

15º Congresso de Inovação, Ciência e Tecnologia do IFSP - 2024

Distribuição ótima de vacinas entre populações: aplicação do método de otimização *Simulated Annealing* a um modelo epidêmico compartimental do tipo suscetível-infeccioso-recuperado

Victoria de O. Spagiari¹, Guilherme S. da Silveira², Mayara G. de Estefani³, Olavo H. Menin⁴

¹Graduanda em Engenharia Elétrica no IFSP, Campus Sertãozinho, Bolsista PIBIFSP, victoria.spagiari@aluno.ifsp.edu.br.

²Graduando em Engenharia Elétrica no IFSP, Campus Sertãozinho, silveira.s@aluno.ifsp.edu.br.

³Graduanda em Engenharia Elétrica no IFSP, Campus Sertãozinho, mayara.estefani@aluno.ifsp.edu.br.

⁴Professor Doutor do IFSP, Campus Sertãozinho, olavohmenin@ifsp.edu.br.

Área de conhecimento (Tabela CNPq): 1.03.02.02-6 (Modelos analíticos e de simulação).

RESUMO: Com o surgimento da vacina para a COVID-19, surgiram também novos problemas administrativos, relacionados principalmente a distribuição ótima das doses disponíveis que resultassem na máxima imunização das populações e, conseqüentemente, na minimização do número de infectados. É em casos como esse que modelos matemáticos e simulações computacionais se mostram de grande ajuda, uma vez permitem explorar diferentes cenários, cujos resultados servem como guia para as autoridades tomadoras de decisões. O presente trabalho tem como finalidade encontrar a distribuição ótima de vacinas entre várias populações de forma a minimizar o número total de infectados. Para isso utilizou-se o método de otimização estocástico *Simulated Annealing* combinado a um modelo compartimental de metapopulação do tipo SIR (suscetível-infeccioso-recuperado). Em geral, os resultados obtidos indicam que a melhor estratégia é distribuir as doses igualmente entre as populações.

PALAVRAS-CHAVE: Modelos Estocásticos; Simulação computacional; Modelagem Epidêmica; Equações Diferenciais; Otimização; Vacinação.

Optimal distribution of vaccines among populations: Application of the *Simulated Annealing* optimization method to a susceptible-infectious-recovered compartmental epidemic model

ABSTRACT: With the arrival of the COVID-19 vaccine, new administrative challenges arose, particularly concerning the optimal allocation of available doses to achieve maximum immunization across populations, thereby reducing the number of infections. In such cases, mathematical models and computational simulations prove to be valuable tools, as they allow for the exploration of different scenarios, with the results serving as a guide for decision-making authorities. The present study aims to find the optimal vaccine distribution among several populations that minimizes the total number of infected individuals. To achieve this, the stochastic optimization method known as Simulated Annealing was used in conjunction with a SIR (susceptible-infectious-recovered) metapopulation compartmental

model. Overall the results obtained indicate that the best strategy is to distribute the doses equally among the populations.

KEYWORDS: Stochastic Models; Computational Simulation; Epidemic Modeling; Differential Equations; Optimization; Vaccination.

INTRODUÇÃO

Com o primeiro caso registrado em dezembro de 2019, na China, a pandemia de COVID-19, foi combatida durante meses apenas por meio de intervenções não-farmacêuticas (KRAEMER et al., 2020). No final de 2020, quando as primeiras vacinas contra a COVID-19 começaram a surgir (MCKEEVER, 2020), os tomadores de decisão passaram a enfrentar um novo problema: encontrar estratégias otimizadas de distribuição das doses disponíveis de forma a maximizar a imunização. Diante de problemas como esse, modelos matemáticos têm se mostrado de grande ajuda, uma vez que permitem a realização de simulações para explorar diferentes cenários (STANDAERT; CURRAN; POSTMA, 2014; SILVA; MENIN, 2021) que orientam na tomada de decisões.

