

O que o modelo de um gás tem a ver com o novo coronavírus?

.....

Marcelo Augusto dos Reis¹# e Gabriel Henrique Batista²

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sul de Minas Gerais, Inconfidentes, MG, Brasil.

²Departamento de Física, Universidade Estadual Paulista, Rio Claro, SP, Brasil.

RESUMO

Este artigo visa problematizar a curva epidêmica da COVID-19 sob o ponto de vista das simulações computacionais de um gás bidimensional, com o intuito de ilustrar o alcance das teorias físicas em outras áreas do conhecimento. Particularmente, são discutidos alguns mecanismos de intervenção na dinâmica social que produzem o fenômeno largamente noticiado pela imprensa conhecido como "achatamento da curva", que corresponde à mudança na forma da curva que representa o número de infectados pelo vírus ao longo do tempo.

Palavras-chave: COVID-19; dinâmica molecular; dinâmica populacional; discos rígidos; epidemia

.....

1. Introdução

No final de dezembro de 2019, o mundo assistiu ao surto de uma nova doença que foi observada pela primeira vez em Wuhan, na China. A doença Covid-19 (Coronavirus Disease 2019), como ficou conhecida, é causada por um novo coronavírus (SARS-CoV-2) e espalhou-se rapidamente para outros países. Em 30 de janeiro de 2020, a Organização Mundial da Saúde (OMS) declarou o fato como emergência de saúde pública de interesse internacional [1]. A curva epidêmica - que contabiliza o número de casos de pessoas infectadas ao longo do tempo - mostra uma grande taxa crescente nos dias e semanas iniciais, seguida de um abrandamento gradual até atingir um pico [2]. Após o tempo necessário para atingi-lo, o número total de casos diminui gradativamente. No Brasil, o número de casos tem aumentado exponencialmente desde fevereiro de 2020, passando de 400.000 casos no dia 27 de maio. Ainda que o ritmo do aumento dos casos tenha diminuído quando comparado aos primeiros 30 dias da epidemia - pela comparação da inclinação da reta desse período com a dos últimos 47 dias registrados na Fig. 1, ao que parece, a curva ainda não atingiu o seu ápice.

Uma das principais preocupações das autoridades sanitárias é controlar a velocidade do alastramento da doença contagiosa, para que haja tempo suficiente para amparar as pessoas infectadas que necessitarem de atendimento hospitalar durante a epidemia. Portanto, estratégias para mitigar a curva,

abrandando e retardando seu pico, são discutidas pelos órgãos competentes.

Em 14 de março de 2020, o jornal *The Washington Post* publicou uma matéria [4] intitulada "Por que surtos como o coronavírus espalham-se exponencialmente e como achatam a curva?" (tradução livre), onde foi apresentado indiretamente o modelo físico de um gás e algumas simulações, na perspectiva de expor ao grande público a questão do "achatamento" de curvas epidemiológicas. O modelo epidemiológico utilizado pelo jornal - e neste trabalho - é da categoria dos modelos tipo SIR (do inglês, *Susceptible, Infectious, Recovered*) que surgiram na década de 1920 e republicados em 1991 [5-7].

Uma das principais preocupações das autoridades sanitárias é controlar a velocidade do alastramento da doença contagiosa, para que haja tempo suficiente para amparar as pessoas infectadas

Este momento *sui generis* da história tem motivado a comunidade científica internacional oriunda de diversas áreas ao estudo de modelos epidemiológicos. No caso da Sociedade Brasileira

de Física, há uma iniciativa de divulgação de trabalhos relacionados à Covid-19 realizados por físicos brasileiros [8]. Pesquisadores debruçam-se sobre o tema na tentativa de prever os picos da curva epidêmica ao redor do mundo, utilizando elementos de física estatística [9] ou sofisticando modelos baseados em SIR que incorporam confinamento, transmissão assintomática, quarentena e hospitalização, [10] por exemplo.

Uma vez que simuladores virtuais são muito empregados como recursos didáticos no ensino de física - pois sabe-se que podem contribuir significativamente para a aprendizagem dos conteúdos físicos [11] -, torna-se interessante abordar o tema da simulação de um gás [12] e relacioná-lo à pandemia do

#Autor de correspondência. E-mail: marcelo.reis@ifsuldeminas.edu.br.

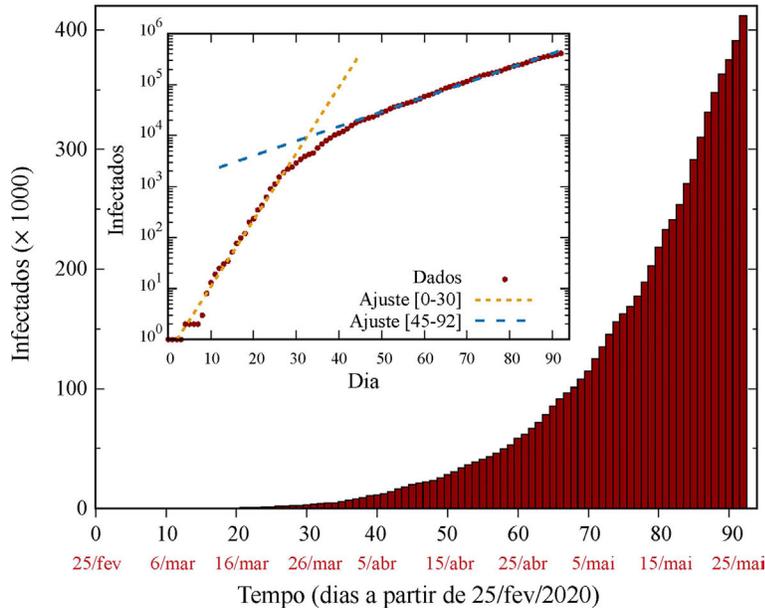


Figura 1 - Número de casos confirmados de Covid-19 no Brasil, dos quais 25.598 indivíduos foram a óbito. Fonte: Ministério da Saúde do Brasil [3]. No interior da figura, os dados são mostrados em escala logarítmica e ajustes exponenciais também são mostrados.

novo coronavírus.

