

Sobre o modelo estocástico do SIS para uma epidemia em um ambiente periódico

J. Math. Biol. 71 (2015) 491–511
<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01265563>

Nicolas Bacaër

Institut de Recherche pour le Développement, Bondy, França
Universidade Pierre e Marie Curie, Les Cordeliers, Paris, França
nicolas.bacaer@ird.fr

Sumário

No modelo estocástico do SIS para uma epidemia com uma taxa de contato a , uma taxa de cura $b < ae$ e um tamanho populacional N , o tempo médio para extinção τ é tal que $(\log \tau)/N$ converge para $c = b/a - 1 - \log(b/a)$ quando N converge para o infinito. Este artigo considera o caso mais realista em que a taxa de contato é uma função periódica cuja média é maior que b . Então $(\log \tau)/N$ converge para um novo limite C , que está vinculado a uma equação periódica de Hamilton-Jacobi. Quando a taxa de contato é uma função cosseno com uma pequena amplitude, com uma frequência grande ou com uma frequência muito pequena, pode-se obter fórmulas aproximadas para C analiticamente, como em [Assaf et al., 2008, Phys Rev E 78 041123]. Estes resultados são ilustrados por simulações numéricas.

1. Introdução

O modelo estocástico do SIS para uma epidemia foi estudado em detalhes quando o ambiente é considerado constante, como no livro de Nåsell (2011). Com uma taxa de contato a , uma taxa de cura $b < a$ e um tamanho populacional N , o tempo médio para extinção τ (começando, por exemplo, por uma pessoa infectada) é tal que

$$\frac{\log \tau}{N} \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} c = b/a - 1 - \log(b/a) > 0 \quad (1)$$

(Nåsell, 2011, Teorema 12.1). Entre outras referências, veja também (Andersson e Djehiche, 1998), (Doering et al., 2005) e (Assaf e Meerson, 2010). Estes últimos usam o método de Brillouin, Kramers e Wentzel [BKW]. A probabilidade $P_n(t)$ ter $n \geq 1$ pessoas infectadas no momento t primeiro se aproxima de uma distribuição quase estacionária π_n . Nós definimos $x = n/N$ para que $0 \leq x \leq 1$. Quando N converge para o infinito, $-(\log \pi_n)/N$ aborda uma função contínua $S(x)$ com a equação estacionária de Hamilton-Jacobi

$$H\left(x, \frac{\partial S}{\partial x}\right) = 0$$

com

$$\begin{aligned} H(x, p) &= ax(1-x)(e^p - 1) + bx(e^{-p} - 1) \\ &= x(1 - e^{-p})[a(1-x)e^p - b] \end{aligned} \quad (2)$$

(Assaf e Meerson, 2010, (12) e §IV.D.3). Mais precisamente, o ramo da linha de nível $H = 0$ com $a(1-x)e^p - b = 0$ leva à fórmula

$$S(x) = x \log(b/a) + x + (1-x) \log(1-x) + \text{constante}. \quad (3)$$

Esta função tem um mínimo quando $x = x^* = 1 - b/a$ com $x^* > 0$ porque $b < a$. Finalmente

$$c = S(0) - S(x^*)$$

é a altura entre o fundo e a aresta em $x = 0$ do poço potencial $S(x)$. Equivalentemente, o sistema hamiltoniano

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} \quad (4)$$

tem uma órbita heteroclina que conecta $(x^*, 0) = (1 - \frac{b}{a}, 0)$ e $(0, p^*) = (0, \log \frac{b}{a})$. O número c é igual à ação

$$\int_{x^*}^0 p dx$$

ao longo desta órbita. O método BKW tem sido utilizado para outros processos de nascimento e morte em física ou biologia populacional (Ovaskainen e Meerson, 2010; Kamenev, 2011).

Em seu estudo de uma reação química com ramificação e aniquilação, (Escudero e Rodríguez, 2008) mostraram como um ambiente periódico no tempo influenciava a órbita da heteroclina, que desempenha um papel central no tempo médio de extinção. (Assaf et al., 2008) estudaram o mesmo modelo em mais detalhes, calculando notavelmente a correção para o tempo médio de extinção devido a uma perturbação periódica de pequena amplitude, baixa frequência ou alta frequência. Esses autores obtiveram fórmulas gerais que podem ser aplicadas a outros processos de nascimento e morte com metaestabilidade. Além disso, (Billings et al., 2013, Figura 7) mostra simulações de Monte-Carlo de um modelo estocástico periódico do SIS.

O objetivo aqui é aplicar o método BKW usado por (Assaf et al., 2008) ao modelo epidêmico do SIS com uma taxa de contato periódica T cuja média é maior que b . Esse modelo pode representar, por exemplo, a propagação de uma infecção bacteriana que não confere imunidade. A propagação pode ocorrer em uma escola com periodicidade semanal (prevista para finais de semana) ou periodicidade anual (devido a feriados e sazonalidade). É claro que este é apenas um primeiro passo para modelos mais realistas.

Na Seção 2, cálculos informais sugerem que o tempo médio de extinção τ (começando por exemplo a partir de uma pessoa infectada no tempo 0) é tal que

$$\frac{\log \tau}{N} \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} C = \min_{0 \leq t \leq T} S^*(t, 0^+) - \min_{0 \leq t \leq T} \min_{0 \leq x \leq 1} S^*(t, x). \quad (5)$$

Aqui $S^*(t, x)$ é uma solução de viscosidade periódica T da equação de Hamilton-Jacobi

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(t, x, \frac{\partial S}{\partial x}\right) = 0 \quad (6)$$

para $0 < x < 1$ com a condição de borda mista Dirichlet - "estado restrito"

$$S(t, 0) = 0, \quad \frac{\partial S}{\partial x}(t, 1) = +\infty.$$

$S(t, x)$ não deve ser identicamente zero perto de $x = 0$. A condição nas bordas deve ser entendida no sentido de viscosidade (Barles, 1994) porque $S^*(t, 0^+)$ pode não ser igual a 0. O Hamiltoniano $H(t, x, p)$ é idêntico a (2), exceto que o parâmetro constante a é substituído por $a(t)$. Se

$$a(t) = a_0(1 + \varepsilon \cos(\omega t)), \quad \omega = 2\pi/T, \quad a_0 > b, \quad |\varepsilon| \leq 1,$$

nós definimos $c_0 = b/a_0 - 1 - \log(b/a_0)$. Seguindo os métodos de (Assaf et al., 2008), a seção 2 mostra que

$$C \simeq c_0 - \frac{\pi \omega |\varepsilon|}{a_0 \sinh\left(\frac{\pi \omega}{a_0 - b}\right)}$$

se ε está perto de 0,

$$C \simeq c_0 - |\varepsilon|(1 - b/a_0)$$

se $\omega \ll a_0$ e

$$C \simeq c_0 - \frac{(a_0 - b)^2 \varepsilon^2}{12 \omega^2} (1 + 2b/a_0)$$

no limite de alta frequência $\omega \gg a_0$. Podemos conjecturar que $C > 0$ contanto que $\frac{1}{T} \int_0^T a(t) dt > b$. C provavelmente é sempre menor que c_0 , porque as variações sazonais tendem a favorecer a extinção de doenças infecciosas. Isso sugere com mais precisão que um ambiente periódico leva ao modelo SIS a uma redução exponencial no tempo médio de extinção semelhante ao obtido para o modelo de ramificação e aniquilação (Assaf et al., 2008). A seção 3 ilustra esses resultados com simulações numéricas. A seção 4 adiciona algumas observações.

2. Cálculos analíticos

2.1 A equação diferencial parcial de Hamilton-Jacobi

Equação mestre e teoria de Floquet. N é a população total, assumida como constante. Existem

- $S(t)$ pessoas saudáveis
- $I(t)$ pessoas infectadas

no tempo t , com $N = S(t) + I(t)$. Se $I(t) = n$,

- com probabilidade $bndt + o(dt)$, uma pessoa cura
- com probabilidade $a(t)n(1 - n/N)dt + o(dt)$, uma pessoa está infectada

entre t e $t + dt$. Então $a(t)$ é a taxa de contato eb a taxa de cura. Assumimos que $a(t)$ é uma função periódica T positiva positiva com

$$r = \frac{1}{T} \int_0^T a(t) dt - b > 0,$$

em outras palavras

$$R_0 = \frac{\frac{1}{T} \int_0^T a(t) dt}{b} > 1.$$

Para uma interpretação biológica de R_0 cf. (Bacaër e Ait Dads, 2012). (Hethcote, 1973) notou que $r > 0$ (isto é, $R_0 > 1$) é uma condição necessária e suficiente para que a solução dessa equação de campo médio converja para uma função periódica e positiva:

$$\frac{di}{dt} = a(t)i(1 - i) - bi.$$

Caso contrário, a solução converge para zero.