A proposta deste trabalho é investigar como a distribuição de doses de vacinas entre várias populações afetam a evolução de uma epidemia. Mais especificamente, o objetivo é encontrar a distribuição ótima de vacinas de forma a minimizar o número total de infectados. Para isso, aplicamos o método de otimização estocástico *Simulated Annealing* (Kirkpatrick; Jr; Vecchi, 1983) a um modelo compartimental do tipo SIR (suscetível-infeccioso-recuperado) com várias populações. Os resultados obtidos apontam que a distribuição igualitária de vacinas entre as populações é a melhor estratégia para minimizar o número total de infectados.

METODOLOGIA

Inicialmente foi realizada uma revisão bibliográfica sobre tópicos de equações diferenciais (Boyce; DiPrima, 2010), métodos numéricos (Chapra; Canale, 2016) e modelos epidêmicos (Keeling; Rohani, 2011), com foco centrado no modelo SIR. Durante o estudo desse ultimo tema, realizou-se a retomada de trabalhos antecessores ao presente projeto (Estefani; Menin, 2023). Paralelamente, foram realizados estudos sobre o método de otimização *Simulated Annealing* (Menin; Martinez; Rolnik, 2016), bem como a implementação deste e do modelo epidêmico SIR para metapopulações em linguagem *Python*.

O modelo compartimental SIR estudado aqui corresponde a uma extensão para várias populações do clássico modelo SIR para uma população (Kermack; McKendrick, 1927), o qual classifica os indivíduos em três estados epidêmicos (compartimentos): suscetíveis (S), infecciosos (I) e recuperados (R). Desta forma, considere S_i , I_i e R_i como sendo, respectivamente, os números de indivíduos suscetíveis, infecciosos e recuperados da população i , com $i = 1, 2, \dots, m$, e $N_i = S_i + I_i + R_i$ o tamanho dessa população. Desconsiderando demografia, os compartimentos e as transições entre eles são mostrados na Fig. (1) e o modelo matemático que rege as transições é dado pelo sistema de equações diferenciais

$$\frac{dS_i}{dt} = -\frac{S_i \left(\sum_{j=1}^n \beta_{ij} I_j \right)}{N_i} - \rho_i S_i, \quad (1)$$

$$\frac{dI_i}{dt} = \frac{S_i \left(\sum_{j=1}^n \beta_{ij} I_j \right)}{N_i} - \gamma_i I_i, \quad (2)$$

$$\frac{dR_i}{dt} = \gamma_i I_i + \rho_i S_i, \quad (3)$$

onde β_{ij} é a taxa de transmissão entre as populações i e j ($i = j$ indica infecção entre suscetíveis e infecciosos da mesma população) e γ_i taxa de recuperação da população i , dada pelo inverso do período infeccioso. A vacinação é representada pela transição direta do compartimento S para o compartimento R, ocorrendo com uma taxa ρ_i para a população i , sendo $\rho_1 + \dots + \rho_m = 1$ a taxa total máxima de vacinação possível considerando todas as populações. Considerando que o modelo não admite solução analítica, sua resolução é realizada por meio de métodos numéricos (Chapra; Canale, 2016).

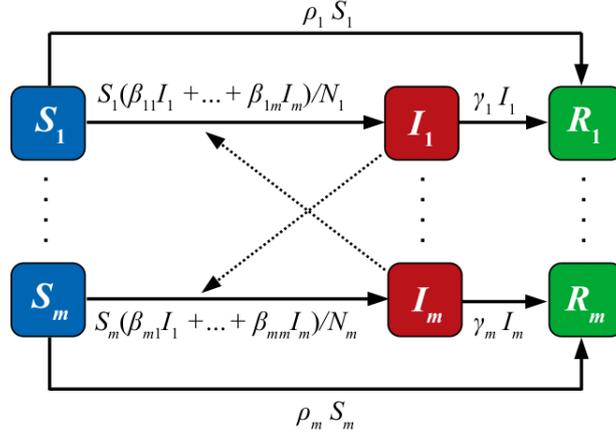


Figura 1: Diagrama do modelo compartimental SIR (suscetível-infeccioso-recuperado) com m populações e vacinação.

