

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA  
PROGRAMA INTERINSTITUCIONAL DE PÓS GRADUAÇÃO EM  
ESTATÍSTICA UFSCar-USP**

**Carlos Eduardo Hirth Pimentel**

**Análise teórica e computacional de processos  
estocásticos inspirados em sistemas biológicos.**

**São Carlos  
Janeiro de 2020**



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA  
PROGRAMA INTERINSTITUCIONAL DE PÓS GRADUAÇÃO EM  
ESTATÍSTICA UFSCar-USP**

**Carlos Eduardo Hirth Pimentel**

**Análise teórica e computacional de processos  
estocásticos inspirados em sistemas biológicos.**

**Tese apresentada ao Departamento de Estatística - DEs/UFSCar e ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - ICMC/USP, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Estatística - Programa Interinstitucional de Pós-Graduação em Estatística.**

**Orientador: Prof. Dr. Pablo Martin Rodriguez**

**Versão revisada**

**São Carlos**

**Janeiro de 2020**



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA  
PROGRAMA INTERINSTITUCIONAL DE PÓS GRADUAÇÃO EM  
ESTATÍSTICA UFSCar-USP**

**Carlos Eduardo Hirth Pimentel**

**Theoretical and computational analysis of stochastic  
processes inspired by biological systems**

**Thesis submitted to the Departamento de Estatística - DEs/UFSCar and to the Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - ICMC/USP, in partial fulfillment of the requirements for the degree of the Doctor in Statistics - Joint Graduate Program in Statistics.**

**Supervisor: Prof. Dr. Pablo Martin Rodriguez**

**Final version**

**São Carlos**

**Janeiro de 2020**





# UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

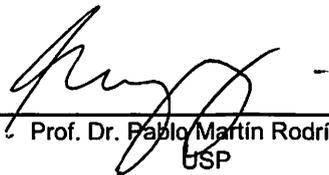
Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia  
Programa Interinstitucional de Pós-Graduação em Estatística

---

## Folha de Aprovação

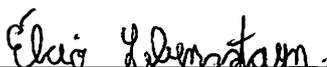
---

Assinaturas dos membros da comissão examinadora que avaliou e aprovou a Defesa de Tese de Doutorado do candidato Carlos Eduardo Hirth Pimentel, realizada em 06/01/2020:



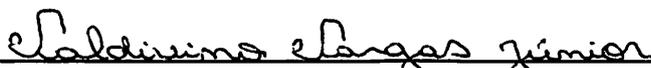
---

Prof. Dr. Pablo Martín Rodríguez  
USP



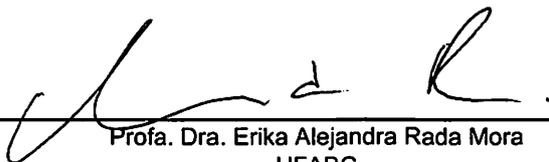
---

Prof. Dr. Elcio Lebensztayn  
UNICAMP



---

Prof. Dr. Valdivino Vargas Júnior  
UFG



---

Profa. Dra. Erika Alejandra Rada Mora  
UFABC



---

Profa. Dra. Carolina Bueno Grejo



*Este trabalho é dedicado a minha mãe Margarete B. E. Hirth Pimentel e aos meus sobrinhos Leonardo, Thiago e Mateus, em memória de: Virgínia Hirth Pimentel, Tiago Alves Pimentel, Teresa Cristina Hirth Pimentel e Miguel Angelo Hirth Pimentel*



## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço a todos que de alguma forma contribuíram para esse trabalho, para os professores por minha formação e aos colegas de doutorado pela troca de conhecimento e camaradagem.

À toda minha família, e em especial à minha mãe, Margarete Babetta Elisabeth Hirth Pimentel, por me incentivar, me educar e ensinar o valor do respeito a todos independentemente de origem, crença, raça ou classe social. À memória de Georg Ludwig Hirth, Senta Möedebeck Hirth, Virginia Hirth Pimentel, Tiago Alves Pimentel, Joana Alves Pimentel, Teresa Cristina Hirth Pimentel, Miguel Ângelo Hirth Pimentel e a todos os nossos ancestrais.

Aos meus grandes amigos por todos os momentos alegres e tristes, que sempre me deram força para concluir essa longa e árdua tarefa e em particular a Luciana Ribeiro Barbeiro.

Agradeço em especial à professora Catalina Rua e ao professor Elcio Lebenszteyn pelas discussões e importantes contribuições neste trabalho e também a todo o suporte institucional dado pela USP e UFSCar.

Ao professor Pablo Martin Rodriguez, meu orientador, por me incentivar, apoiar e guiar com sabedoria meu foco de estudo nesta tese de doutorado.

Parte deste trabalho foi desenvolvido durante uma visita de colaboração científica ao Instituto de matemática da Universidad de Antioquia. Agradeço a esta instituição pela hospitalidade e em especial ao professor Leon Alexander Valencia pelas valiosas colaborações científicas.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código Financeiro 001.