Portanto, inspirado no trabalho do periódico norte-americano, este artigo visa problematizar a curva epidêmica da Covid-19 e apresentar de forma didática e qualitativa os princípios gerais da propagação de uma epidemia hipotética sob o ponto de vista das simulações computacionais de um gás bidimensional, com o intuito de ilustrar o alcance das teorias físicas em outras áreas do conhecimento.

2. Modelo

O modelo de gás empregado neste trabalho é baseado no trabalho pioneiro de Alder e Wainwright, [13, 14] nas décadas de 1950 e 1960, quando os primeiros resultados computacionais de simulação de dinâmica molecular foram publicados.

Embora nossa simulação tenha sido escrita em FORTRAN 90, encontra-se na Ref. [15] uma discussão pormenorizada acerca da implementação dos códigos computacionais, em Java, sobre a dinâmica de discos rígidos. Uma simulação interativa semelhante a esse modelo de gás também pode ser conferida na Ref. [16].

A “cidade” é modelada por três constituintes: as pessoas, a fronteira da cidade e, eventualmente, uma barreira geográfica. As partículas, no papel das pessoas, são tratadas como discos rígidos de massa m e diâmetro σ colidindo elasticamente entre si, com a fronteira

e, eventualmente, com a barreira geográfica central. Quando presente, essa barreira - modelada como uma partícula de grande massa - é tratada como um disco de diâmetro D e com velocidade nula. A fronteira da cidade é concebida como um conjunto de quatro anteparos ideais no papel de lados de tamanho L de uma caixa quadrada, situação na qual as pessoas, ao se chocarem com ela, são rebatidas com o mesmo ângulo, conforme ilustra a Fig. 2(a).

2.1. Determinação do instante de colisão

Embora a simulação preveja apenas “pessoas” de mesmos diâmetros circulando aleatoriamente pela cidade, o desenvolvimento a seguir é feito para duas partículas de diâmetros distintos σ_A e σ_B que colidirão segundo a geometria ilustrada na Fig. 2(b), para que a situação da colisão de uma partícula com a barreira central também seja contemplada nesse desenvolvimento.

O instante de colisão pode ser determinado após um intervalo de tempo transcorrido a partir de uma configuração inicial em que os dois discos estejam suficientemente afastados um do outro e que em certo instante t_p tenham coordenadas \mathbf{r}_A e \mathbf{r}_B , satisfazendo a condição:

$$|\mathbf{r}_A(t_p) - \mathbf{r}_B(t_p)| = \frac{1}{2}(\sigma_A + \sigma_B). \quad (1)$$

Uma vez que as forças do sistema são

atuantes apenas no instante de contato entre duas superfícies, decorre que não há nenhuma força externa aplicada a uma partícula ao longo de sua trajetória entre duas colisões sucessivas, de forma que o movimento de um disco é retilíneo e uniforme entre colisões. Logo, as equações horárias das partículas do instante inicial t_0 até o instante t_p de uma colisão são dadas por:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_A(t_p) &= \mathbf{r}_A(t_0) + \mathbf{V}_A t_p, \\ \mathbf{r}_B(t_p) &= \mathbf{r}_B(t_0) + \mathbf{V}_B t_p, \end{aligned} \quad (2)$$

onde \mathbf{V}_A e \mathbf{V}_B são as velocidades iniciais das partículas A e B, respectivamente.

Substituindo a Eq. (2) na Eq. (1), com $\sigma = \frac{1}{2}(\sigma_A + \sigma_B)$:

$$\begin{aligned} \sigma &= |\mathbf{r}_A(t_p) - \mathbf{r}_B(t_p)| \\ &= |(\mathbf{r}_A(t_0) - \mathbf{r}_B(t_0)) + (\mathbf{V}_A - \mathbf{V}_B)t_p| \\ &= |\Delta\mathbf{r} + \Delta\mathbf{V}t_p|, \end{aligned} \quad (3)$$

onde é definido $\Delta\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_A(t_0) - \mathbf{r}_B(t_0)$ e $\Delta\mathbf{V} \equiv \mathbf{V}_A - \mathbf{V}_B$.

Desenvolvendo a Eq. (3), obtém-se

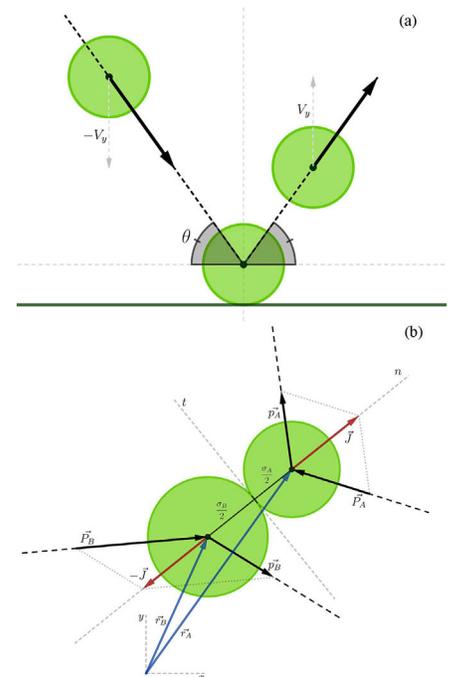


Figura 2 - Tipos de colisões no modelo: (a) partícula-parede e (b) partícula-partícula; nesse caso, uma partícula pode colidir com outra ou com a barreira geográfica central, que também possui o formato de um disco.

uma equação de segundo grau em t_p :

$$\begin{aligned} & ((\Delta V)^2)t_p^2 + (2\Delta\mathbf{r}\cdot\Delta\mathbf{V})t_p + (\Delta r)^2 - \sigma^2 \\ & = 0 \end{aligned} \quad (4)$$

cuja solução é

$$t_p = -\frac{\Delta\mathbf{r}\cdot\Delta\mathbf{V}}{(\Delta V)^2} \pm \frac{\sqrt{(\Delta\mathbf{r}\cdot\Delta\mathbf{V})^2 - (\Delta V)^2((\Delta r)^2 - \sigma^2)}}{(\Delta V)^2}. \quad (5)$$

A princípio, a Eq. (5) possui até duas soluções distintas. No contexto da simulação, apenas o menor valor positivo de t_p possui significado, que é o intervalo de tempo necessário para se observar a condição da Eq. (1) pela primeira vez.