O método de otimização estocástico *Simulated Annealing*, utilizado aqui para encontrar a distribuição ótima das doses, faz analogia ao processo de recozimento da metalurgia, no qual busca-se minimizar a energia dos átomos de um sólido por meio do resfriamento gradual de sua temperatura. No nosso problema, devemos minimizar uma função objetivo $f(\mathbf{x})$, que representa o número total de infectados, sendo $\mathbf{x} = (\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_m)$ o vetor contendo as taxas de vacinação de cada população. Partindo de uma solução arbitrária, gera-se novas soluções, \mathbf{x}_{new} , com base na solução atual, \mathbf{x}_{old} , utilizando-se o critério de visitação $\mathbf{x}_{\text{new}} = \mathbf{x}_{\text{old}} + \sigma\xi$, onde ξ é um vetor de números aleatórios que seguem a distribuição normal e σ um parâmetro que controla a amplitude da visitação. A nova solução é, então, aceita com probabilidade

$$p(\mathbf{x}_{\text{old}} \leftarrow \mathbf{x}_{\text{new}}) = \begin{cases} 1, & \text{se } \Delta f \leq 0, \\ e^{-\Delta f/T}, & \text{se } \Delta f > 0, \end{cases} \quad (4)$$

onde $\Delta f = f(\mathbf{x}_{\text{new}}) - f(\mathbf{x}_{\text{old}})$ é a variação da função objetivo e T é a temperatura, que representa um parâmetro de controle da estocasticidade. Por fim, o processo de resfriamento da temperatura segue o decaimento exponencial com a iteração τ , ou seja, $T = \lambda^\tau T_0$, onde T_0 é a temperatura inicial (iteração $\tau = 0$) e $\lambda \in (0, 1)$ é a taxa de resfriamento.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Utilizando como base os códigos desenvolvidos em *Matlab* no projeto anterior (Estefani; Menin, 2023), criou-se duas funções em linguagem *Python*, uma para escrever o sistema de equações a ser resolvido (Cód. 1) e outra para escrever a função a ser resolvida pelo método numérico (Cód. 2). Dessa forma o próprio código seria responsável pela sua escrita (Thomas; Hunt, 2019).

Apesar de os códigos criados aceitarem um número arbitrário de populações, escolhemos trabalhar, inicialmente, com cinco, sujeitas a uma epidemia ocorrendo no intervalo entre $t = 0$ e $t = 100$ dias. Em um primeiro cenário, consideramos todas as populações com mesmo tamanho e parâmetros epidêmicos

idênticos, como mostra a Tabela 1.

Tabela 1: Parâmetros utilizados para as simulações do modelo SIR com cinco populações, considerando o cenário inicial no qual as populações são idênticas.

Parâmetro	Descrição
$N_i = 100\,000$	Tamanho da população i
$\beta_{ii} = 0,5 \text{ dia}^{-1}$	Taxa de transmissão entre susceptíveis e infecciosos da população i
$\beta_{ij} = 0,1 \text{ dia}^{-1}$	Taxa de transmissão entre susceptíveis da população i e infecciosos da população j
$\gamma_i = 0,2 \text{ dia}^{-1}$	Taxa de recuperação (inverso do período infeccioso)

O método *Simulated Annealing* foi executado considerando $n_{it} = 200$ iterações de resfriamento, com $r = 10$ tentativas de novas soluções em cada temperatura, e taxa de resfriamento $\lambda = 0,9$. Os resultados obtidos, para o cenário com as populações idênticas, são mostrados na Fig. (2-a). Nota-se que, neste caso, o menor número de infectados ocorre quando as vacinas são distribuídas igualmente, ou seja $\rho_1 \approx \rho_2 \approx \rho_3 \approx \rho_4 \approx \rho_5 \approx 0,2$.

Analisamos, também, um segundo cenário no qual as populações não são rigorosamente idênticas. Para isso, realizamos as simulações aumentando a taxa de transmissão entre suscetíveis da população 1 e infecciosos da população 2 para $\beta_{12} = 0,9 \text{ dia}^{-1}$, mantendo todo o restante inalterado, e os resultados são mostrados na Fig. (2-b). Nesse caso, a melhor estratégia de distribuição de vacinas corresponde em taxas igualitárias de vacinação entre as populações 1, 3, 4 e 5, mas uma taxa maior para a população 2 (mais infecciosa).