*"A desilusão fundamental da humanidade é supor que  
Eu estou aqui e você está lá fora."  
Yasutani Roshi*



## RESUMO

PIMENTEL, C. E. H. **Análise teórica e computacional de processos estocásticos inspirados em sistemas biológicos.** 104p. Tese (Doutorado em Estatística) - UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS, São Carlos, Janeiro de 2020.

O objetivo deste trabalho é apresentar alguns resultados por meio de duas técnicas baseadas na análise teórica e computacional de processos a tempo contínuo inspirados em sistemas biológicos, cuja dinâmica é influenciada pela natureza estocástica de seus entes constituintes.

Na primeira parte, estudamos um sistema de partículas denominado de modelo dos sapos (MS), no qual existem dois tipos de partículas: as inativas e as ativas, de forma que, cada partícula ativa executa um passeio aleatório, percorrendo um grafo finito  $\mathcal{G}_n$ . Entre as quantidades de interesse temos, as proporções de cada estado possível ao longo do tempo e a proporção final de vértices visitados ou não, por partículas ativas. Nesta parte da tese, procuramos a informação sobre estas quantidades para diferentes grafos finitos. A efetividade desse modelo foi analisada por meio das três seguintes abordagens: Método das cadeias de Markov dependentes da densidade (CMDDD), abordagem das aproximações via campo médio (ACM) e as simulações computacionais (SC). Nos dois primeiros casos, foram determinados os seus sistemas de equações das quantidades no limite determinístico. Essas abordagens foram avaliadas nos grafos completos  $\mathcal{K}_n$ , bipartidos completos  $\mathcal{K}_{n_1, n_2}$ , e nos grafos cíclicos  $C_{n,c}$ . Os resultados comparativos obtidos sugerem uma relação entre a densidade do grafo e o desempenho das abordagens para a modelagem do MS. As avaliações dos resultados indicam que, no caso de grafos considerados densamente conectados as três abordagens são adequadas para o modelo. Para os casos considerados esparsos, a abordagem SC se apresentou como a mais indicada para o MS.

Na Parte II, considera-se um modelo baseado em equações diferenciais estocásticas aplicado um sistema ecológico constituído por um predador especializado em caçar um tipo de presa, apenas no seu estágio adulto. Paralelamente a isto, supomos que a taxa de mortalidade do predador é afetada por uma aleatoriedade do meio ambiente. Discutimos sobre a influência desta premissa no comportamento dinâmico do modelo através de uma análise teórica e computacional e mostramos que as equações diferenciais estocásticas fornecem um modelo mais adequado a este sistema.

**Palavras-chave:** Cadeia de Markov a tempo contínuo. Modelo dos sapos. Modelo predador-presa. Sistemas complexos. Aproximação via campo médio.



## ABSTRACT

PIMENTEL, C. E. H. **Theoretical and computational analysis of stochastic processes inspired by biological systems.** 104p. Thesis (Doctorate in Statistics) - UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS, São Carlos, Janeiro de 2020.

The aim of this work is to present two methodologies based on the theoretical and computational analysis of continuous time stochastic processes inspired by biological systems, whose dynamics are influenced by the stochastic nature of their constituent entities.

In the first part, we studied a particle system called the frog model (MS), in which there are two types of particles: the inactive and the active, so that each active particle runs a random walk, running through a finite graph  $\mathcal{G}_n$ . Among the quantities of interest we have the proportions of each possible state over time and the final proportion of vertices visited or not visited by active particles. In this part of the thesis, we look for information about this proportion for different finite graphs. The effectiveness of the modeling techniques were analyzed using the following three approaches: Density-dependent Markov chains method (CMDD), approaching the mean field approaches (ACM) and computer simulations (SC). In the first two theoretical cases, their systems of equations were also obtained at a deterministic limit. These approaches were evaluated for the complete graphs  $\mathcal{K}_n$ , complete bipartite graphs  $\mathcal{K}_{n_1, n_2}$ , and for the cyclic graphs  $C_{n, c}$ . The comparative results suggest a relationship between the density of the graph and the performance of the approaches in the MS and in this case, indicate that the three approaches are suitable for the M.S. for densely connected graphs. For cases considered sparse, the computational approach SC was presented as the most indicated.

In the Part II, a model based on stochastic differential equations is applied, using an ecological system consisting of a predator specialized in hunting a type of prey, only in its adult stage. Parallel to this, we assume that the predator's mortality rate is affected by a randomness of the environment. We discuss the influence of this premise on the dynamic behavior of the model through a theoretical and computational analysis and show that the stochastic differential equations provide a more adequate model for this system.

**Keywords:** Continuous time Markov chain. Frog model. Predator-Prey models. Complex Systems. Mean-Field approximations.



## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

<p>Figura 1 – Exemplo da dinâmica do modelo dos sapos em um grafo finito. Os vértices vazios são marcados com um <math>X</math> e vértices marcados com <math>(\odot)</math> representam partículas ativas. As partículas inativas são representadas por vértices marcados com <math>(\ominus)</math>. Da esquerda para a direita e de cima para baixo vemos a evolução em <math>k = 6</math> estágios do processo, iniciado com uma partícula ativa e finalizando com uma cobertura de 50% dos vértices visitados. . . . .</p>	27
<p>Figura 2 – Grafo completo com 16 vértices . . . . .</p>	33
<p>Figura 3 – Evolução das soluções do sistema limite do modelo dos sapos para um grafo completo. A linha azul representa a dinâmica de <math>x(t)</math>, em amarelo <math>y(t)</math>, em verde <math>z(t)</math> e em vermelho <math>w(t)</math>. Gráfico com valores iniciais <math>x(0) = 0,99</math>, <math>y(0) = 0</math>, <math>z(0) = 0,01</math> e <math>w(0) = 0</math>. . . . .</p>	36
<p>Figura 4 – Solução para a probabilidade limite <math>x(\infty)</math> . . . . .</p>	38
<p>Figura 5 – Grafo bipartido completo <math>K_{n_1, n_2}</math> com <math>n_1 = 3</math> e <math>n_2 = 5</math> . . . . .</p>	40
<p>Figura 6 – As curvas da esquerda para a direita representam respectivamente a função <math>f_1(x)</math> com parâmetro de partição <math>\theta = 0,4</math>, <math>\theta = 0,5</math> e <math>\theta = 0,6</math> . . . . .</p>	44
<p>Figura 7 – Solução das EDOs do MS no gráfico bipartido completo, obtidas via método dependente da densidade com <math>n_1 = 8000</math> e <math>n_2 = 2000</math> . . . . .</p>	45
<p>Figura 8 – Proporção de vértices não visitados <math>x_{1,\infty}</math> do grafo bipartido em função do parâmetro <math>\theta</math>. . . . .</p>	46
<p>Figura 9 – Gráfico das soluções numéricas das soma das raízes de <math>x(\infty) = x_{1,\infty} + x_{2,\infty}</math> em função do parâmetro de partição: <math>\theta</math>. . . . .</p>	47
<p>Figura 10 – Comparação entre os resultados para os estados Inativos - ("Ina"), Vagos - ("Vag"), contendo "1" partícula ativa - ("1S") e com "2" partículas - ("2S") do método das CMDDs (em linhas tracejadas) em relação aos valores simulados (em linhas grossas) do modelo dos sapos percorrendo três diferente grafos bipartidos completos (BP) com <math>n = 10.000</math> e <math>\theta = 0,1</math> para o primeiro caso (Figura 10.1). com <math>\theta = 0,2</math> (Figura 10.2) e por ultimo <math>\theta = 0,5</math> (Figura 10.3) . . . . .</p>	64
<p>Figura 11 – Grafo cíclico <math>C_{n,c}</math> com <math>c = 4</math> e 10 vértices. . . . .</p>	65
<p>Figura 12 – Aproximação de campo médio do modelo dos sapos em <math>C_{n,c}</math> para <math>n = 1000</math> e diferentes valores de <math>c</math>. . . . .</p>	66
<p>Figura 13 – Solução computacional (linhas grossas) comparadas com aproximações via campo médio (linhas finas) do modelo dos sapos em <math>C_{n,c}</math> para <math>n = 100</math> para diferentes valores de <math>c</math>. . . . .</p>	67