Em relação à origem do sistema de coordenadas da caixa de simulação, os quatro anteparos que compõem a fronteira quadrada são representados pelas retas $y = 0$ e $y = L$ (anteparos horizontais) e $x = 0$ e $x = L$ (anteparos verticais). Desse modo, a partir da posição $\mathbf{r}_0 = x_0\hat{i} + y_0\hat{j}$ e velocidade $\mathbf{V}_0 = V_{x_0}\hat{i} + V_{y_0}\hat{j}$ iniciais de um disco, pode-se calcular o tempo de colisão com a caixa da seguinte forma:

$$\begin{cases} t_{w_1} = \frac{1}{V_{y_0}}\left(\frac{\sigma}{2} - y_0\right) & , \text{lado } y = 0. \\ t_{w_2} = \frac{1}{V_{y_0}}\left(L - y_0 - \frac{\sigma}{2}\right) & , \text{lado } y = L. \\ t_{w_3} = \frac{1}{V_{x_0}}\left(\frac{\sigma}{2} - x_0\right) & , \text{lado } x = 0. \\ t_{w_4} = \frac{1}{V_{x_0}}\left(L - x_0 - \frac{\sigma}{2}\right) & , \text{lado } x = L. \end{cases}$$

Desse modo, a determinação do tempo e do lado da caixa de simulação onde poderá ocorrer uma colisão de um disco com a fronteira é feita a partir do cálculo do menor valor entre os quatro calculados para cada anteparo que a compõem:

$$t_w = \min\{t_{w_1}, t_{w_2}, t_{w_3}, t_{w_4}\}. \quad (6)$$

A identificação do próximo evento de colisão pode ser determinada pela comparação entre t_p (Eq. (5): colisão com outra partícula) e t_w (Eq. (6): colisão com a fronteira). O menor valor entre t_p e t_w , além de fornecer o lapso temporal da simulação, também determina o tipo de alvo em que um disco rígido colidirá.

2.2. Cálculo das velocidades após uma colisão

Após a identificação do tipo de alvo e o cálculo do instante de tempo do próximo evento de colisão, torna-se fundamental a determinação do vetor velocidade das partículas envolvidas logo

após o choque.

A partir do teorema impulso-variação do momento linear, a grandeza impulso \mathbf{J} pode ser escrita como:

$$\mathbf{J} = \Delta\mathbf{p},$$

onde $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ é o momento linear de uma partícula de massa m e velocidade \mathbf{v} .

Denota-se por $\mathbf{P}_A = m_A\mathbf{V}_A$ o momento inicial do disco A e por $\mathbf{p}_A = m_A\mathbf{v}_A$ seu momento posterior a uma colisão com outro disco B .

Desse modo, a velocidade final \mathbf{v} é escrita em termos da velocidade inicial \mathbf{V} , para cada uma das duas partículas A e B envolvidas:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_A &= \mathbf{V}_A + \frac{1}{m_A}\mathbf{J}, \\ \mathbf{v}_B &= \mathbf{V}_B - \frac{1}{m_B}\mathbf{J}. \end{aligned} \quad (8)$$

Contudo, para que as Eqs. (8) sejam úteis do ponto de vista algorítmico na atualização das velocidades das partículas após um choque, deve-se expressar \mathbf{J} em termos das variáveis conhecidas antes da colisão entre os discos, isto é, as posições \mathbf{r}_A e \mathbf{r}_B , as velocidades \mathbf{V}_A e \mathbf{V}_B e as massas m_A e m_B .

O impulso \mathbf{J} pode ser decomposto ao longo do eixo \hat{n} “normal” - cuja direção é dada pela reta que interliga os centros dos discos A e B - e ao longo do eixo \hat{t} “tangencial”, perpendicular ao anterior e que é tangente às circunferências dos dois discos:

$$\mathbf{J} = (\mathbf{J}\cdot\hat{n})\hat{n} + (\mathbf{J}\cdot\hat{t})\hat{t}. \quad (9)$$

Entretanto, um modelo mais simples considera que as superfícies não apresentam rugosidade. Isso significa que, após uma colisão, um disco não adquire rotação em torno de seu próprio eixo por não sofrer um torque aplicado por uma força de atrito tangencial gerada pela colisão em outro disco, implicando que o termo $(\mathbf{J}\cdot\hat{t})\hat{t}$ da Eq. (9) é nulo. Portanto, o vetor \mathbf{J} encontra-se integralmente no eixo normal à colisão, conforme ilustrado na Fig. 2(b).

A partir dos termos

$$\begin{cases} \Delta\mathbf{V} \equiv \mathbf{V}_A - \mathbf{V}_B, \\ \Delta\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B, \\ \sigma \equiv \frac{1}{2}(\sigma_A + \sigma_B), \\ |\Delta\mathbf{r}| \equiv \sigma, \end{cases} \quad (10)$$

com o vetor unitário \hat{n} (ver Fig. 2) defi-

nido por

$$\hat{n} \equiv \frac{\Delta\mathbf{r}}{|\Delta\mathbf{r}|} = \frac{\Delta\mathbf{r}}{\sigma}, \quad (11)$$

e a partir das leis de conservação de momento linear e de energia cinética, pode-se chegar a uma expressão para o impulso:

$$\mathbf{J} = -\frac{2m_A m_B}{m_A + m_B} (\Delta\mathbf{V}\cdot\Delta\mathbf{r}) \frac{\Delta\mathbf{r}}{\sigma^2}. \quad (12)$$

A barreira é modelada como um disco rígido de diâmetro D , com seu centro coincidindo com o centro da caixa de simulação. Sua massa m_D é considerada muito maior que a de um disco, de forma que se pode considerar $m_D = m_B \gg m_A$ na Eq. (12).