Se $P_n(t)$ é a probabilidade de que $I(t) = n$ nós temos

$$\begin{aligned} \frac{dP_n}{dt} = & a(t)(n - 1)(1 - (n - 1)/N)P_{n-1} - [a(t)n(1 - n/N) + bn]P_n \\ & + b(n + 1)P_{n+1} \end{aligned} \quad (7)$$

para $0 \leq n \leq N$. Aqui $P_{-1} = 0$ e $P_{N+1} = 0$. Claro

$$\sum_{n=0}^N P_n(t) = 1.$$

O sistema (7) também está escrito

$$\frac{dP}{dt} = M(t)P,$$

onde $P(t)$ é o vetor $(P_n(t))_{0 \leq n \leq N}$ e $M(t)$ é a matriz quadrada de tamanho $N + 1$

$$M(t) = \begin{pmatrix} 0 & b & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -b - a(t)(1 - \frac{1}{N}) & 2b & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a(t)(1 - \frac{1}{N}) & -2b - 2a(t)(1 - \frac{2}{N}) & 3b & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -bN \end{pmatrix}.$$

Essa matriz possui estrutura de blocos

$$M(t) = \left(\begin{array}{c|c} 0 & * \\ \hline 0 & Q(t) \end{array} \right),$$

onde $Q(t)$ é uma matriz quadrada de tamanho N . $X(t)$ e $Y(t)$ são as matrizes com

$$\frac{dX}{dt} = M(t) X, \quad X(0) = I_{N+1}$$

$$\frac{dY}{dt} = Q(t) Y, \quad Y(0) = I_N.$$

I_N representa a matriz identidade de tamanho N . Multiplicadores Floquet de $M(t)$, ou seja, os valores próprios da matriz de monodromia $X(T)$ são $\{\mu_0 = 1\}$ e os multiplicadores Floquet de $Q(t)$. A matriz $Q(t)$ é cooperativo: os coeficientes fora da diagonal são positivos ou zero. Essa matriz também é irredutível porque os elementos logo acima e abaixo da diagonal são estritamente positivos. Portanto, todos os elementos de $Y(t)$ são estritamente positivos para $t > 0$. De acordo com o teorema de Perron e Frobenius, o autovalor μ_1 de $Y(T)$ com a maior parte real é um número real estritamente positivo e o espaço próprio associado é da dimensão 1. Além disso,

$$(1 \ 1 \ \dots \ 1)Q(t) = (-b \ 0 \ 0 \ \dots \ 0).$$

$Q(t)$ "Foge" e $0 < \mu_1 < 1$ (Aronsson e Kellogg, 1978). Então $\lambda_1 = (\log \mu_1)/T < 0$. Vetor $(1, 0, 0, \dots, 0)$ é um estado estacionário. $P(t)$ converge para esse vetor se $t \rightarrow +\infty$. O objetivo aqui é estimar, para N grande, a proximidade entre λ_1 e 0.

Seja v um autovetor de $X(T)$ associado ao autovalor $\mu_1 = e^{\lambda_1 T}$. Podemos escolher v para que $v_n > 0$ para $1 \leq n \leq N$. Então

$$X(T)v = e^{\lambda_1 T} v.$$

Como na teoria de Floquet, definimos

$$\pi(t) = e^{-\lambda_1 t} X(t)v.$$

Então

$$\frac{d\pi}{dt}(t) = -\lambda_1 \pi(t) + M(t)\pi(t).$$

Mais

$$\pi(T) = e^{-\lambda_1 T} X(T)v = v = \pi(0).$$

Então $\pi(t)$ é periódico T . Se $\pi(t) = (\pi_n(t))_{0 \leq n \leq N}$ então

$$\lambda_1 \pi_n + \frac{d\pi_n}{dt} = a(t)(n-1)(1 - (n-1)/N)\pi_{n-1} - [a(t)n(1 - n/N) + b n]\pi_n + b(n+1)\pi_{n+1}. \quad (8)$$

Ao somar essas equações, obtemos

$$\lambda_1 \sum_{n=0}^N \pi_n(t) + \frac{d}{dt} \sum_{n=0}^N \pi_n(t) = 0.$$

Então

$$\sum_{n=0}^N \pi_n(t) = e^{-\lambda_1 t} \sum_{n=0}^N \pi_n(0).$$

Mas $\sum_{n=0}^N \pi_n(t)$ é periódico T . Portanto, $\sum_{n=0}^N \pi_n(0) = 0$ e $\sum_{n=0}^N \pi_n(t) = 0$ por tudo t . Então

$$\pi_0(t) = - \sum_{n=1}^N \pi_n(t).$$

Mas (8) com $n = 0$ também mostra que

$$\lambda_1 \pi_0(t) + \frac{d\pi_0}{dt} = b \pi_1(t).$$

Porque $\pi_0(t)$ é periódico, conseguimos integrando

$$\lambda_1 = b \frac{\int_0^T \pi_1(t) dt}{\int_0^T \pi_0(t) dt} = -b \frac{\int_0^T \pi_1(t) dt}{\sum_{n=1}^N \int_0^T \pi_n(t) dt}. \quad (9)$$

Solução BKW e equação de Hamilton-Jacobi. Quando N é grande, vamos procurar uma solução BKW

$$\pi_n(t) \simeq e^{-NS(t,x)}$$

para $1 \leq n \leq N$ onde $x = n/N$ e $S(t, x)$ é uma função contínua de t e x para $0 < x < 1$, que é T -periódico em relação a t . Então

$$\begin{aligned} \frac{d\pi_n}{dt} &\simeq -N \frac{\partial S}{\partial t}(t, x) e^{-NS(t,x)}, \\ \pi_{n+1}(t) &\simeq e^{-NS(t, x + \frac{1}{N})} \simeq e^{-NS(t,x) - \frac{\partial S}{\partial x}(t,x)}, \quad \pi_{n-1}(t) \simeq e^{-NS(t,x) + \frac{\partial S}{\partial x}(t,x)}. \end{aligned}$$

Nós definimos $\alpha(t, x) = a(t)x(1-x)$ e $\beta(x) = bx$. Então (8) está escrito

$$\lambda_1 \pi_n + \frac{d\pi_n}{dt} = N\alpha(t, x - 1/N)\pi_{n-1} - N[\alpha(t, x) + \beta(x)]\pi_n + N\beta(x + 1/N)\pi_{n+1}.$$

Mantendo apenas as expressões dominantes, podemos usar $\alpha(t, x - 1/N) \simeq \alpha(t, x)$ e $\beta(x + 1/N) \simeq \beta(x)$ para obter

$$\lambda_1 \pi_n + \frac{d\pi_n}{dt} \simeq N\alpha(t, x)[\pi_{n-1} - \pi_n] + N\beta(x)[\pi_{n+1} - \pi_n].$$

λ_1 provavelmente é exponencialmente pequeno. Pode ser esquecido no lado esquerdo. Injetando o formulário BKW e dividindo por $N e^{-NS(t,x)}$, obtemos a equação de Hamilton-Jacobi

$$\frac{\partial S}{\partial t} + a(t)x(1-x) \left[e^{\frac{\partial S}{\partial x}} - 1 \right] + bx \left[e^{-\frac{\partial S}{\partial x}} - 1 \right] = 0 \quad (10)$$

para $0 < x < 1$. Esta é da forma (6) com um hamiltoniano periódico $H(t, x, p)$ dado por (2), e $a(t)$ substituí a . Equações como (10) normalmente têm soluções assintóticas da forma $S(t, x) = -Et + \Sigma(t, x)$ onde $\Sigma(t, x)$ é T -periódico com respeito a t e E é uma constante. Aqui, no entanto, apenas soluções com $E = 0$ são de interesse: eles correspondem às órbitas heteroclínicas da seção 2.2 abaixo.

Condições de borda. Porque $H(t, 0, p) = 0$ nós temos $\frac{\partial S}{\partial t}(t, 0) = 0$. Então $S(t, 0)$ é uma constante S_0 independente de t . Como (10) envolve apenas derivadas parciais de primeira ordem, suas soluções são definidas dentro de uma constante aditiva (lembre-se de que o vetor próprio v de $X(T)$ é definido como dentro de uma constante multiplicativa). Para que possamos escolher $S_0 = 0$, daí a condição Dirichlet:

$$S(t, 0) = 0 \quad \forall t. \quad (11)$$

Além disso, porque $\pi_n(t) = 0$ para $n > N$ e porque a fórmula (3) em um ambiente constante mostra que $|S(1)| < +\infty$ enquanto $\frac{dS}{dx}(1) = +\infty$, impomos isso

$$\frac{\partial S}{\partial x}(t, 1) = +\infty \quad \forall t. \quad (12)$$

Outra maneira de apresentar essa condição na borda é "restrição de estado"

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(t, x, \frac{\partial S}{\partial x}\right) \geq 0$$

se $x = 1$. Esta condição leva com $x = 1$ às

$$\frac{\partial H}{\partial p}(t, x, \frac{\partial S}{\partial x}) \geq 0$$

(Soner, 1986). Mas porque

$$\frac{\partial H}{\partial p}(t, x, p) = a(t)x(1-x)e^p - bxe^{-p},$$

esta expressão é positiva ou zero em $x = 1$ se e somente se $p = +\infty$, como em (12).