Figura 14 – Solução computacional (linhas grossas) comparadas com aproximações via campo médio (linhas finas) do modelo dos sapos em $C_{n,c}$ para $n = 1000$ e diferentes valores do parâmetro $c$ . . . . .	68
Figura 15 – Médias de 100 simulações para $\bar{x}_\infty$ (Leg: Mxinf) e $\bar{y}_\infty$ (Leg: Myinf) Modelo dos sapos percorrendo um grafo do tipo cíclico com $c = 2k$ elos vizinhos, variando o valor de $c$ de 4 a 200 e $n = 1000$ vértices. . . . .	69
Figura 16 – Médias de 500 simulações para $\bar{x}_\infty$ (Leg: Mxinf100, Mxinf1000 ) e $\bar{y}_\infty$ (Leg: Myinf100, Myinf1000) Modelo dos sapos percorrendo um grafo do tipo cíclico com $c = 2k$ elos vizinhos, variando o valor de $c$ de 2 em 2 para grafos com $n = 100$ e $n = 1000$ vértices. . . . .	70
Figura 17 – Diagrama de bifurcação entre a densidade de presas jovens $x_1$ no equilíbrio em função da taxa de mortalidade do predador $\mu_3$ conforme equação 7.15. Os três pontos em destaque são os pontos críticos Pb1,Pb2 e Pb3 que delimitam as regiões A,B,C e D . . . . .	85
Figura 18 – Gráficos para uma realização do processo da dinâmica populacional do sistema para o cenário <b>A</b> . Linhas coloridas (e mais largas) representam os resultados do modelo estocástico 7.3, as linhas pretas (e mais finas) para o caso determinístico. As presas jovens $x_1(t)$ , presas adultas $x_2(t)$ e os predadores $x_3(t)$ são representados por tipos de linhas distintas conforme a legenda . . . . .	89
Figura 19 – Gráficos para uma realização do processo da dinâmica populacional do sistema para o cenário <b>B</b> . Linhas coloridas (e mais largas) representam os resultados do modelo estocástico 7.3, as linhas pretas (e mais finas) para o caso determinístico. As presas jovens $x_1(t)$ , presas adultas $x_2(t)$ e os predadores $x_3(t)$ são representados por tipos de linhas distintas conforme a legenda . . . . .	90
Figura 20 – Gráficos para uma realização do processo da dinâmica populacional do sistema para o cenário <b>C</b> . Linhas coloridas (e mais largas) representam os resultados do modelo estocástico 7.3, as linhas pretas (e mais finas) para o caso determinístico. As presas jovens $x_1(t)$ , presas adultas $x_2(t)$ e os predadores $x_3(t)$ são representados por tipos de linhas distintas conforme a legenda . . . . .	91
Figura 21 – Gráficos para uma realização do processo da dinâmica populacional do sistema para o cenário <b>D</b> . Linhas coloridas (e mais largas) representam os resultados do modelo estocástico 7.3, as linhas pretas (e mais finas) para o caso determinístico. As presas jovens $x_1(t)$ , presas adultas $x_2(t)$ e os predadores $x_3(t)$ são representados por tipos de linhas distintas conforme a legenda . . . . .	92

## SUMÁRIO

	<b>Lista de ilustrações</b> . . . . .	<b>17</b>
<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> . . . . .	<b>21</b>
<b>1.1</b>	<b>Organização da tese</b> . . . . .	<b>22</b>
<b>I</b>	<b>MODELO DOS SAPOS EM GRAFOS FINITOS</b>	<b>25</b>
<b>2</b>	<b>INTRODUÇÃO AO MODELO DOS SAPOS</b> . . . . .	<b>27</b>
<b>2.1</b>	<b>Modelo dos sapos: um resumo do estado da arte</b> . . . . .	<b>29</b>
<b>2.2</b>	<b>Definições básicas</b> . . . . .	<b>31</b>
<b>3</b>	<b>MÉTODO DAS CADEIAS DE MARKOV DEPENDENTES DA DENSIDADE</b> . . . . .	<b>33</b>
<b>3.1</b>	<b>Teoremas limite no grafo completo</b> . . . . .	<b>33</b>
<b>3.1.1</b>	Convergência para um sistema de equações diferenciais ordinárias . . . . .	<b>34</b>
<b>3.2</b>	<b>Proporções limite no grafo completo</b> . . . . .	<b>36</b>
<b>3.3</b>	<b>Proporções limite no grafo bipartido completo</b> . . . . .	<b>39</b>
<b>3.4</b>	<b>Discussão de resultados</b> . . . . .	<b>44</b>
<b>3.4.1</b>	Existência da solução . . . . .	<b>45</b>
<b>4</b>	<b>MÉTODO DE APROXIMAÇÃO POR CAMPO MÉDIO</b> . . . . .	<b>49</b>
<b>4.1</b>	<b>Modelo geral das aproximações para grafos finitos</b> . . . . .	<b>49</b>
<b>4.1.1</b>	Redução ao grafo completo . . . . .	<b>53</b>
<b>4.2</b>	<b>Programas para o cálculo numérico da aproximação via campo médio</b>	<b>53</b>
<b>5</b>	<b>SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS PARA O MODELO DOS SAPOS NUM GRAFO FINITO</b> . . . . .	<b>57</b>
<b>5.1</b>	<b>Programa Simulação do processo estocástico dos sapos</b> . . . . .	<b>57</b>
<b>6</b>	<b>COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DO MODELO DOS SAPOS VIA SIMULAÇÃO E MÉTODO DA APROXIMAÇÃO</b> . . . . .	<b>63</b>
<b>6.1</b>	<b>Grafo bipartido completo</b> . . . . .	<b>63</b>
<b>6.2</b>	<b>Grafo <math>2k</math> cíclico</b> . . . . .	<b>65</b>
<b>6.2.1</b>	Simulações computacionais no grafo $2k$ cíclico . . . . .	<b>68</b>
<b>6.3</b>	<b>Relação entre a densidade do grafo e a adequação da abordagem via campo médio para o modelo dos sapos</b> . . . . .	<b>69</b>
<b>6.4</b>	<b>Conclusões-Modelo dos sapos em grafos finitos</b> . . . . .	<b>71</b>