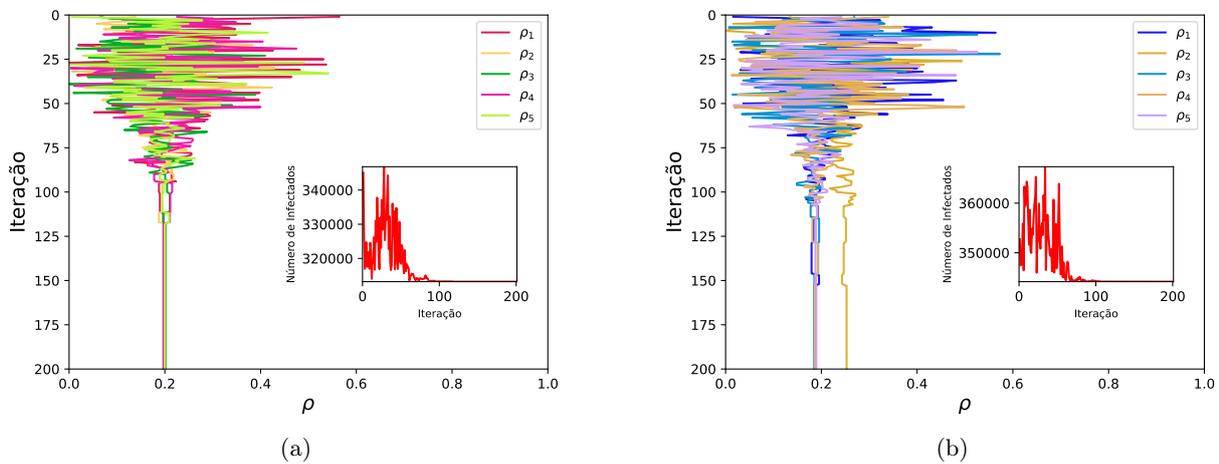


Figura 2: Resultados obtidos pelo *Simulated Annealing* considerando os parâmetros epidêmicos descritos na Tabela 1, quando: (a) consideradas cinco populações idênticas e (b) alterando a taxa de transmissão entre as populações 1 e 2 para $\beta_{12} = 0,9 \text{ dia}^{-1}$. Em ambas têm-se: número total de infectados em função da iteração (figura menor) e processo de busca da distribuição ótima de taxa de vacinação ρ ao longo das iterações (figura maior).

CONCLUSÕES

O presente projeto expande trabalhos anteriores ao propor uma abordagem para otimizar a distribuição de vacinas em n populações. Para alcançar tal objetivo, foram desenvolvidas funções capazes

de definir o sistema de equações a ser resolvido por métodos numéricos de forma automática. As simulações realizadas corroboram os achados prévios, indicando que, em populações de tamanhos iguais, a distribuição equitativa de vacinas entre elas é a solução ideal. Contudo, este estudo avança ao permitir maior flexibilidade na modificação de parâmetros específicos de cada população, possibilitando uma análise detalhada de como essas variações influenciam a dinâmica geral da alocação de doses. Apesar das limitações inerentes ao modelo proposto, como a dificuldade em avaliar múltiplas alterações simultâneas nos parâmetros populacionais, restringindo a análise a uma variação por cenário, os resultados apresentados oferecem subsídios valiosos para pesquisas futuras, contribuindo para o aprofundamento do estudo sobre a dinâmica de epidemias e a otimização de recursos de saúde pública.