Da mesma forma, os quatro anteparos que formam a caixa podem ser considerados alvos de massa infinitamente maior que a de um disco. Portanto, conclui-se que a colisão de uma partícula com uma parede plana resulta simplesmente na modificação do sinal da componente da velocidade perpendicular a ela.

2.3. Modelo epidemiológico baseado no modelo de um gás

Os discos representam a população de uma cidade e considera-se que apenas uma pessoa está infectada no instante inicial.

O fenômeno da epidemia é regido pelas seguintes regras:

- A transmissão ocorre quando uma pessoa (disco) infectada entra em contato (colide) com outra saudável.
- Após um certo tempo - escolhido de forma arbitrária mas igual para todos os indivíduos -, as pessoas recuperam-se da doença.
- Ao se recuperarem, as pessoas ficam imunes e, portanto, não são mais infectadas e também não infectam as demais.

3. Simulações

3.1. Parâmetros iniciais

Os parâmetros fundamentais do sistema são: número de discos rígidos (N), seu diâmetro (σ) e o tamanho do lado da caixa de simulação (L).

Antes de iniciar a simulação, é necessário construir uma configuração inicial de posições e velocidades dos discos no interior da caixa. As posições iniciais são arranjadas aleatoriamente em seu interior, impedindo-se a sobreposição entre partículas.

A fração da área da caixa ocupada

pelas partículas é dada por

$$\phi = \frac{N\pi\sigma^2}{4L^2}. \quad (13)$$

Logo, quando $\phi \ll 1$ o sistema pode ser considerado o gás ideal. Do contrário, à medida que o diâmetro σ dos discos torna-se mais importante quando comparado ao lado L da caixa, a equação de estado do sistema se desvia [14] da conhecida equação de Clapeyron, $PV = nRT$, ou, equivalentemente, $PV = Nk_B T$.

Para definir as velocidades iniciais do sistema de partículas em equilíbrio termodinâmico, a discussão recai na distribuição de velocidades $f(v)$ de Maxwell-Boltzmann, que nesse caso é bidimensional [12, 19]:

$$f(v) = \frac{m}{k_B T} v e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}}. \quad (14)$$

A velocidade mais provável v_p é encontrada fazendo-se $\frac{df(v_p)}{dv} = 0$, resultando em:

$$v_p = \sqrt{\frac{k_B T}{m}}, \quad (15)$$

o que permite reescrever a Eq. (14) como

$$f(v) = \frac{v}{v_p^2} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{v}{v_p}\right)^2}. \quad (16)$$

A distribuição de velocidades para cada componente é dada por

$$f(v_{x,y}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi v_p^2}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{v_{x,y}}{v_p}\right)^2}, \quad (17)$$

que é uma distribuição gaussiana com média zero e variância v_p^2 .

3.1.1. Algoritmo de Box-Muller

No processo de atribuição de valores às velocidades iniciais dos discos, assume-se a distribuição de Maxwell-Boltzmann para um gás em equilíbrio a uma temperatura T , amostrada a partir da velocidade mais provável v_p desejada, que atua como mais um parâmetro do modelo. Portanto, escolher arbitrariamente um valor de v_p é equivalente a simular o sistema em uma temperatura T específica, uma vez que v_p é proporcional a T , pela Eq. (15).

A estratégia da construção do conjunto de velocidades iniciais $\{\mathbf{v}\}$ vale-se do algoritmo de Box-Muller [20, 21], que consiste inicialmente na obtenção da variável aleatória ξ oriunda de uma distribuição gaussiana com média nula e variância unitária gerada a partir de números randômicos amostrados uni-

formemente no intervalo $[0,1]$. Posteriormente, as componentes iniciais de \mathbf{v} de um disco são obtidas fazendo-se $v_{x,y} = \xi v_p$.

3.2. Dinâmica guiada por eventos

Diferentemente do que ocorre, por exemplo, em simulações de dinâmica molecular de sistemas Lennard-Jones [15, 21], onde o tempo progride em intervalos dt regulares e suficientemente pequenos, os sistemas formados por discos rígidos são guiados por intervalos de tempo irregulares determinados pelos eventos de colisão. Isso ocorre por não haver um potencial de interação de longa distância entre as partículas, propiciando um movimento retilíneo e uniforme entre sucessivos choques.

O esquema geral da simulação de discos rígidos pode ser resumido pelos seguintes passos:

1. Determinar o intervalo de tempo para a próxima colisão ocorrer.
2. Mover todas as partículas de acordo com as equações do movimento retilíneo e uniforme de acordo com o intervalo de tempo determinado no passo anterior.
3. Atualizar as velocidades das partículas envolvidas na colisão.
4. Calcular as propriedades de interesse.
5. Retornar ao passo 1 enquanto o número máximo de colisões permitido

não é atingido.

4. Resultados

O primeiro teste do modelo consiste na observação do comportamento da curva de infectados ao longo do tempo quando apenas uma única pessoa infectada está presente no instante inicial entre $N = 300$ pessoas, todas com $\sigma = 10$ e $m = 1$ situadas em uma cidade de lado $L = 600$. Todas as grandezas estão em unidades arbitrárias [u.a.].

Inicialmente, procurou-se compreender como diferentes valores de v_p afetam a propagação da hipotética epidemia. A Fig. 3 mostra que, conforme v_p aumenta, mais rapidamente a população é infectada. Como esse parâmetro é diretamente proporcional à temperatura do gás, é compreensível que quanto maior o grau de agitação térmica, menor é o tempo gasto entre colisões sucessivas e, conseqüentemente, maior é a taxa de transmissão do vírus, fato também observado na figura, indicado pela curva do tempo livre médio entre colisões em função de v_p .