<b>II</b>	<b>EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ESTOCÁSTICAS APLICADAS A UM MODELO PREDADOR PRESA</b>	<b>73</b>
<b>7</b>	<b>ANÁLISE DE UM MODELO ESTOCÁSTICO PREDADOR PRESA ESTÁGIO SELETIVO</b>	<b>75</b>
<b>7.1</b>	<b>Introdução</b>	<b>75</b>
<b>7.2</b>	<b>O modelo</b>	<b>76</b>
7.2.1	Notações e definições básicas	77
<b>7.3</b>	<b>Teorema das soluções positivas globais</b>	<b>78</b>
<b>7.4</b>	<b>Estabilidade estocástica assintótica</b>	<b>81</b>
<b>7.5</b>	<b>Análise Numérica Computacional</b>	<b>84</b>
7.5.1	Cenário <b>A</b>	86
7.5.2	Cenário <b>B</b>	86
7.5.3	Cenário <b>C</b>	86
7.5.4	Cenário <b>D</b>	87
<b>7.6</b>	<b>Conclusões</b>	<b>87</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>93</b>
	<b>APÊNDICES</b>	<b>97</b>
	<b>APÊNDICE A – TEOREMAS LIMITES</b>	<b>99</b>
<b>A.1</b>	<b>Cadeias de Markov dependentes da densidade</b>	<b>99</b>
	<b>APÊNDICE B – ALGORITMO DIRETO DE GUILLESPIE</b>	<b>103</b>

## 1 INTRODUÇÃO

A motivação deste trabalho é aplicar métodos baseados em processos estocásticos a tempo contínuo cuja dinâmica é significativamente influenciada pela natureza aleatória dos entes constituintes do processo. Esses modelos são inspiradas em sistemas biológicos e portanto passíveis de aplicações em fenômenos com propriedades similares. Neste sentido, a decisão foi propor duas metodologias distintas e dividir portanto o trabalho em duas partes: A Parte I que se constitui no estudo de um sistema de partículas, denominado na literatura como modelo dos sapos (MS). O MS será definido e discutido em detalhes no Capítulo 2, porém, de forma sucinta, podemos dizer que o MS se baseia em um passeio aleatório de partículas ativas percorrendo um grafo qualquer. Considera-se resumidamente os grafos como um conjunto de vértices conectados por arestas, de modo que, cada aresta conecta apenas dois vértices distintos. O foco da análise é aplicar o MS em grafos finitos e uma das questões importantes neste contexto é determinar o percentual final de vértices visitados (ou não visitados) pelas partículas.

Serão apresentadas três diferentes abordagens para tratar o MS: Teoremas limite para cadeias de Markov dependentes da densidade (CMDD), aproximações via campo médio (ACM) e métodos computacionais (SC). A metodologia envolvendo as CMDD são efetivamente aplicáveis no caso dos grafos densos. A abordagem ACM é um método proposto para permitir modelar, a priori, o MS para um grafo finito qualquer  $\mathcal{G}_n$ . Esse método tem como finalidade, estabelecer um sistema de equações diferenciais ordinárias como um método de aproximação via campo médio para modelar as quantidades de interesse do MS ao longo do tempo. O método computacional SC, por sua vez, tem como objetivo simular o comportamento do processo ao longo do tempo, em um dado grafo finito, de forma que os estados de cada vértice são atualizados a cada evento até o momento onde inexistam partículas ativas e o processo é finalizado. As simulações obtidas permitem também avaliar as diferentes abordagens e comparar seus resultados. A abordagem CMDD foi aplicada no MS nos grafos completos  $\mathcal{K}_n$  e bipartidos completos  $\mathcal{K}_{n_1, n_2}$ , a abordagem ACM foi avaliada nesses mesmos grafos e também nos grafos cíclicos  $C_{n, c}$ , onde  $c$  representa a quantidade de vizinhos conectados aos seus  $2k$  vértices mais próximos. A abordagem SC foi empregada em todos os tipos de grafos considerados no estudo.

Entre as características gerais os objetivos e resultados esperados deste trabalho, pode-se citar que a aplicação da abordagem CMDD fornece resultados analíticos e portanto mais precisos, obtidos a partir do emprego de teoremas limite dependentes da densidade para determinar os sistemas de equações que descrevem a evolução das quantidades de interesse, no caso dos grafos completos e bipartidos completos. A abordagem ACM, por se basear em aproximações, possui evidentemente uma limitação de uso, a questão portanto é

determinar até que ponto a aproximação da abordagem possui um desempenho satisfatório para modelar o processo dos sapos, neste sentido, a análise da sua performance nos grafos cíclicos, indicam existir uma relação entre a densidade dos grafos finitos  $\mathcal{G}_n$  e a adequação (ou limitação) da abordagem das aproximações via campo médio (ACM) como uma técnica efetiva para tratar teoricamente o MS.