Propriedades do Hamiltoniano. $H(t, x, p)$ é convexo em p porque

$$\frac{\partial^2 H}{\partial p^2}(t, x, p) = a(t)x(1-x)e^p + bxe^{-p} \geq 0.$$

Além disso, $H(t, x, p) \rightarrow +\infty$ se $|p| \rightarrow +\infty$ desde que $0 < x < 1$. Mas essa propriedade não é mais verdadeira quando $x = 0$ ou então $x = 1$. Nós temos $H(t, x, 0) = 0$. O Lagrangiano é

$$L(t, x, v) = \max_p \{pv - H(t, x, p)\}.$$

Se $0 < x < 1$ nós temos

$$L(t, x, v) = p_*v - H(t, x, p_*)$$

com p_* solução única de

$$v = \frac{\partial H}{\partial p}(t, x, p_*) = a(t)x(1-x)e^{p_*} - bxe^{-p_*}.$$

É uma equação polinomial de grau 2 em e^{p_*} . Isso dá

$$\begin{aligned} L(t, x, v) &= p_*v - a(t)x(1-x)(e^{p_*} - 1) - bx(e^{-p_*} - 1) \\ &= v \log \left(\frac{v + \sqrt{v^2 + 4a(t)x(1-x)bx}}{2a(t)x(1-x)} \right) + a(t)x(1-x) + bx \\ &\quad - \frac{v + \sqrt{v^2 + 4a(t)x(1-x)bx}}{2} - \frac{2a(t)x(1-x)bx}{v + \sqrt{v^2 + 4a(t)x(1-x)bx}}. \end{aligned}$$

Para $x = 1$ nós temos

- $L(t, 1, v) = +\infty$ se $v > 0$
- $L(t, 1, 0) = b$
- $L(t, 1, v) = -v \log(-v/b) + v + b$ se $v < 0$.

Para $x = 0$ nós temos

- $L(t, 0, v) = +\infty$ se $v \neq 0$
- $L(t, 0, 0) = 0$.

Para x próximo a 0, observe no entanto que $L(t, x, v) \sim -v \log x$. Então para $\eta > 0$ pequeno e para qualquer função $\xi \in C^1([\theta, t]; [0, 1])$ com $\xi(\theta) = 0$ nós temos

$$\int_{\theta}^{\theta+\eta} L(s, \xi(s), \dot{\xi}(s)) ds \simeq - \int_{\theta}^{\theta+\eta} \frac{d\xi}{ds}(s) \log \xi(s) ds = - \int_0^{\xi(\theta+\eta)} \log \xi d\xi,$$

o que não é infinito.

Soluções da equação de Hamilton-Jacobi. Para uma determinada condição inicial $S_0(x)$, a função

$$\begin{aligned} S(t, x) &= \inf \left\{ \int_{\theta}^t L(s, \xi(s), \dot{\xi}(s)) ds + 1_{\theta=0} S_0(\xi(\theta)); \right. \\ &\quad \left. 0 \leq \theta \leq t, \xi \in C^1([\theta, t]; [0, 1]), \theta = 0 \vee \xi(\theta) = 0, \xi(t) = x \right\} \end{aligned}$$

é uma solução de viscosidade de (10) com condições mistas (11) - (12) nas bordas e com $S(0, x) = S_0(x)$ (Barles, 1994). É a função de valor de um problema de tempo de saída em $x = 0$ com a "restrição de estado" em $x = 1$. Uma

solução periódica $S^*(t, x)$ de (10) - (11) - (12) é, portanto, dado por um ponto fixo do operador de evolução acima: $S^*(0, x) = S^*(T, x)$. (Roquejoffre, 2001) e (Mitake, 2009) estudaram equações periódicas semelhantes de Hamilton-Jacobi com condições nas bordas do tipo Dirichlet. Observe, no entanto, que não há exclusividade. Para problemas relacionados, cf. (Barles e Perthame, 1988). De fato, considere o caso especial em que $a(t) = a_0$ é constante. Nesse caso, existem dois tipos de soluções estacionárias de viscosidade $S^*(x)$.

- Por um lado, existem as soluções do formulário

$$x \log(b/a_0) + x + (1 - x) \log(1 - x) + \gamma$$

com uma constante $\gamma \leq 0$, que diferem apenas através da constante γ . A solução com $\gamma = 0$ é a única a verificar a condição na borda em $x = 0$ no sentido clássico.

- Por outro lado, existem as soluções do formulário

$$\min\{0, x \log(b/a_0) + x + (1 - x) \log(1 - x) + \gamma\}$$

com uma constante γ tal que $0 < \gamma \leq c_0$. Estas soluções são identicamente quase zero $x = 0$ e não dão C .

Para a equação periódica (10) com as condições mistas (11) - (12) nas arestas, podemos conjecturar que ela possui soluções de viscosidade

- que são periódicos T em relação a t ,
- que não são identicamente zero perto de $x = 0$,
- que diferem apenas por uma constante (dando assim o mesmo C).

É uma solução que escolhemos como solução BKW. Como a Figura 3 sugere abaixo, a condição na borda em $x = 0$ deve ser entendida no sentido de viscosidade, porque a solução pode não ser contínua em $x = 0$.

Comportamento de λ_1 se N for grande. Voltando a (9), temos

$$\frac{\log(-\lambda_1)}{N} = \frac{\log b}{N} + \frac{1}{N} \log\left(\int_0^T \pi_1(t) dt\right) - \frac{1}{N} \log\left(\sum_{n=1}^N \int_0^T \pi_n(t) dt\right).$$

Nós temos

$$\pi_1(t) \simeq e^{-NS^*(t, 1/N)} \simeq e^{-NS^*(t, 0^+)}$$

para N grande. Então

$$\frac{1}{N} \log\left(\int_0^T \pi_1(t) dt\right) \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} - \min_{0 \leq t \leq T} S^*(t, 0^+)$$

por causa da fórmula de Laplace para avaliação assintótica de integrais. Da mesma forma, porque $\pi_n(t) \simeq e^{-NS^*(t, n/N)}$ nós temos

$$\frac{1}{N} \log\left(\sum_{n=1}^N \int_0^T \pi_n(t) dt\right) \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} - \min_{0 \leq t \leq T} \min_{0 \leq x \leq 1} S^*(t, x)$$

e

$$\frac{\log(-\lambda_1)}{N} \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} -C$$

com C dado por (5). Podemos conjecturar que $C > 0$ se e somente se $\frac{1}{T} \int_0^T a(t) dt > b$.

Tempo médio de extinção. A partir de n pessoas infectadas no tempo t , o tempo médio de extinção $\tau_n(t)$ é uma solução periódica em T do sistema

$$-1 = \frac{d\tau_n}{dt} + bn\tau_{n-1} - (a(t)n(1 - n/N) + bn)\tau_n + a(t)n(1 - n/N)\tau_{n+1} \quad (13)$$

para $1 \leq n \leq N$ com $\tau_0(t) = 0$. Este sistema envolve a matriz transposta $Q^*(t)$ da matriz $Q(t)$. Nós definimos

- $\hat{\tau}(t) = (\tau_n(t))_{1 \leq n \leq N}$
- $\hat{\pi}(t) = (\pi_n(t))_{1 \leq n \leq N}$
- $\mathbf{1} = (1, 1, \dots, 1)$
- $\langle \cdot, \cdot \rangle$ o produto escalar usual de vetores reais.

Então

$$\lambda_1 \hat{\pi} + \frac{d\hat{\pi}}{dt} = Q(t)\hat{\pi}, \quad -\mathbf{1} = \frac{d\hat{\tau}}{dt} + Q^*(t)\hat{\tau}.$$

e

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\pi}, \hat{\tau} \rangle = \left\langle \frac{d\hat{\pi}}{dt}, \hat{\tau} \right\rangle + \left\langle \hat{\pi}, \frac{d\hat{\tau}}{dt} \right\rangle = \langle Q(t)\hat{\pi}, \hat{\tau} \rangle - \lambda_1 \langle \hat{\pi}, \hat{\tau} \rangle - \langle \hat{\pi}, \mathbf{1} \rangle - \langle \hat{\pi}, Q^*(t)\hat{\tau} \rangle.$$

Expressões com $Q(t)$ e $Q^*(t)$ cancelar um ao outro. Integrando e usando a periodicidade T de $\hat{\pi}(t)$ e $\hat{\tau}(t)$, nós obtemos

$$-\lambda_1 = \frac{\int_0^T \langle \hat{\pi}, \mathbf{1} \rangle}{\int_0^T \langle \hat{\pi}, \hat{\tau} \rangle dt}.$$

Isso sugere que o tempo médio de extinção τ , começando por exemplo a partir de uma pessoa infectada no tempo 0, é da mesma ordem de magnitude que $-1/\lambda_1$:

$$\frac{\log(\tau)}{N} \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} C.$$

Pode-se supor que essa análise essencialmente informal possa ser colocada de forma rigorosa, como no modelo SIS em um ambiente constante (Nåsell, 2011).