Embora nesse resultado tenha sido considerado um tempo de incubação suficientemente longo e, por isso, nenhuma pessoa se torne imune no tempo registrado da simulação, nota-se que o crescimento do número de casos de pessoas infectadas ajusta-se a uma curva sigmóide em todos os casos analisa-

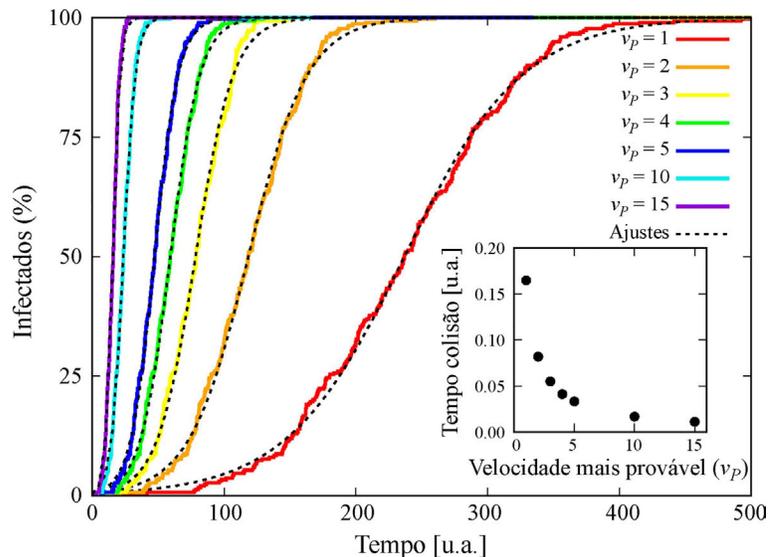


Figura 3 - Simulaes da propagao do vrus em uma populao a partir de distribuies de velocidades amostradas pelo parmetro v_p - a velocidade mais provvel. A figura interna mostra o tempo livre mdio entre colises partcula-partcula em funo desse parmetro. Todas as simulaes consideram tempo infinito de incubaco do vrus e, portanto, as funes "infectados vs. tempo", $I(t)$, so estritamente crescentes. Os ajustes foram tomados por funes tipo sigmides na forma $I(t) = 100/[1 + e^{-b(t-a)}]$, com parmetros livres a e b .

dos, sugerindo que v_p apenas se relaciona com a escala temporal da transmissão do vírus e não influencia o perfil qualitativo da curva de contágio.

O tempo de incubação do vírus em um indivíduo é assumido como mais um parâmetro livre. Daqui em diante, as demais simulações admitem que o tempo de incubação, escolhido arbitrariamente, é igual ao tempo necessário para que toda a população esteja infectada simultaneamente.

Definido o tempo de incubação do vírus, a Fig. 4 mostra o que ocorre quando as “pessoas” se locomovem livremente e apenas uma delas está infectada inicialmente. Conforme a simulação avança e as colisões entre partículas ocorrem, verifica-se que o número de casos de pessoas infectadas aumenta até alcançar um pico. Nesse exemplo, o intervalo de tempo compreendido do início da epidemia até o instante em que se observa seu único pico, corresponde ao intervalo de tempo em que uma pessoa, uma vez infectada com o vírus, está apta a retransmiti-lo a partir do início de seu próprio contágio. A curva é aproximadamente simétrica, de aspecto qualitativamente semelhante a uma curva gaussiana, muito conhecida pelos epidemiologistas.

3.3. Influência da aglomeração de pessoas

Profissionais da saúde têm alertado para as pessoas evitarem aglomerações e o contato físico mais próximo com outros indivíduos. Isso porque o vírus é transmitido mais frequentemente pelo ar ou por contato pessoal com secreções contaminadas. Diante disso, as grandes aglomerações de pessoas representam uma situação de risco, devido à facilidade de transmissão do vírus nessas condições.

Para investigar essa premissa, três situações foram simuladas, cada uma representando um nível de aglomeração diferente. Cada nível é representado pela fração ϕ , dada pela Eq. (13), que corresponde à razão entre a área ocupada e a área livre da caixa. Para que a taxa de transmissão da doença - associada ao tempo livre médio τ - esteja apenas relacionada à fração ϕ correspondente, utilizou-se a mesma distribuição de velocidades inicial para os três casos. Dessa forma, todas as simulações estão virtualmente na mesma temperatura e possuem a mesma velocidade quadrática média v_{RMS} . Assim, o tempo livre médio ($\tau = \lambda/v_{RMS}$) nas três simulações estudadas é função apenas do livre cami-

nho médio λ que, por sua vez, é função de ϕ [19]. Além disso, fixou-se o número de partículas N , o diâmetro σ e variou-se o lado L da caixa de simulação para atingir um valor de ϕ desejado. O tempo de incubação do vírus em cada indivíduo foi definido como o tempo em que a simulação, cuja fração é ϕ_0 , atinge seu máximo. Os resultados são mostrados na Fig. 5.

À medida que o livre caminho médio das pessoas se torna menor, conforme a aglomeração se intensifica, o contato mais frequente entre os indivíduos favorece a propagação do vírus. Do ponto de vista do modelo de gás, isso está diretamente relacionado a um menor tempo livre médio τ entre as colisões. Isso explica o surgimento precoce do máximo percentual de infectados para a aglomeração mais severa (ϕ_0), em relação ao caso de uma aglomeração mais branda, de um oitavo da inicial ($\phi_0/8$), cujo máximo é atingido mais tarde. O fenômeno do adiamento desse pico caracteriza o que as autoridades sanitárias denominam de “achatamento da curva”.

3.4. Influência de barreira geográfica

Um mecanismo proposto para o “achatamento da curva” é limitar espacialmente a mobilidade dos indivíduos. Essa ação tem sido observada em várias cidades do país e do mundo onde o governante proíbe a população de circular, por exemplo, em shoppings e praças públicas, não sendo, portanto, uma medida tão restritiva quanto o “lock-down”, que é o termo utilizado para o protocolo emergencial que proíbe a livre circulação da população.