Na Parte II, foi proposta uma versão estocástica de um modelo predador-presa com predação estágio-seletivo, que se baseia na preferência do predador por presas de um dado tamanho (ou estágio etário). Supondo que a taxa de mortalidade do predador é afetada por uma aleatoriedade ambiental, propomos um modelo baseado em equações diferenciais estocásticas EDEs e discutimos a influência da aleatoriedade desse parâmetro no comportamento do modelo determinístico. Foi realizada uma análise das condições de estabilidade para o caso de colapso populacional das espécies e apresentados teoremas a respeito da propriedade das soluções positivas do sistema. Por fim foram apresentados resultados computacionais comparando os modelos determinísticos e estocásticos em alguns cenários previamente definidos.

## 1.1 Organização da tese

Como mencionado anteriormente, esta tese foi organizada em duas partes: Modelo dos sapos (MS) nos grafos finitos e equações diferenciais estocásticas (EDEs) aplicadas a um modelo predador presa.

A Parte I contém a fundamentação teórica necessária para o modelo dos sapos nos grafos finitos apresentada nas três diferentes abordagens:

1. Método das cadeias de Markov dependentes da densidade (CMDD),
2. Método das aproximações via campo médio (ACM),
3. Simulações computacionais da dinâmica das partículas (SC).

Os resultados relacionados à primeira abordagem são apresentados no Capítulo 3, entre estes: a determinação do sistema de EDOs das variáveis de interesse para o modelo dos sapos e a partir do emprego de teoremas limite (ver Apêndice A) para as CMDD são obtidas as coberturas finais (proporções de vértices visitados ou que permaneceram inativos até o fim do processo), nos casos dos grafos completos e bipartidos completos.

No Capítulo 4 (referente a abordagem 2) é deduzido um sistema geral de equações por meio da abordagem da aproximação via campo médio ACM para um grafo  $\mathcal{G}_n$  e visando calcular numericamente as trajetórias do sistema para cada estado ao longo do tempo, foi desenvolvido um procedimento numérico.

No Capítulo 5 (abordagem 3) são introduzidas algumas técnicas de simulações para cadeias de Markov a tempo contínuo e um código para simular os passeios aleatórios das partículas referentes ao modelo dos sapos para qualquer grafo finito.

As abordagens 2 e 3 são confrontadas no Capítulo 6 com o objetivo de avaliar a capacidade da abordagem ACM em modelar o MS para qualquer grafo  $\mathcal{G}_n$ .

A Seção 6.3 apresenta uma discussão sobre a relação entre a densidade de grafos finitos e a adequação preditiva da abordagem ACM para o MS e a Seção 6.4 resume as principais conclusões da Parte I.

Na Parte II temos os resultados para o modelo predador presa, estruturado em relação a maturação da presa e apresentados resultados sobre a sua consistência numérica, positividade da solução e estabilidade do sistema, sendo também apresentada uma análise numérico-computacional comparando os resultados dos modelos determinístico e estocástico.



## **Parte I**

### **Modelo dos sapos em grafos finitos**



## 2 INTRODUÇÃO AO MODELO DOS SAPOS

O modelo dos sapos em grafos finitos é definido como um sistema de partículas que interagem em um grafo  $\mathcal{G}_n$  (i.e., um grafo conexo qualquer, contendo  $n$  vértices). A dinâmica do modelo, que ocorre em tempo contínuo, pode ser descrita informalmente da seguinte maneira, suponha que cada vértice do grafo está inicialmente ocupado por uma partícula, em  $t = 0$  apenas um vértice contém uma partícula ativa e os  $n - 1$  vértices restantes são habitados por partículas inativas. Cada partícula ativa realiza um passeio aleatório simétrico através das arestas do grafo. Se o vértice de destino da partícula ativa, em dado instante de tempo, estiver ocupado previamente com uma partícula inativa então esta última torna-se também ativa e inicia um novo passeio aleatório de forma independente das demais. Se por acaso, uma partícula ativa "pula" para um vértice vazio ou previamente ocupado com partículas ativas, então esta última é retirada do sistema, neste caso é usual dizer que a mesma "morre". Dado essas premissas, a sobrevivência da partícula só é possível na medida que esta só encontre vértices contendo apenas partículas inativas durante o seu percurso através do grafo.