2.2 A órbita da heteroclina

Caso geral. Lembre-se de que a equação de Hamilton-Jacobi (6) pode ser resolvida pelo menos localmente por traçado de raios, isto é, resolvendo simultaneamente o sistema hamiltoniano (4) e a equação

$$\frac{dz}{dt} = p(t) \frac{\partial H}{\partial p}(t, x(t), p(t)) - H(t, x(t), p(t))$$

com as condições iniciais $x(0) = x_0$, $p(0) = \frac{\partial S}{\partial x}(0, x_0)$, $z(0) = S(0, x_0)$ então $z(t) = S(t, x(t))$. A seguir (Assaf et al., 2008), vamos examinar mais de perto o sistema hamiltoniano (4). Nesse caso,

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial p}(t, x, p) &= a(t)x(1-x)e^p - bxe^{-p}, \\ \frac{\partial H}{\partial x}(t, x, p) &= a(t)(1-2x)(e^p - 1) + b(e^{-p} - 1). \end{aligned} \tag{14}$$

Vamos primeiro procurar uma solução periódica não trivial de T , de modo que $x \equiv 0$ e

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x}(t, 0, p) = -(a(t) - be^{-p})(e^p - 1).$$

Com $p = \log(1 + q)$, obtemos uma equação diferencial de Bernoulli que pode ser facilmente resolvida. Isso fornece a solução periódica T

$$p^*(t) = \log \left(1 + \left[\frac{e^{-bt + \int_0^t a(s) ds}}{e^{p^*(0)} - 1} + \int_0^t a(s) e^{-b(t-s) + \int_s^t a(u) du} ds \right]^{-1} \right),$$

onde

$$p^*(0) = \log \left(1 + \frac{1 - e^{-bT + \int_0^T a(s) ds}}{\int_0^T a(s) e^{-b(T-s) + \int_s^T a(u) du} ds} \right).$$

A solução periódica $(0, p^*(t))$ é instável. De fato, com $x(t) = \tilde{x}(t)$ e $p(t) = p^*(t) + \tilde{p}(t)$ e linearizando as equações, obtemos

$$\begin{pmatrix} d\tilde{x}/dt \\ d\tilde{p}/dt \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a(t)e^{p^*(t)} - be^{-p^*(t)} & 0 \\ 2a(t)(e^{p^*(t)} - 1) & -a(t)e^{p^*(t)} + be^{-p^*(t)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{p} \end{pmatrix}.$$

Os multiplicadores Floquet são

$$f = \exp \int_0^T [a(t)e^{p^*(t)} - be^{-p^*(t)}] dt$$

e $1/f$, daí a instabilidade. A instabilidade também pode ser vista como uma consequência do teorema de Liouville sobre a invariância do "volume" no espaço de fase (x, p) sob a ação do fluxo hamiltoniano.

Segundo, vamos procurar uma solução periódica de T não trivial, que $p \equiv 0$ e

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}(t, x, 0) = a(t)x(1-x) - bx.$$

Esta é a equação do campo médio do modelo SIS. A única solução periódica de T diferente de zero é

$$x^*(t) = \left(\frac{1}{x^*(0)} e^{bt - \int_0^t a(s) ds} + \int_0^t a(u) e^{b(t-u) - \int_u^t a(s) ds} du \right)^{-1}$$

com

$$x^*(0) = \frac{1 - e^{bT - \int_0^T a(s) ds}}{\int_0^T a(u) e^{b(T-u) - \int_u^T a(s) ds} du}. \quad (15)$$

A solução periódica $(x^*(t), 0)$ também é instável. De fato, com $x(t) = x^*(t) + \tilde{x}(t)$ e $p(t) = \tilde{p}(t)$ e linearizando as equações, obtemos

$$\begin{pmatrix} d\tilde{x}/dt \\ d\tilde{p}/dt \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a(t)(1 - 2x^*(t)) - b & a(t)x^*(t)(1 - x^*(t)) + bx^*(t) \\ 0 & -a(t)(1 - 2x^*(t)) + b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{p} \end{pmatrix}.$$

Os multiplicadores Floquet são novamente inversos entre si, daí a instabilidade.

Lembre-se da seção 1 que, em um ambiente constante, existe uma órbita de heteroclina no plano de fase (x, p) conectando os pontos estacionários $(x^*, 0) = (1 - b/a, 0)$ e $(0, p^*) = (0, \log(b/a))$ se $a > b$. (Escudero e Rodríguez, 2008) encontraram uma órbita heteroclina semelhante para o modelo periódico de ramificação e aniquilação de partículas idênticas, pelo menos para uma pequena amplitude da perturbação periódica. Para que possamos esperar a existência de uma órbita heteroclina $(\hat{x}(t), \hat{p}(t))$, que conecta soluções periódicas $(x^*(t), 0)$ e $(0, p^*(t))$. Provavelmente, a existência pode ser demonstrada usando uma abordagem variacional (Rabinowitz, 1994). Esta órbita especial pode ser obtida digitalmente por um método de disparo. De acordo com (Assaf et al., 2008, equação (20)),

$$C = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\hat{p}(t) \frac{\partial H}{\partial p}(t, \hat{x}(t), \hat{p}(t)) - H(t, \hat{x}(t), \hat{p}(t)) \right] dt. \quad (16)$$

Essa integral pode ser avaliada numericamente.

Método disruptivo. Se $a(t)$ é uma constante a_0 então $(\hat{x}_0(t), \hat{p}_0(t))$ é a órbita da heteroclina conectando os pontos estacionários $(x^*, 0) = (1 - b/a_0, 0)$ e $(0, p^*) = (0, \log(b/a_0))$. Essa órbita é tal que $a_0(1-x)e^p - b = 0$, como pode ser visto em (2). Usando esta equação para expressar p em função de x e inserindo o resultado na primeira equação de (4), obtemos

$$\frac{dx}{dt} = bx - a_0x(1-x).$$

A solução é

$$x(t) = \left[\frac{1}{x(t_0)} e^{(a_0-b)(t-t_0)} + \frac{a_0}{a_0-b} (1 - e^{(a_0-b)(t-t_0)}) \right]^{-1}.$$

Escolhendo por exemplo $x(t_0) = (1 - b/a_0)/2$, nós obtemos

$$\hat{x}_0(t) = \frac{1 - b/a_0}{1 + e^{(a_0-b)(t-t_0)}} \quad \text{et} \quad \hat{p}_0(t) = \log \frac{1 + e^{(a_0-b)(t-t_0)}}{1 + e^{(a_0-b)(t-t_0)} a_0/b}.$$

Agora suponha que

$$a(t) = a_0(1 + \varepsilon \phi(t))$$

com $a_0 > b$, ε pequeno e $\phi(t)$ uma função periódica T tal que $\int_0^T \phi(t) dt = 0$. O Hamiltoniano pode ser escrito na forma

$$H(t, x, p) = H_0(x, p) + \varepsilon H_1(t, x, p),$$

onde $H_0(x, p)$ é o mesmo que (2), exceto que a_0 substitui a e onde

$$H_1(t, x, p) = a_0 \phi(t) x(1 - x)(e^p - 1).$$

Se $c_0 = b/a_0 - 1 - \log(b/a_0)$ então

$$C \simeq \min_{t_0} \Gamma(t_0), \quad \Gamma(t_0) = c_0 - \varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} H_1(t, \hat{x}_0(t), \hat{p}_0(t)) dt$$

para $\varepsilon \simeq 0$ (Assaf et al., 2008, equação (24)). Nesse caso, $(1 - \hat{x}_0)e^{\hat{p}_0} = b/a_0$. Então

$$\begin{aligned} \Gamma(t_0) &= c_0 - \varepsilon a_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(t) \hat{x}_0(t) [b/a_0 - 1 + \hat{x}_0(t)] dt \\ &= c_0 + \varepsilon(1 - b/a_0) \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(t_0 + u/(a_0 - b)) \frac{e^u}{(1 + e^u)^2} du. \end{aligned}$$

Então $\Gamma(t_0)$ é uma função periódica T de t_0 com $\int_0^T \Gamma(t_0) dt_0 = 0$. Considere a decomposição de Fourier de $\phi(t)$,

$$\phi(t) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \phi_k e^{k i \omega t},$$

com $\omega = 2\pi/T$, $\phi_0 = 0$ porque a média de $\phi(t)$ é zero e $\phi_{-k} = \bar{\phi}_k$ (número complexo conjugado). Então

$$\begin{aligned} \Gamma(t_0) &= c_0 + \varepsilon(1 - b/a_0) \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \phi_k e^{k i \omega t_0} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{k i \omega u}{a_0 - b}} \frac{e^u}{(1 + e^u)^2} du \\ &= c_0 + \varepsilon(1 - b/a_0) \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \phi_k e^{k i \omega t_0} \frac{\frac{k \pi \omega}{a_0 - b}}{\sinh\left(\frac{k \pi \omega}{a_0 - b}\right)} \end{aligned}$$

(ver apêndice). Especialmente se $\phi(t) = \cos(\omega t)$ então $\phi_{\pm 1} = 1/2$ e $\phi_k = 0$ caso contrário. Então

$$\Gamma(t_0) = c_0 + \varepsilon \frac{\pi \omega \cos(\omega t_0)}{a_0 \sinh\left(\frac{\pi \omega}{a_0 - b}\right)}. \quad (17)$$

Assim como (Escudero e Rodríguez, 2008) e (Assaf et al., 2008), o sistema perturbado é da forma

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H_0}{\partial p} + \varepsilon \frac{\partial H_1}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H_0}{\partial x} - \varepsilon \frac{\partial H_1}{\partial x}. \quad (18)$$

$\hat{x}_0(t)$ e $\hat{p}_0(t)$ depende apenas de $t - t_0$. Então, a função de Melnikov $\mathcal{M}(t_0)$ é

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}(t_0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[-\frac{\partial H_1}{\partial x} \frac{\partial H_0}{\partial p} + \frac{\partial H_1}{\partial p} \frac{\partial H_0}{\partial x} \right] (t, \hat{x}_0(t), \hat{p}_0(t)) dt \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[-\frac{\partial H_1}{\partial x} \frac{d\hat{x}_0}{dt} - \frac{\partial H_1}{\partial p} \frac{d\hat{p}_0}{dt} \right] (t, \hat{x}_0(t), \hat{p}_0(t)) dt \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\partial H_1}{\partial x} \frac{d\hat{x}_0}{dt_0} + \frac{\partial H_1}{\partial p} \frac{d\hat{p}_0}{dt_0} \right] (t, \hat{x}_0(t), \hat{p}_0(t)) dt = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{d\Gamma}{dt_0}.
\end{aligned}$$

Usando (17), obtemos

$$\mathcal{M}(t_0) = \frac{\pi\omega \sin(\omega t_0)}{a_0 \sinh\left(\frac{\pi\omega}{a_0-b}\right)}.$$

Então $\mathcal{M}(t_0)$ cruza 0 para $t_0 = k\pi/\omega$ (k um número inteiro). Portanto, a órbita da heteroclina existe pelo menos para ε pequeno.