Na tentativa de mimetizar esse tipo de mecanismo, criou-se uma situação hipotética em que uma região circular no centro da caixa de simulação faz o papel de “área proibida” no interior da cidade. As partículas, ao colidirem com a barreira, seguem as mesmas regras de conservação de momento linear e energia de qualquer outra colisão no interior da caixa.

Além de as simulações serem inicializadas a partir da mesma distribuição de velocidades e possuírem o mesmo valor de v_{RMS} , como discutido anteriormente, também se utiliza a mesma densidade populacional em todas as simulações. Ainda que barreiras de grandes diâmetros aparentemente aumentem a aglomeração das pessoas, é possível ajustar os parâmetros geométricos

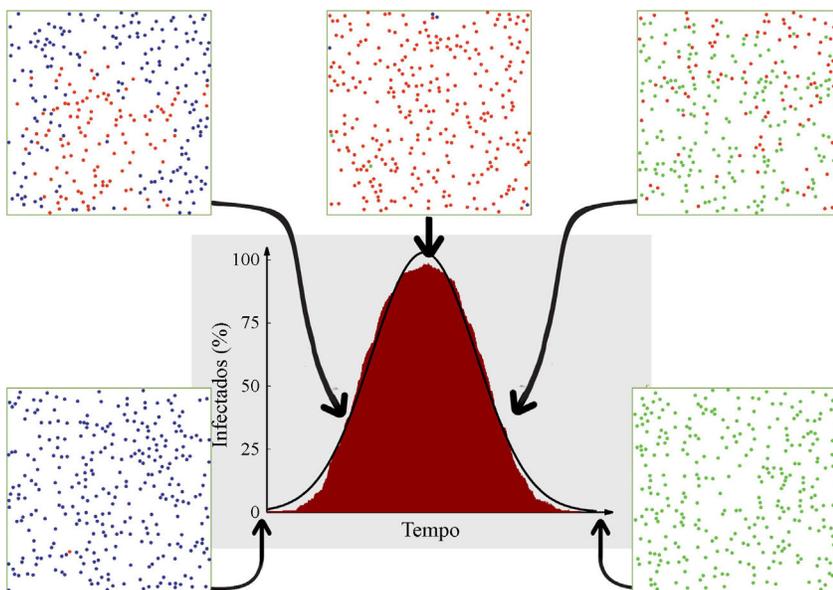


Figura 4 - Número de pessoas infectadas ao longo do tempo durante uma epidemia. Os “discos azuis” representam pessoas saudáveis, os “vermelhos” representam pessoas infectadas e os “verdes” representam as pessoas recuperadas e imunes. O estado populacional é registrado nos instantes 0%, 25%, 50%, 75% e 100% do intervalo de tempo total da simulação. O tempo de incubação do vírus em um indivíduo - um parâmetro livre da simulação - foi escolhido arbitrariamente como o tempo necessário para que toda a população seja infectada simultaneamente. O ajuste gaussiano (curva sólida) sobre a distribuição de infectados ilustra que ambas as distribuições são qualitativamente semelhantes.

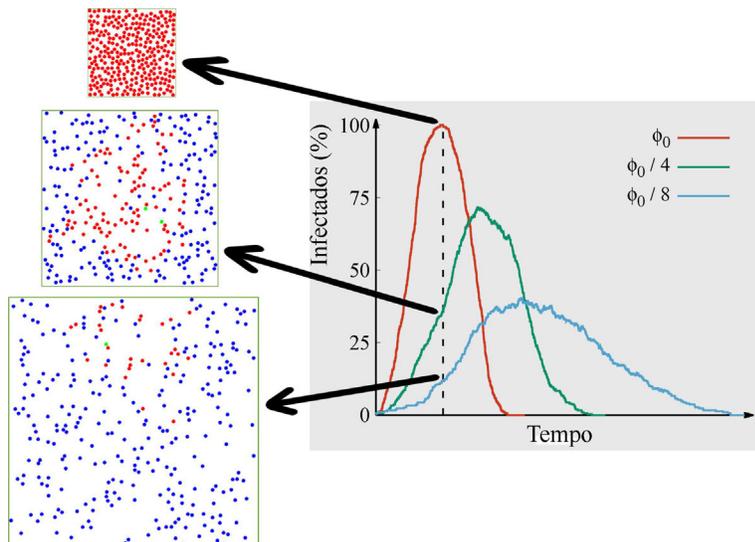


Figura 5 - Número de pessoas infectadas ao longo do tempo para três níveis de aglomeração. A linha vertical tracejada indica o instante em que a maior aglomeração de pessoas, representada pela fração ϕ_0 , registra 100% de pessoas infectadas simultaneamente. As caixas de simulação ilustram o estado populacional nesse mesmo instante para as demais aglomerações.

para que a densidade média seja a mesma, conforme discutido a seguir.

O parâmetro que controla o tamanho relativo da barreira é

$$\alpha = \frac{D}{L}, \quad (18)$$

onde D é o seu diâmetro e L é o novo lado da caixa de simulação a ser definido para que se mantenha a densidade de pessoas na área de livre circulação da cidade. Logo, para contornar o efeito indesejado do aumento da densidade em função do aumento do diâmetro da barreira, escolhe-se primeiramente o valor de α e os parâmetros D e L são ajustados para que N partículas de diâmetro σ ocupem a mesma fração da área da caixa de simulação que ocupariam na situação sem a barreira. Isso pode ser feito igualando a fração ϕ' , dada pela equação

$$\phi' = \frac{\frac{N\pi\sigma^2}{4}}{L'^2 - \pi\frac{D^2}{4}}, \quad (19)$$

à fração de referência, que é a situação sem a barreira geográfica.

A partir das Eqs. (13), (18) e (19), resolve-se para L' :

$$L' = \frac{L}{\sqrt{1 - \pi\left(\frac{\alpha}{2}\right)^2}}. \quad (20)$$

Assim, ainda que se adicione uma grande barreira no interior da caixa de simulação, seu lado é ajustado para um valor maior tal que a área da barreira

central não altera a fração de ocupação das partículas no espaço disponível.