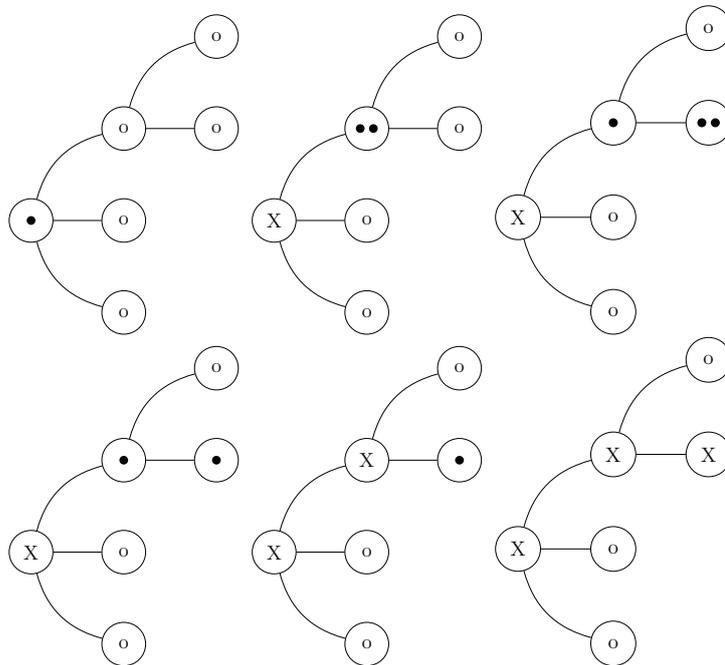


Figura 1 – Exemplo da dinâmica do modelo dos sapos em um grafo finito. Os vértices vazios são marcados com um  $X$  e vértices marcados com  $(\odot)$  representam partículas ativas. As partículas inativas são representadas por vértices marcados com  $(\circ)$ . Da esquerda para a direita e de cima para baixo vemos a evolução em  $k = 6$  estágios do processo, iniciado com uma partícula ativa e finalizando com uma cobertura de 50% dos vértices visitados.

Na Figura 1, seguindo o sentido da esquerda para a direita e de cima para baixo,

temos um exemplo do processo relativo ao modelo dos sapos num grafo finito de tamanho  $n = 6$ , representando a sequência de eventos ocorridos a medida que as partículas "saltam" para os vértices vizinhos. Inicialmente o grafo é configurado com apenas um vértice com uma partícula ativa (marcado com o símbolo  $\odot$ ) e os demais vértices são ocupados com uma partícula inativa (marcado com o símbolo  $\ominus$ ). No primeiro movimento, a única partícula ativa sai e deixa o vértice original vazio (representado com  $X$ ) e seleciona uniformemente um vértice vizinho acima como destino, ativando a partícula inativa que o habitava e esse vértice passa a ter duas partículas ativas. O processo segue até que finalmente a última partícula ativa morre ao saltar para o seu único vértice vizinho que estava vazio.

Representando as quantidades de vértices para cada um dos estados possíveis dos vértices como: inativos, vazios, com 1 ou 2 partículas em cada estágio  $k$  observado na Figura 1, respectivamente como:  $X(t)$ ,  $Y(t)$ ,  $Z(t)$  e  $W(t)$ . A tabela 2 apresenta os valores de todas essas quantidades para cada  $k$

$k$	$X(t)$	$Y(t)$	$Z(t)$	$W(t)$
0	5	0	1	0
1	4	1	0	1
2	3	1	1	1
3	3	1	2	0
4	3	2	1	0
5	3	3	0	0

Tabela 1 – Valores das quantidades  $X(t)$ ,  $Y(t)$ ,  $Z(t)$  e  $W(t)$  para cada estágio  $k$  considerado no exemplo (Figura 1)

Para um grafo finito podemos definir formalmente o modelo dos sapos como uma cadeia de Markov a tempo contínuo (C.M.T.C.)  $(\psi_t)_{t \geq 0}$  com espaço de estados  $\{-1, 0, 1, 2\}^V$ , onde  $V := \{1, 2, 3, \dots, n\}$  representa o conjunto de vértices do grafo. Cada estado do processo é um vetor  $(\psi(i) : i \in V)$ , onde  $\psi(i) \in \{-1, 0, 1, 2\}$ . Aqui os estados  $-1, 0, 1, 2$  representam, respectivamente, um vértice com 1 partícula inativa, um vértice vazio, um vértice com 1 partícula ativa e por último, um vértice com 2 partículas ativas. Logo, o processo evolui de acordo às seguintes transições:

$$\begin{aligned}
 \mathbb{P}(\psi_{t+h}(i) = 1 | \psi_t(i) = 2) &= h + o(h), \\
 \mathbb{P}(\psi_{t+h}(i) = 0 | \psi_t(i) = 1) &= h + o(h), \\
 \mathbb{P}(\psi_{t+h}(i) = 2 | \psi_t(i) = -1) &= h(N_1(i) + 2N_2(i)) + o(h),
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

onde  $N_\ell(i) := N_\ell(\psi, i)$  é o número de vizinhos do vértice  $i$  que estão no estado  $\ell$ , para  $\ell \in \{-1, 0, 1, 2\}$  e para a configuração  $\psi$ , onde  $o(h)$  é uma função  $f(h)$  tal que  $\lim_{h \rightarrow 0} f(h)/h = 0$ .