O mínimo de $\Gamma(t_0)$ em (17) é obtido para $t_0 = T/2$ se $\varepsilon > 0$ e para $t_0 = 0$ se $\varepsilon < 0$. Nos dois casos, obtemos

$$C \simeq c_0 - \frac{\pi\omega|\varepsilon|}{a_0 \sinh\left(\frac{\pi\omega}{a_0-b}\right)} \quad (19)$$

para $\varepsilon \simeq 0$, conforme anunciado na introdução. Observe que (19) se assemelha à equação (4,76) de (Kamenev, 2011) obtida de um hamiltoniano ligeiramente diferente. Se ω é pequeno (T é grande), então $\omega \ll a_0$, então (19) mostra que

$$C \simeq c_0 - |\varepsilon|(1 - b/a_0), \quad (20)$$

que é independente de ω . Esta fórmula é a mesma que a obtida em (1) com $a = a_0(1 - |\varepsilon|)$:

$$\frac{b}{a_0(1 - |\varepsilon|)} - 1 - \log \frac{b}{a_0(1 - |\varepsilon|)} = \frac{b}{a_0} - 1 - \log \frac{b}{a_0} - |\varepsilon|(1 - b/a_0) + o(\varepsilon)$$

para $\varepsilon \simeq 0$. Como na “aproximação adiabática” de (Assaf et al., 2008, seção IV), espera-se que a fórmula (20) seja válida não apenas para $\varepsilon \simeq 0$, mas também desde que $\omega \ll a_0$ e que o lado direito de (20) é positivo. Porque $\sinh(x) \geq x$ para $x \geq 0$, podemos notar que o valor aproximado de C fornecido por (20) é sempre menor que o fornecido por (19).

Limite de alta frequência. Agora suponha que $\omega \gg a_0$ sempre com $\phi(t) = \cos(\omega t)$. O sistema (18) está escrito

$$\begin{aligned}
\frac{dx}{dt} &= \frac{\partial H_0}{\partial p}(x, p) + a_0\varepsilon \cos(\omega t)x(1-x)e^p \\
\frac{dp}{dt} &= -\frac{\partial H_0}{\partial x}(x, p) - a_0\varepsilon \cos(\omega t)(1-2x)(e^p - 1).
\end{aligned}$$

Com o método Kapitsa (Assaf et al., 2008, §III.B),

$$x(t) = X(t) + \xi(t), \quad p(t) = Y(t) + \eta(t),$$

onde X e Y são variáveis lentas, enquanto ξ e η são oscilações pequenas, mas rápidas. Expressões que oscilam rapidamente dão:

$$\frac{d\xi}{dt} \simeq a_0\varepsilon \cos(\omega t)X(1-X)e^Y, \quad \frac{d\eta}{dt} \simeq -a_0\varepsilon \cos(\omega t)(1-2X)(e^Y - 1).$$

Assumimos que X e Y são constantes durante uma curta oscilação, com $T = 2\pi/\omega$. Nós temos

$$\xi(t) \simeq \frac{a_0\varepsilon}{\omega} \sin(\omega t)X(1-X)e^Y, \quad \eta(t) \simeq -\frac{a_0\varepsilon}{\omega} \sin(\omega t)(1-2X)(e^Y - 1).$$

Isso sugere transformação

$$\begin{aligned}
x &= X + \frac{a_0\varepsilon}{\omega} \sin(\omega t)X(1-X)e^Y \\
p &= Y - \frac{a_0\varepsilon}{\omega} \sin(\omega t)(1-2X)(e^Y - 1) + \frac{a_0^2\varepsilon^2}{\omega^2} \Phi(t, X, Y),
\end{aligned}$$

onde $\Phi(t, X, Y)$ é escolhido para que a transformação seja quase canônica, ou seja, para que os parênteses de Poisson satisfaçam a condição

$$\{x, p\} = \frac{\partial x}{\partial X} \frac{\partial p}{\partial Y} - \frac{\partial x}{\partial Y} \frac{\partial p}{\partial X} = 1 + o(a_0^2/\omega^2). \quad (21)$$

Porque

$$\begin{aligned} \{x, p\} = & \left[1 + \frac{a_0 \varepsilon}{\omega} \sin(\omega t)(1 - 2X)e^Y \right] \left[1 - \frac{a_0 \varepsilon}{\omega} \sin(\omega t)(1 - 2X)e^Y + \frac{a_0^2 \varepsilon^2}{\omega^2} \frac{\partial \Phi}{\partial Y} \right] \\ & - \left[\frac{a_0 \varepsilon}{\omega} \sin(\omega t)X(1 - X)e^Y \right] \left[2 \frac{a_0 \varepsilon}{\omega} \sin(\omega t)(e^Y - 1) + \frac{a_0^2 \varepsilon^2}{\omega^2} \frac{\partial \Phi}{\partial X} \right], \end{aligned}$$

a condição (21) é gravada

$$\begin{aligned} \{x, p\} = & 1 - \frac{a_0^2 \varepsilon^2}{\omega^2} \sin^2(\omega t)(1 - 2X)^2 e^{2Y} + \frac{a_0^2 \varepsilon^2}{\omega^2} \frac{\partial \Phi}{\partial Y} \\ & - 2 \frac{a_0^2 \varepsilon^2}{\omega^2} \sin^2(\omega t)X(1 - X)e^Y(e^Y - 1) + o(a_0^2/\omega^2) = 1 + o(a_0^2/\omega^2). \end{aligned}$$

Então

$$\frac{\partial \Phi}{\partial Y} = \sin^2(\omega t) [(1 - 2X)^2 e^{2Y} + 2X(1 - X)e^Y(e^Y - 1)].$$

Ter $\Phi(t, X, 0) = 0$, devemos escolher

$$\Phi(t, X, Y) = \sin^2(\omega t) [(1 - 2X)^2 (e^{2Y} - 1)/2 + X(1 - X)(e^Y - 1)^2].$$

A função geradora $F_2(t, x, Y)$ dessa transformação, com

$$\frac{\partial F_2}{\partial Y} = X + o(a_0^2/\omega^2), \quad \frac{\partial F_2}{\partial x} = p + o(a_0^2/\omega^2),$$

é dado por

$$\begin{aligned} F_2(t, x, Y) = & xY - \frac{a_0 \varepsilon}{\omega} \sin(\omega t)x(1 - x)(e^Y - 1) \\ & + \frac{a_0^2 \varepsilon^2}{2\omega^2} \sin^2(\omega t)x(1 - x)(1 - 2x)(e^{2Y} - 1). \end{aligned}$$

Se $H(t, x, y) = h(t, X, Y)$, então o novo Hamiltoniano é

$$h(t, X, Y) + \frac{\partial F_2}{\partial t}.$$

Nós temos $T = 2\pi/\omega$. Tomando a média desse Hamiltoniano, a segunda expressão é cancelada porque

$$\int_0^T \frac{\partial F_2}{\partial t} dt = 0$$

e apenas o hamiltoniano eficaz permanece

$$\bar{H}(X, Y) = \frac{1}{T} \int_0^T h(t, X, Y) dt.$$

Um cálculo trabalhoso usando o fato de que $\frac{1}{T} \int_0^T \sin^2(\omega t) dt = 1/2$ leva a

$$\begin{aligned} \bar{H}(X, Y) \simeq & X(1 - e^{-Y}) \left[a_0(1 - X)e^Y - b + \frac{a_0^2 \varepsilon^2}{2\omega^2} \left\{ -a_0X(1 - X)^2 e^{2Y} + \right. \right. \\ & \left. \left. + b(1 - X)(1 - 2X)e^Y - bX(1 - X)(e^Y - 1) - b(1 - 2X)^2 \right\} \right]. \end{aligned}$$

A órbita da heteroclina perturbada é obtida impondo que o termo entre colchetes seja zero. Esta órbita conecta $(X_\varepsilon^*, 0)$ e $(0, Y_\varepsilon^*)$ com

$$X_\varepsilon^* \simeq (1 - b/a_0) \left[1 - \frac{b(a_0 - b)\varepsilon^2}{2\omega^2} \right], \quad Y_\varepsilon^* \simeq \log(b/a_0) + \frac{a_0(a_0 - b)\varepsilon^2}{2\omega^2}.$$

A ação nesta órbita de heteroclina é

$$C = \int_{X_\varepsilon^*}^0 Y dX.$$

Outro cálculo tedioso leva a

$$C \simeq c_0 - \frac{(a_0 - b)^2 \varepsilon^2}{12 \omega^2} (1 + 2b/a_0), \quad (22)$$

conforme anunciado na introdução. Porque a função $z \mapsto (1 - z)^2(1 + 2z)$ é menor que 1 no intervalo $0 < z < 1$, o termo corretivo para C é sempre menor que $\frac{a_0^2 \varepsilon^2}{12 \omega^2}$. É pequeno porque $\omega \gg a_0$ por hipótese. Como era de se esperar, uma população sujeita a um distúrbio de alta frequência depende pouco da amplitude desse distúrbio.

