture.** *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 236:384–393, 2011. 43, 46
- [122] STROGATZ, S. H. **Exploring complex networks.** *nature*, 410(6825):268, 2001. 22
- [123] TAYLOR, S. J. **Modeling stochastic volatility: A review and comparative study.** *Mathematical finance*, 4(2):183–204, 1994. 21
- [124] TIAN, R.-Y.; ZHANG, X.-F.; LIU, Y.-J. **Ssic model: A multi-layer model for intervention of online rumors spreading.** *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 427:181–191, 2015. 36, 84

- [125] TONG, H.; PRAKASH, B. A.; TSOURAKAKIS, C.; ELIASSI-RAD, T.; FALOUTSOS, C.; CHAU, D. H. **On the vulnerability of large graphs.** In: *Data Mining (ICDM), 2010 IEEE 10th International Conference on*, p. 1091–1096. IEEE, 2010. 84
- [126] UCHMAŃSKI, J. **Cyclic outbreaks of forest insects: A two-dimensional individual-based model.** *Theoretical Population Biology*, 2019. 22
- [127] VELTEN, K. **Mathematical modeling and simulation: introduction for scientists and engineers.** John Wiley & Sons, 2009. 21
- [128] VERONESE, L. P.; KROHLING, R. A. **Differential evolution algorithm on the GPU with C-CUDA.** In: *In: IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC), Vitoria, ES*, volume 181, 2010. 47
- [129] VOLZ, E. **Sir dynamics in random networks with heterogeneous connectivity.** *Mathematical Biology*, 56:293–310, 2008. 24, 60
- [130] WANG, P.; GONZÁLEZ, M. C.; HIDALGO, C. A.; BARABÁSI, A.-L. **Understanding the spreading patterns of mobile phone viruses.** *Science*, 324(5930):1071–1076, 2009. 84
- [131] WANG, Y.; CAO, J.; ALOFI, A.; ABDULLAH, A.-M.; ELAIW, A. **Revisiting node-based sir models in complex networks with degree correlations.** *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 437:75–88, 2015. 32, 84
- [132] WEI, H.; JIANG, Y.; SONG, X.; SU, G. H.; QIU, S. Z. **Global attractivity and permanence of a sveir epidemic model with pulse vaccination and time delay.** *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 229:302–312, 2009. 47, 60
- [133] WICKWIRE, K. **Optimal isolation policies for deterministic and stochastic epidemics.** *Mathematical Biosciences*, 26:325–346, 1975. 60
- [134] WIKLE, N. B.; HANKS, E. M.; HUGHES, D. P. **A dynamic individual-based model for high-resolution ant interactions.** *Journal of Agricultural, Biological and Environmental Statistics*, p. 1–21, 2019. 22
- [135] WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Influenza (seasonal): Fact sheet n^o211.** <http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs211/en/>, 2009. [Online; acessado 13-maio-2013]. 51
- [136] WU, M.; LIYAWANG.; LI, M.; LONG, H. **An approach based on the sir epidemic model and a genetic algorithm for optimizing product feature combinations in feature fatigue analysis.** *Journal of Intelligent Manufacturing*, 2013. 24, 60

- [137] XIA, C.; WANG, L.; SUN, S.; JUANWANG. **An sir model with infection delay and propagation vector in complex networks.** *Nonlinear Dynamics*, 69:927–934, 2012. 60
- [138] XIA, L.-L.; JIANG, G.-P.; SONG, B.; SONG, Y.-R. **Rumor spreading model considering hesitating mechanism in complex social networks.** *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 437:295–303, 2015. 36, 84
- [139] YOSHIDA, N.; HARA, T. **Global stability of a delayed sir epidemic model with density dependent birth and death rates.** *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 201:339–347, 2007. 24, 47, 60
- [140] YUSUF, T. T.; BENYAH, F. **Optimal control of vaccination and treatment for an sir epidemiological model.** *World Journal of Modelling and Simulation*, 8(3):194–204, 2012. 60, 70
- [141] ZHANG, H.; YAO, Y. **An integrative vulnerability evaluation model to urban road complex network.** *Wireless Personal Communications*, p. 1–12, 2019. 22