APÊNDICE

```

1  def gerar_equacoes(num_pops):
2      """
3      Retorna as equacoes para um numero 'num_pops' de populacoes
4      """
5      equacoes = []
6
7      for i in range(num_pops):
8          S = f"S{i+1}"
9          I = f"I{i+1}"
10         R = f"R{i+1}"
11
12         beta_terms = ' + '.join([f"Pops[{i}].beta[{j}] * I{j+1}" for j in range(num_pops)])
13
14         dS_dt = f"Pops[{i}].mu * Pops[{i}].N - ({S} * ({beta_terms}) / Pops[{i}].N) - Pops[{i}].alpha * {S} - Pops[
15             {i}].mu * {S}"
16         dI_dt = f"({S} * ({beta_terms}) / Pops[{i}].N) - Pops[{i}].gama * {I} - Pops[{i}].mu * {I}"
17         dR_dt = f"Pops[{i}].gama * {I} + Pops[{i}].alpha * {S} - Pops[{i}].mu * {R}"
18         Icum = f"{S} * ({beta_terms}) / Pops[{i}].N"
19
20         equacoes.append(dS_dt)
21         equacoes.append(dI_dt)
22         equacoes.append(dR_dt)
23         equacoes.append(Icum)
24
25     return equacoes

```

Código 1: Função responsável por gerar o sistema de equações

```

1  def gerar_ode(num_pops):
2      """
3      Escreve uma funcao de ode's para ser executada pelo odeint
4      """
5      equacoes = gerar_equacoes(num_pops)
6
7      func_ode = "def ode_system(y, t, Pops):\n"
8      func_ode += "    dydt = []\n"
9
10     for i in range(num_pops):
11         S = f"S{i+1} = y[{i * 4}]"
12         I = f"I{i+1} = y[{i * 4 + 1}]"
13         R = f"R{i+1} = y[{i * 4 + 2}]"
14
15     func_ode += f"    {S}\n"
16     func_ode += f"    {I}\n"
17     func_ode += f"    {R}\n"
18
19     for eq in equacoes:
20         func_ode += f"    dydt.append({eq})\n"
21
22     func_ode += "    return dydt\n"
23
24     exec(func_ode, globals())
25     return globals()['ode_system']

```

Código 2: Função responsável por gerar a função a ser resolvida pelo método numérico

CONTRIBUIÇÕES DOS AUTORES

Todos os autores participaram de maneira equitativa no desenvolvimento, planejamento e execução do projeto de pesquisa, além de colaborarem na revisão e aprovarem a versão final submetida.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao Programa Institucional de Bolsa de Iniciação Científica e Tecnológica do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo (PIBIFSP), ao Programa Institucional Voluntário de Iniciação Científica e Tecnológica (PIVICT) e ao Centro de Pesquisa e Inovação (CEPIN) do IFSP - Campus Sertãozinho.

REFERÊNCIAS

BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C. *Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno*. [S.l.]: LTC Rio de Janeiro, 2010. v. 10.

CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. *Métodos Numéricos para Engenharia-7ª Edição*. [S.l.]: McGraw Hill Brasil, 2016.

ESTEFANI, M. G.; MENIN, O. H. Distribuição igualitária de vacinas entre populações como melhor estratégia para combater uma pandemia: simulações computacionais a partir do modelo susceptível-infeccioso-recuperado. In: *14 Congresso de Inovação, Ciência e Tecnologia do IFSP*. [S.l.: s.n.], 2023.

KEELING, M. J.; ROHANI, P. *Modeling infectious diseases in humans and animals*. [S.l.]: Princeton university press, 2011.

KERMACK, W. O.; MCKENDRICK, A. G. A contribution to the mathematical theory of epidemics. *Proceedings of the royal society of london. Series A, Containing papers of a mathematical and physical character*, The Royal Society London, v. 115, n. 772, p. 700–721, 1927.

KIRKPATRICK, S.; JR, C. D. G.; VECCHI, M. P. Optimization by simulated annealing. *science*, American association for the advancement of science, v. 220, n. 4598, p. 671–680, 1983.

MENIN, O. H.; MARTINEZ, A. S.; ROLNIK, V. *Tomografia de impedância elétrica: métodos computacionais*. [S.l.]: Livraria da Física, 2016. v. 1.

THOMAS, D.; HUNT, A. *The Pragmatic Programmer: your journey to mastery*. [S.l.]: Addison-Wesley Professional, 2019.