



XXXIII SIC SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

Evento	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2021
Local	Virtual
Título	MD e População: tentativa de reproduzir disseminação da COVID-19
Autor	ANA CAROLINE DE JESUS
Orientador	MARCIA CRISTINA BERNARDES BARBOSA

MD e População

Tentativa de reproduzir a disseminação da COVID -19 utilizando simulações de dinâmica molecular

Autora: Ana Caroline de Jesus

Orientadora: Márcia Cristina Bernardes Barbosa

Colaboração: Sebastián Gonçalves, Ben-Hur Francisco Cardoso
IF - UFRGS

Dinâmica Molecular(MD) é o processo computacional que, dado um conjunto de parâmetros, analisa o movimento físico de átomos e partículas. Com grande poder analítico essa ferramenta é utilizada nas mais diversas áreas, desde as ciências naturais com os sistemas dinâmicos da física e dissolução de compostos na química às humanas e população. Pensando nessa potência surge a proposta de reproduzir dados que nos levem à mesma conclusão do artigo *Universal scaling law for human-to-human transmission disease* publicado pelo aluno de mestrado Ben-Hur Cardoso e o professor Sebastián Gonçalves do Instituto de Física da UFRGS, que chega a uma relação de proporcionalidade entre tamanho populacional e taxa de contaminação da COVID-19 utilizando dados das regiões metropolitanas dos Estados Unidos. Divisando o melhor cenários conseguiremos uma técnica simples porém extremamente útil na previsão da evolução do contágio de doenças como a causada pelo vírus SARS-CoV-2. A primeira abordagem do problema fora utilizar o potencial repulsivo WCA(*Wee-Chandler-Andersen*), densidade de $30\text{kg}/\text{m}^2$ (equivalente a densidade populacional da cidade de Nova Iorque), limite superior da distância de contágio $2^{1/6}m$ sendo qualquer valor inferior ou igual a esse a chance de contaminação é de 100% e distâncias maiores a chance é de 0%. Tais condições aplicadas ao conjunto microcanônico resultou dados indicando que ao inciar com o mesmo número de infectados o início da difusão para uma população de 5000 partículas é anterior aquela com 1000 partículas porém a taxa de interação entre as partículas é da mesma ordem em ambos os casos. A princípio aquilo que podemos afirmar é que o conjunto microcanônico nessas condições não é uma boa representação do movimento populacional metropolitano porém ainda há muito a ser explorado quando se trata de MD.