A Fig. 6 mostra como esse tipo de barreira com diferentes diâmetros afeta a evolução do índice de indivíduos infectados ao longo do tempo, fazendo “achatar” a curva.

Tanto o livre caminho médio quanto o tempo livre médio para todos os va-

lores de α estudados fornecem, ao menos aproximadamente, o mesmo valor para todas as simulações, já que essas propriedades são funções da densidade ou da densidade e da temperatura, respectivamente. Por outro lado, a introdução de uma barreira geográfica cria uma anisotropia no sistema, fazendo com que grupos de partículas permaneçam por mais tempo confinados em algum dos quatro cantos da caixa, principalmente quando $\alpha = 1$. No limite, quando a barreira é grande o suficiente e o parâmetro α tende a $\left[1 + 2\left(\frac{\alpha}{2}\right)^2\right]^{-1}$, a dimensão dos canais de passagem entre os cantos coincide com a dimensão dos discos, impedindo o contato entre as partículas localizadas em regiões diametralmente opostas. Nesse caso, o fenômeno seria análogo ao que ocorreria se um grupo de pessoas ficasse em uma quarentena idealizada, sem contato com o mundo exterior.

Esse efeito anisotrópico, curiosamente, é observado quando a barreira possui diâmetro relativamente grande de 95% da aresta da caixa ($\alpha = 0,95$). Nesse caso, apenas os indivíduos ao redor da única pessoa infectada inicialmente são contaminados em um primeiro momento. Posteriormente, devido ao deslocamento de alguns indivíduos pela estreita passagem entre a barreira e a caixa, verifica-se o surgimento de mais duas frações da população infectadas si-

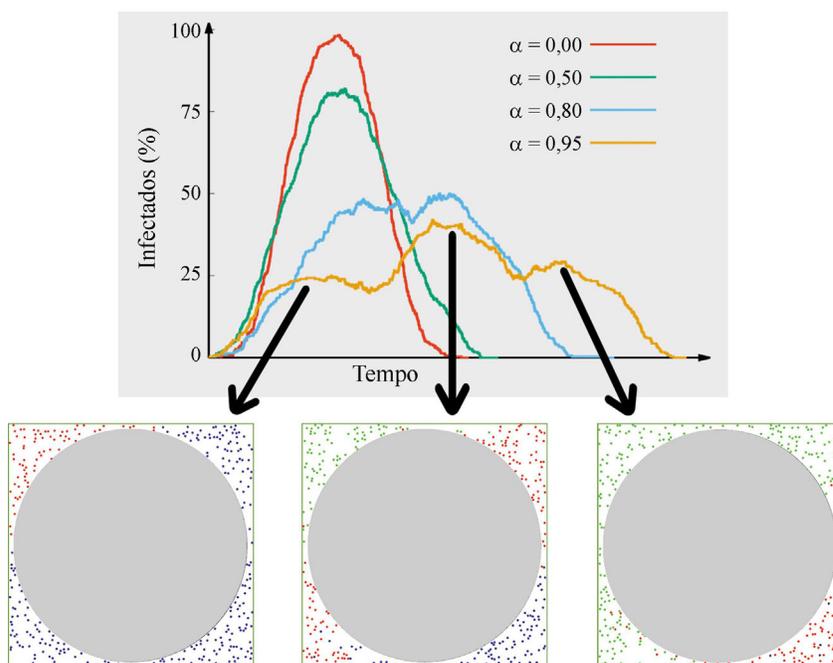


Figura 6 - Influência de uma barreira geográfica circular no número de casos de pessoas infectadas ao longo do tempo. O parâmetro $\alpha = \frac{D}{L}$ é a razão entre o diâmetro da barreira D e o lado L da caixa de simulação. Três instantes do estado populacional são ilustrados para o caso $\alpha = 0,95$.

multaneamente, enquanto a primeira se torna imune. Por fim, a última parcela, que representa 25% da população, é contaminada enquanto os demais já se encontram recuperados. Esse mecanismo ilustra qualitativamente o que poderia acontecer quando diferentes regiões, ainda que em regime de “lockdown”, permitissem um pequeno fluxo de indivíduos entre elas.

3.5. Influência do isolamento social

Outro mecanismo proposto para a doença se propagar mais lentamente é instituir o isolamento social. Em tese, as pessoas trabalhariam em suas residências via internet, sem o contato direto com pessoas externas, e sairiam apenas para adquirir produtos alimentícios ou farmacêuticos.

Como há diversas situações e profissões que exigem mobilidade mesmo em um quadro de pandemia como o atual, uma parcela da população continua circulando livremente enquanto outra fica isolada.

Para abordar essa situação computacionalmente, considera-se isolado o indivíduo imóvel, isto é, atribui-se a ele velocidade nula ao longo de toda a simulação. Todavia, esse tipo de indivíduo pode ter contato com os indivíduos móveis, podendo contrair a doença dessa forma, o que seria o caso, por exemplo, do contato com entregadores ou visitas eventuais de parentes e amigos infectados.

A física da colisão também é respeitada nessa nova situação, isto é, se uma partícula colide com outra imóvel, apenas a móvel tem seu estado de movimento alterado, mudando sua trajetória em certo ângulo determinado pela conservação do momento linear e energia.

A Fig. 7 mostra uma comparação da curva de casos quando uma fração da população está imóvel em relação a

uma simulação com livre circulação de pessoas.

Para compreender esse mecanismo de achatamento da curva, basta perceber que, mesmo que todos os indivíduos móveis estivessem infectados no início da simulação, a única forma de propagação do surto seria uma pessoa infectada com mobilidade ir de encontro a outra saudável sem mobilidade. A depender da fração das partículas móveis, a diminuição da chance de uma pessoa saudável contrair a doença é esperada, já que, de início, a maioria da população saudável está imóvel nas simulações apresentadas, o que aumenta o tempo livre médio entre as colisões, ocasionando uma diminuição da velocidade de propagação da epidemia.