3. Cálculos numéricos

Multiplicadores de Floquet. λ_1 pode ser estimado diretamente calculando os multiplicadores Floquet da equação principal usando software como o Scilab, que resolve equações diferenciais ordinárias e calcula numericamente os valores próprios das matrizes. $e^{\lambda_1 T}$ é o autovalor com a segunda maior parte real, a primeira sendo 1. Podemos então plotar $-\log(-\lambda_1)$ de acordo com a N . O declive desta curva fornece um valor aproximado de C .

Órbita de heteroclina. Quanto a (Assaf et al., 2008), podemos obter a órbita que liga $(x^*(t), 0)$ e $(0, p^*(t))$ por um método de disparo. Tomamos a condição inicial $x^*(0)$ dado por (15) e um valor negativo muito pequeno para $p(0)$. Variamos esse valor até obter uma solução $(x(t), p(t))$ que tende a se tornar periódico, ou seja, com $x(t)$ perto de 0 e $p(kT)$ perto de $p^*(0)$ para k grande (mas não muito grande para evitar instabilidade numérica). Podemos então usar a integral (16) para calcular C numericamente.

A equação diferencial parcial. Também é possível calcular uma solução periódica $S^*(t, x)$ da equação de Hamilton-Jacobi (6) usando os métodos numéricos da teoria das soluções de viscosidade. Nós definimos

- Δt o passo do tempo
- Δx a etapa de discretização do espaço
- S_j^m uma aproximação de $S(m\Delta t, j\Delta x)$, em que j e m são números inteiros tais que $m \geq 0$ e $0 \leq j \leq J$ com $J = 1/\Delta x$.

Podemos usar o método de Godunov

$$\frac{S_j^{m+1} - S_j^m}{\Delta t} + \mathcal{H} \left(m\Delta t, j\Delta x, \frac{S_j^m - S_{j-1}^m}{\Delta x}, \frac{S_{j+1}^m - S_j^m}{\Delta x} \right) = 0,$$

onde o Hamiltoniano digital $\mathcal{H}(t, x, p^-, p^+)$ é dado por

$$\mathcal{H}(t, x, p^-, p^+) = \begin{cases} \min\{H(t, x, p); p^- \leq p \leq p^+\}, & p^- < p^+, \\ \max\{H(t, x, p); p^+ \leq p \leq p^-\}, & p^+ \leq p^- \end{cases}$$

(Osher e Shu, 1991). Porque $H(t, x, p)$ é convexa em relação a p , a segunda expressão envolvendo um máximo é igual a

$$\max\{H(t, x, p^+), H(t, x, p^-)\}.$$

Quanto à primeira expressão envolvendo um mínimo, observe com (14) que $H(t, x, p)$ tem um mínimo em relação a p se $\frac{\partial H}{\partial p} = 0$, ou seja, se

$$p = p^\# = \frac{1}{2} \log \frac{b}{a(t)(1-x)}.$$

Então

$$\min\{H(t, x, p); p^- \leq p \leq p^+\} = \begin{cases} H(t, x, p^+), & p^- < p^+ \leq p^\#, \\ H(t, x, p^-), & p^\# \leq p^- < p^+, \\ H(t, x, p^\#), & p^- \leq p^\# \leq p^+. \end{cases}$$

Para as condições nas bordas, tomamos

$$S_0^m = 0, \quad (S_J^m - S_{J-1}^m)/\Delta x = K$$

com um valor muito alto para K . O passo do tempo Δt deve ser pequeno o suficiente em comparação com Δx para que a condição de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) seja atendida. Como condição inicial, tomamos

$$S(0, x) = x \log(b/a_0) + x + (1 - x) \log(1 - x),$$

isto é, a solução estacionária regular quando $a(t)$ é substituído por seu tempo médio. Também podemos escolher uma função constante $S(0, x) = \sigma$ com σ bastante negativo, mas a convergência para o regime periódico é então mais lenta. A constante σ deve ser negativa o suficiente para evitar o problema de não exclusividade já mencionado na seção 2. Quando a solução do problema não estacionário atingir um regime periódico, podemos estimar

$$C = \min_t S^*(t, 0^+) - \min_{t,x} S^*(t, x).$$

Método de Monte-Carlo. O tempo médio de extinção também pode ser estimado pelo método de Monte-Carlo. Nós calculamos a média das simulações estocásticas. Observe, no entanto, que o algoritmo de Gillespie aproveitando os tempos de espera exponencialmente distribuídos não pode ser usado porque $a(t)$ é periódico. Se N aumentar, o tempo de extinção pode se tornar astronômico. Nenhum resultado é apresentado usando este método.

Exemplos. Assumimos

$$a(t) = a_0(1 + \varepsilon \cos(2\pi t/T))$$

com $T = 1$ semana. Vamos primeiro considerar o caso em que $a_0 = 20$ por semana e $b = 5$ por semana. A duração média da infecção é $1/b = 1,4$ dias. Então $R_0 = a_0/b = 4 > 1$ e $c_0 = b/a_0 - 1 - \log(b/a_0) \simeq 0,636$. A figura 1 mostra $-\log(-\lambda_1)$ em função de N para $\varepsilon \in \{0, 2; 0, 5; 0, 8\}$ e $N = 10, 20, \dots, 60$, calculado usando os multiplicadores Floquet. As linhas correspondem a uma regressão linear dos últimos 3 pontos $N = 40, 50, 60$. As inclinações dessas linhas, que são estimativas de C , são 0,524, 0,364 e 0,225 para $\varepsilon = 0, 2, 0, 5$ e 0,8.

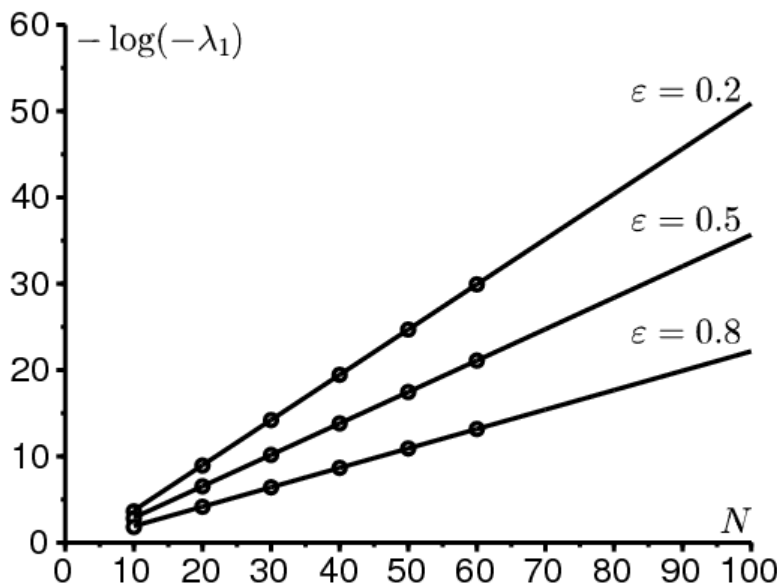


Figura 1. Cálculo dos multiplicadores de Floquet da equação mestre: $-\log(-\lambda_1)$ em função de N para $\varepsilon \in \{0, 2; 0, 5; 0, 8\}$ e $N = 10, 20, \dots, 60$. O número C é a inclinação dessas linhas. Valores dos parâmetros: $T = 1$, $a_0 = 20$, $b = 5$.

a_0 e $\omega = 2\pi/T$ são da mesma ordem de magnitude neste exemplo. É um caso intermediário para frequência. Portanto, esperamos que (19) forneça uma boa aproximação para C quando ε for pequeno. A Figura 2 mostra as seguintes curvas em função de ε para $0 \leq \varepsilon \leq 1$:

- uma linha sólida para C usando a órbita da heteroclina
- linhas pontilhadas longas para C usando a equação diferencial parcial com $\Delta x = 0,002$ e $\Delta t = 0,0002$ (quase indistinguível)
- três pontos representando os valores de C obtidos na figura 1
- linhas pontilhadas curtas para a fórmula aproximada (19)
- linhas pontilhadas longas e curtas, para a aproximação (20) com baixa frequência.

Podemos ver que a fórmula aproximada (19) é próxima de C , mesmo quando ε é apenas moderadamente pequeno.

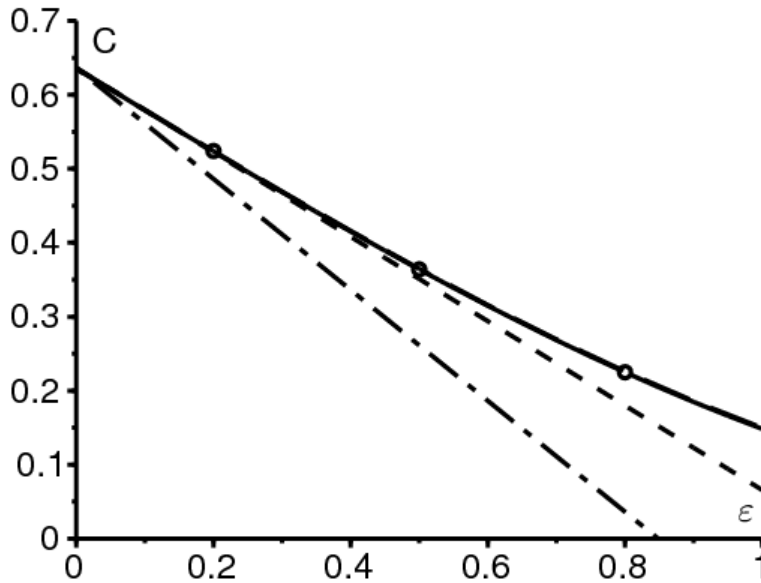


Figura 2. Frequência intermediária: o número C calculado usando a órbita da heteroclina [linha sólida] ou a equação diferencial parcial [linhas pontilhadas longas] (as duas linhas quase não podem ser distinguidas), os multiplicadores Floquet como no figura 1 [pontos], a fórmula aproximada (19) [linhas pontilhadas curtas] e a fórmula de baixa frequência (20) [linhas pontilhadas longas e curtas], dependendo de ε . Mesmos valores de parâmetro que na figura 1.

A Figura 3 mostra uma solução periódica $S^*(t, x)$ da equação de Hamilton-Jacobi, plotada em função de x para diferentes valores de t , quando $\varepsilon = 0,5$. Observe a descontinuidade da solução em $x = 0$. Zoom perto de $x = 0$ mostraria que $S^*(t, 0^+)$ é realmente periódico no tempo, então a condição de contorno $S^*(t, 0) = 0$ só pode ser satisfeito em um sentido fraco.

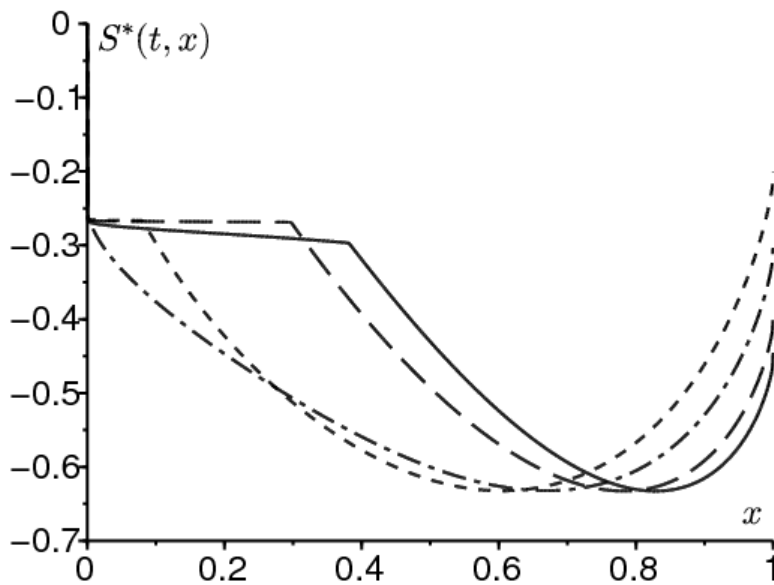


Figura 3. Uma solução periódica $S^*(t, x)$ da equação de Hamilton-Jacobi, plotada em função de x para $t = 0$ (linha sólida), $t = T/4$ (linhas pontilhadas longas), $t = T/2$ (linhas pontilhadas curtas) e $t = 3T/4$ (linhas pontilhadas longas e curtas). Os mesmos valores de parâmetro da Figura 1 e $\varepsilon = 0,5$.

A Figura 4 considera um exemplo de alta frequência: $a_0 = 2$ por semana e $b = 1$ por semana. Então $R_0 = 2$ e $c_0 \simeq 0,1931$. Neste caso $\omega \simeq 6,28$ por semana é um pouco maior do que a_0 . Para $0 \leq \varepsilon \leq 1$, o número C é calculado usando a órbita da heteroclina e a fórmula de alta frequência (22). O acordo é bom em toda a faixa de valores. Finalmente, a Figura 5 mostra a órbita conectando $(x^*(t), 0)$ e $(0, p^*(t))$ para os mesmos valores de parâmetro com $\varepsilon = 0,1$.

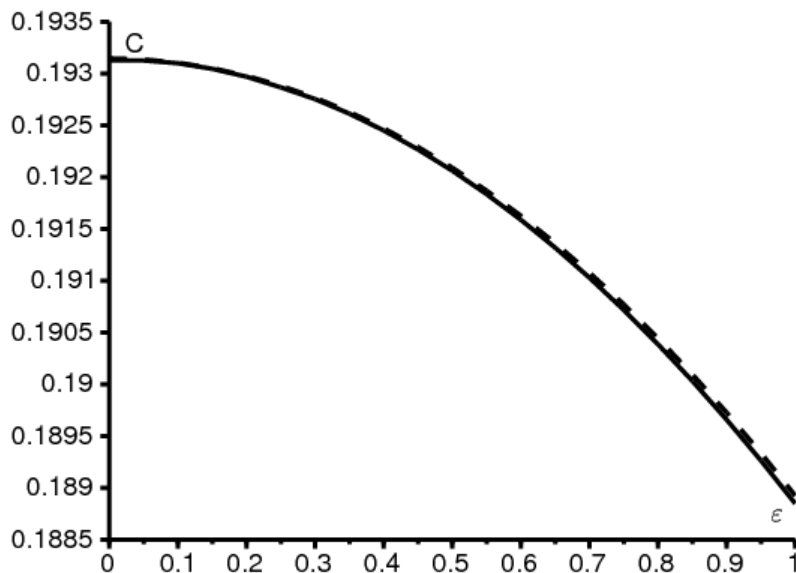


Figura 4. Regime de alta frequência: C calculado usando a órbita da heteroclina [linha sólida] e a fórmula de alta frequência (22) [linha pontilhada] como uma função de ε . Valores dos parâmetros: $T = 1$, $a_0 = 2$, $b = 1$.

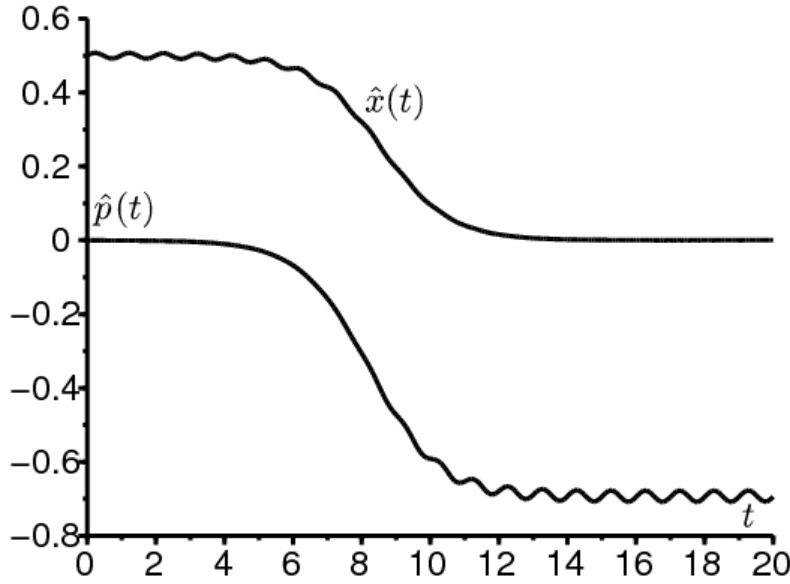


Figura 5. Os componentes $t \mapsto \hat{x}(t)$ e $t \mapsto \hat{p}(t)$ da órbita da heteroclina conectando as duas soluções periódicas $(0, p^*(t))$ e $(x^*(t), 0)$. Os mesmos valores de parâmetro da Figura 4 e $\varepsilon = 0,1$.

4. Notas

- Estimativas mais precisas podem ser obtidas com a solução refinada de BKW

$$\pi_n(t) \simeq e^{-N S_0(t, n/N) - S_1(t, n/N)}.$$

Ao inserir

$$\pi_{n+1}(t) \simeq e^{-N S_0(t, n/N) - \frac{\partial S_0}{\partial x}(t, n/N) - \frac{1}{2N} \frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2}(t, n/N) - S_1(t, n/N) - \frac{1}{N} \frac{\partial S_1}{\partial x}(t, n/N)}$$

e uma expressão semelhante para $\pi_{n-1}(t)$ em (8), e separando os termos de maior grau, obtemos a equação de Hamilton-Jacobi (10) para $S_0(t, x)$ e a equação de transporte

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_1}{\partial t} + \left[a(t)x(1-x)e^{\frac{\partial S_0}{\partial x}} - bxe^{-\frac{\partial S_0}{\partial x}} \right] \frac{\partial S_1}{\partial x} \\ = a(t)e^{\frac{\partial S_0}{\partial x}} \left[1 - 2x + \frac{x(1-x)}{2} \frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2} \right] + be^{-\frac{\partial S_0}{\partial x}} \left[-1 + \frac{x}{2} \frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2} \right] \end{aligned}$$

para $S_1(t, x)$. Se $a(t)$ é periódico, então $S_0(t, x)$ e $S_1(t, x)$ deve ser calculado numericamente. Se $a(t) = a$ é constante, então o fator pré-exponencial para λ_1 é obtido pelo método de expansões assintóticas conectadas, como segue (Assaf e Meerson, 2010). Primeiro $S_0(x)$ é dado por (3) e a equação para $S_1(x)$ leva a

$$S_1(x) = \log(x\sqrt{1-x}) + \text{const.}$$

Então

$$\pi_n \simeq \kappa \frac{e^{-NS_0(n/N)}}{\frac{n}{N} \sqrt{1 - \frac{n}{N}}}$$

por uma constante κ . Se n for pequeno,

$$\pi_n \simeq \frac{\kappa N}{n} e^{-NS_0(0) - nS_0'(0)} = \frac{\kappa N}{n} e^{-NS_0(0)} \left(\frac{a}{b} \right)^n. \quad (23)$$