Nas simulações, um protocolo mais severo, porém mais efetivo, de neutralizar a propagação da epidemia reside na associação de mais de um mecanismo de intervenção na dinâmica populacional. A Fig. 7 também mostra o que ocorre quando se combinam isolamento social e barreira geográfica, situação denominada aqui de *lockdown*. A partir da escolha arbitrária dos parâmetros da simulação, observa-se que se a cidade hipotética conseguisse atender 15% da população doente simultaneamente, não haveria problema de sobrecarga no sistema de saúde, nesse exemplo específico de *lockdown*.

Ainda que todos os indivíduos fossem contaminados durante a epidemia, é possível que a rotatividade nos leitos hospitalares seja praticável devido à diminuição da demanda dos doentes ao longo do tempo, poupando

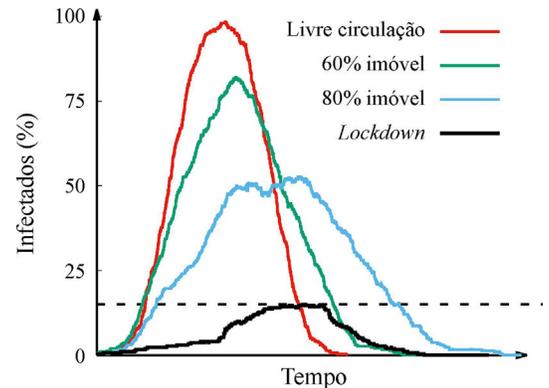


Figura 7 - Comparação do número de pessoas infectadas ao longo do tempo quando há livre circulação de pessoas em relação ao isolamento ou imobilidade de 60% e 80% da população. Uma animação correspondente pode ser vista na Ref. [22]. O protocolo de *lockdown* é artificialmente simulado combinando 80% de indivíduos imóveis com uma barreira geográfica com $\alpha = 0,95$. A linha horizontal tracejada mostra a capacidade hipotética da cidade em atender 15% da população simultaneamente em leitos hospitalares.

um número maior de vidas devido ao pico da distribuição não ultrapassar a capacidade de atendimento médico necessário aos infectados.

4. Conclusão

Aspectos qualitativos do conceito de “achatamento” da curva epidêmica da Covid-19 foram discutidos a partir de um modelo didático baseado na teoria cinética dos gases, considerando os efeitos devido à densidade, à introdução de barreira circular e à mobilidade das partículas.

O modelo de um gás apresenta-se como uma ótima oportunidade na abordagem elementar dos modelos epidemiológicos e esperamos que este trabalho sirva como uma fonte de inspiração à comunidade de professores e estudantes de física na busca de novas analogias e modelos com o mesmo propósito.

Agradecimentos

Os autores agradecem aos membros do Grupo de Estudos em Modelagem Computacional e Aplicações (GEMCA) pelas discussões e sugestões.

Referências

- [1] J. Croda, W.K. de Oliveira, R.L. Frutuoso, L.H. Mandetta, D.C. Baia-da-Silva, e cols., Rev. Soc. Bras. Med. Trop., **53**, e20200167 (2020).
- [2] D.A.M. Villela, Rev. Soc. Bras. Med. Trop., **53**, e20200135 (2020).
- [3] <https://covid.saude.gov.br>, acesso em 27 maio 2020.
- [4] <https://www.washingtonpost.com/graphics/2020/world/corona-simulator/>, acesso em 27 maio 2020.
- [5] W.O. Kermack e A.G. McKendrick, Bulletin of Mathematical Biology **53**, 33 (1991).
- [6] W.O. Kermack e A.G. McKendrick, Bulletin of Mathematical Biology **53**, 57 (1991).
- [7] W.O. Kermack e A.G. McKendrick, Bulletin of Mathematical Biology **53**, 89 (1991).

- [8] <http://www.sbfisica.org.br/v1/home/index.php/pt/acontece/1068-divulgacao-de-iniciativas-de-fisicos-brasileiros-na-pesquisa-e-enfrentamento-da-covid-19>, acesso em 27 maio 2020.
- [9] C. Tsallis, U. Tirnakli, *Front. Phys.*, **8**, 217 (2020).
- [10] W. Lyra, J.D. Nascimento, J. Belkhiria, L. Almeida, P.P. Chrispim, e cols., medRxiv <https://www.medrxiv.org/content/early/2020/04/21/2020.04.09.20060053> (2020).
- [11] A.R. Arantes, M.S. Miranda, N. Studart, *A Física na Escola*, **11(1)**, 27 (2010).
- [12] L.F. Medeiros, A. Crovador, H.P. da Silva, *Caderno Brasileiro de Ensino de Física*, **35**, 573 (2018).
- [13] B.J. Alder, T.E. Wainwright, *J. Chem. Phys.*, **27**, 1208 (1957).
- [14] B.J. Alder, W.G. Hoover, D.A. Young, *J. Chem. Phys.*, **49**, 3688 (1968).
- [15] H. Gold, J. Tobochnik, W. Christian, *An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems* (Addison-Wesley, Boston, 2006), 3ª ed.
- [16] PhET (Physics Education Technology Project) disponível em https://phet.colorado.edu/sims/html/gas-properties/latest/gas-properties_pt_BR.html, acesso em 27 maio 2020.
- [17] H.M. Nussenzveig, *Curso de Física Básica 1* (Blucher, São Paulo, 2014).
- [18] H.M. Nussenzveig, *Curso de Física Básica 2* (Blucher, São Paulo, 2014).
- [19] A. Taloni, Y. Meroz, A. Huerta, *Physical Review E*, **92**, 022131(2015).
- [20] G.E.P. Box, M.E. Muller, *Ann. math. Stat.*, **29**, 610 (1958).
- [21] M.P. Allen, D.J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Clarendon Press, Oxford, 1996).
- [22] <https://youtu.be/KuWjc-YN72Q>, acesso em 12 abril 2020.