Para o sistema (8), também podemos usar a aproximação

$$a(n-1)\pi_{n-1} - n(a+b)\pi_n + b(n+1)\pi_{n+1} \simeq 0, \quad n \geq 1.$$

Então

$$\pi_n \simeq \frac{\pi_1}{n} \frac{1 - (a/b)^n}{1 - a/b} \sim \frac{\pi_1}{n} \frac{(a/b)^n}{a/b - 1}.$$

Isso coincide com (23) somente se $\pi_1 \simeq \kappa N e^{-NS_0(0)} \left(\frac{a}{b} - 1\right)$. Finalmente (9) dá

$$\lambda_1 \simeq \frac{-b\pi_1/(\kappa N)}{\int_0^1 \frac{e^{-NS_0(x)}}{x\sqrt{1-x}} dx} \simeq \frac{(b-a)x^*\sqrt{1-x^*}\sqrt{NS_0''(x^*)}}{e^{N[S_0(0)-S_0(x^*)]}\sqrt{2\pi}} = -\frac{(a-b)^2}{a e^{cN}} \sqrt{\frac{N}{2\pi}}$$

(Assaf e Meerson, 2010, equação (71)). Se por exemplo $a = 20$, $b = 5$ e $N = 50$, então essa estimativa é apenas 2% acima do valor de λ_1 obtido com o software que calcula os autovalores de matrizes grandes como na figura 1. O método de expansões assintóticas conectadas provavelmente pode ser estendido ao caso periódico, mas é improvável que leve a uma fórmula explícita.

- Let Ser a função geradora

$$\phi(t, z) = \sum_{n=0}^N P_n(t) z^n$$

com $0 \leq z \leq 1$. Então $\phi(t, 1) = 1$ para todos t . Um cálculo simples a partir de (7) mostra que

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = (1-z) \left(b + \frac{a(t)z}{N} - a(t)z \right) \frac{\partial \phi}{\partial z} + \frac{a(t)}{N} z^2 (1-z) \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2}$$

para $0 < z < 1$. No regime quase-estacionário, espera-se que

$$\phi(t, z) \simeq 1 + e^{\lambda_1 t} \psi(t, z)$$

com $\psi(t, z)$ periódico em t , $\psi(t, 1) = 0$ e

$$\lambda_1 \psi + \frac{\partial \psi}{\partial t} = (1-z) \left(b + \frac{a(t)z}{N} - a(t)z \right) \frac{\partial \psi}{\partial z} + \frac{a(t)}{N} z^2 (1-z) \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}.$$

Então λ_1 também é o maior autovalor diferente de zero desse problema parabólico. Essa poderia ser uma maneira de demonstrar com mais rigor os resultados assintóticos para o N grande.

- Com $P_n(t) = \mathcal{P}(t, x)$ onde $x = n/N$ e realizando uma expansão de Taylor para a ordem 2 da equação principal (7), obtemos a equação de Fokker-Planck ou a equação de difusão

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[(a(t)x(1-x) - bx) \mathcal{P} \right] + \frac{1}{2N} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[(a(t)x(1-x) + bx) \mathcal{P} \right].$$

Da mesma forma para o tempo médio de extinção $\tau_n(t) = \tau(t, x)$ onde $x = n/N$, (13) leva ao problema associado

$$-1 = \frac{\partial \tau}{\partial t} + (a(t)x(1-x) - bx) \frac{\partial \tau}{\partial x} + \frac{1}{2N} (a(t)x(1-x) + bx) \frac{\partial^2 \tau}{\partial x^2}.$$

No entanto, já sabemos no caso de coeficientes independentes de tempo que essas equações normalmente não dão o valor correto de C (Doering et al., 2005). O valor só tende a estar correto se R_0 está perto de 1. O mesmo problema aparece em outros modelos epidêmicos. Por exemplo (Diekmann et al., 2012, p. 112-113) usa uma aproximação de difusão para estimar C em um modelo SIR, apesar do fato de que $R_0 \simeq 10$ em sua aplicação digital. Para uma análise BKW do modelo estocástico de SIR, consulte (Kamenev e Meerson, 2008).

- O número $1/C$ pode ser chamado de tamanho crítico da comunidade (Diekmann et al., 2012).

Apêndice

Vamos mostrar que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\lambda u} \frac{e^u}{(1+e^u)^2} du = \frac{\pi\lambda}{\sinh(\pi\lambda)}.$$

Primeiro $e^u/(1+e^u)^2 = 1/(4 \cosh^2(u/2))$ é uma função par. Isso combinado com a integração por partes mostra que

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\lambda u} \frac{e^u}{(1+e^u)^2} du &= 2 \int_0^{+\infty} \cos(\lambda u) \frac{e^u}{(1+e^u)^2} du \\ &= 2 \left[\frac{-\cos(\lambda u)}{1+e^u} \right]_0^{\infty} - 2 \int_0^{\infty} \frac{\lambda \sin(\lambda u)}{1+e^u} du \\ &= 1 - 2\lambda \int_0^{\infty} \frac{e^{-u} \sin(\lambda u)}{1+e^{-u}} du. \end{aligned}$$

Desenvolvendo $1/(1+e^{-u})$ em séries de potência, obtemos

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\lambda u} \frac{e^u}{(1+e^u)^2} du &= 1 - 2\lambda \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^{\infty} e^{-(n+1)u} \sin(\lambda u) du \\ &= 1 + 2\lambda^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{\lambda^2 + (n+1)^2}. \end{aligned}$$

A soma desta série pode ser calculada com a fórmula de Euler

$$\frac{1}{\sin z} = \frac{1}{z} + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{2z}{z^2 - n^2\pi^2},$$

o que é verdade para qualquer número complexo z com $z \neq n\pi$ (n inteiro). Tomamos $z = i\pi\lambda$. Porque $\sin(i\pi\lambda) = i \sinh(\pi\lambda)$, nós obtemos

$$\frac{\pi\lambda}{\sinh(\pi\lambda)} = 1 + 2\lambda^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\lambda^2 + n^2}$$

e o resultado segue.

Agradecimentos

Este artigo foi estimulado por uma discussão com Hans Metz sobre o tamanho efetivo da população em um ambiente periódico durante uma conferência sobre modelos estocásticos em ecologia, evolução e genética em Angers, em dezembro de 2013.

Referências

- Andersson H, Djehiche B (1998) A threshold limit theorem for the stochastic logistic epidemic. *J Appl Probab* 35 : 662–670
- Aronsson G, Kellogg RB (1978) On a differential equation arising from compartmental analysis. *Math Biosci* 38 : 113–122
- Assaf M, Kamenev A, Meerson B (2008) Population extinction in a time-modulated environment. *Phys Rev E* 78 : 041123
- Assaf M, Meerson B (2010) Extinction of metastable stochastic populations. *Phys Rev E* 81 : 021116
- Bacaër N, Ait Dads E (2012) On the biological interpretation of a definition for the parameter R_0 in periodic population models. *J Math Biol* 65 : 601–621
- Barles G (1994) *Solutions de viscosité des équations de Hamilton–Jacobi*. Springer, Berlin
- Barles G, Perthame B (1988) Exit time problems in optimal control and vanishing viscosity method. *SIAM J Control Optim* 26 : 1133–1148
- Billings L, Mier-y-Teran-Romero L, Lindley B, Schwartz IB (2013) Intervention-based stochastic disease eradication. *PLoS ONE* 8(8) : e70211
- Diekmann O, Heesterbeek H, Britton T (2012) *Mathematical tools for understanding infectious disease dynamics*. Princeton University Press, Princeton
- Doering CR, Sargsyan KV, Sander LM (2005) Extinction times for birth–death processes : exact results, continuum asymptotics, and the failure of the Fokker–Planck approximation. *Multiscale Model Simul* 3 : 283–299

- Escudero C, Rodríguez JA (2008)
Persistence of instanton connections in chemical reactions with time– dependent rates.
Phys Rev E 77 : 011130
- Hethcote H (1973) Asymptotic behavior in a deterministic epidemic model. Bull Math Biol 35 : 607– 614
- Kamenev A (2011) Field theory of non– equilibrium systems. Cambridge University Press, Cambridge
- Kamenev A, Meerson B (2008) Extinction of an infectious disease :
a large fluctuation in a nonequilibrium system. Phys Rev E 77 : 061107
- Mitake H (2009)
Large time behavior of solutions of Hamilton– Jacobi equations with periodic boundary data.
Nonlinear Anal 71 : 5392– 5405
- Nasell I (2011) Extinction and quasi– stationarity in the stochastic logistic SIS model. Springer, Berlin
- Osher S, Shu CW (1991) High– order essentially nonoscillatory schemes for Hamilton– Jacobi equations.
SIAM J Numer Anal 28 : 907– 922
- Ovaskainen O, Meerson B (2010) Stochastic models of population extinction.
Trends Ecol Evol 25 : 643– 652
- Rabinowitz PH (1994) Heteroclinics for a reversible Hamiltonian system.
Ergod Theor Dyn Syst 14 : 817– 829
- Roquejoffre JM (2001)
Convergence to steady states or periodic solutions in a class of Hamilton– Jacobi equations.
J Math Pures Appl 80 : 85– 104
- Soner HM (1986) Optimal control with state– space constraint I. SIAM J Control Optim 24 : 552– 561