As duas primeiras linhas de 2.1 representam as probabilidades das transições no intervalo  $[t, t + h]$  espontâneas e modeladas como um processo de Poisson com taxa  $\lambda = 1$ , quando uma partícula ativa deixa um vértice  $i$  que continha respectivamente duas partículas ativas ou uma. A última linha apresenta a transição quando o vértice contém uma partícula inativa e passa a ter duas partículas ativas. Este caso depende da existência de partículas ativas nos demais vértices vizinhos a  $i$  para que possa ocorrer.

Entre as diversas possibilidades de aplicação do modelo dos sapos e suas variações, pode-se citar os processos epidemiológicos, onde interpreta-se o agente infeccioso ou vetor da epidemia como a partícula ativa que se propaga infectando outros indivíduos saudáveis em contato com o indivíduo infectado e que logo após a infecção se tornam imunes. Neste caso, o processo finaliza quando todos os agentes infectados não encontrarem mais indivíduos saudáveis para transmitir a doença (ver (KURTZ et al., 2008)). Um outro exemplo, seria nos processos de dinâmica populacional, no qual uma determinada espécie de bactéria, num contexto de acessibilidade limitada a um número  $n$  de nichos contendo substratos necessários para a sua sobrevivência e cada nicho permite no máximo a sobrevivência de duas espécies. Neste caso, as bactérias são representadas pelas partículas ativas e os nichos seriam interpretados como os vértices conectados. O modelo dos sapos pode ser aplicado também nos processos de rumores, que são caracterizados pela transmissão de um sinal ou informação numa rede de contatos por determinados agentes, que podem ser indiferentes ao rumor, promovedores da sua disseminação ou contestadores do mesmo. A partícula ativa neste caso pode ser modelada como a informação que está sendo transmitida através da rede de relacionamento (ver (LEBENSZTAYN; MACHADO; RODRIGUEZ, 2011b), (LEBENSZTAYN; MACHADO; RODRIGUEZ, 2011a), (LEBENSZTAYN; RODRIGUEZ, 2013)).

## 2.1 Modelo dos sapos: um resumo do estado da arte

O modelo dos sapos foi inicialmente tratado no contexto de grafos infinitos, de forma que, o objetivo seria o estudo das dinâmicas de partículas ativas ao percorrerem redes hipercúbicas ou árvores. Entre as diversas configurações associadas as partículas, pode-se estabelecer regras de permanência (sobrevivência) ou retirada (morte) de partículas e determinar as condições iniciais, entre outras características.

Na abordagem relativa à questão da sobrevivência das partículas, temos o caso particular onde as partículas ativas não morrem em nenhuma circunstância, deste modo, as questões pertinentes podem ser: Se um dado vértice, ou conjunto de vértices, são visitados de forma recorrente ou transiente ou como o conjunto de vértices são ativados a medida que o processo evolui. Partindo dessa premissa: (TELCS; WORMALD, 1999) determinaram que o modelo dos sapos iniciando com uma partícula por vértice é recorrente em  $\mathbb{Z}^d$  para qualquer  $d \geq 1$ . Entre os trabalhos nos quais a sobrevivência na rede hipercúbica é abordada, pode-se

citar, por exemplo: (ALVES; MACHADO; POPOV, 2002b), (BERTACCHI; MACHADO; ZUCCA, 2014), (LEBENSZTAYN; MACHADO; ZULUAGA, 2016).

Em outros casos, pode-se considerar o tempo de vida das partículas ao percorrer o grafo em dois casos particulares: se a sua sobrevivência for determinada por uma distribuição de probabilidade geométrica de parâmetro  $p$ , onde  $p$  representa a probabilidade da sobrevivência da partícula a cada salto, ou se as partículas morrem assim que visitam um vértice previamente visitado. (ALVES et al., 2006) (LEBENSZTAYN; MACHADO; ZULUAGA, 2016)

Na análise de fenômenos críticos é também um assunto chave no modelo dos sapos. Por exemplo, no caso de tempo de vida geométrico, o sistema seria finalizado com a não existência de partículas ativas no grafo. No modelo dos sapos com tempo de vida geométrico, dizemos que o mesmo apresenta transição de fase com parâmetro crítico  $p_c$ , quando  $p < p_c$ , para algum  $p_c := p_c(d)$  tal que  $p_c \in (0, 1)$ . Em (ALVES; MACHADO; POPOV, 2002a) foram apresentados resultados de transição de fase e valores assintóticos para parâmetros críticos na rede hipercúbica de dimensão  $d$  e para a árvore homogênea de grau  $d \geq 3$ . Os fenômenos críticos foram também uma motivação de pesquisa nos trabalhos de (FONTES; MACHADO; SARKAR, 2004) e mais recentemente no contexto de árvores homogêneas e bi regulares em (LEBENSZTAYN; UTRIA, 2018; LEBENSZTAYN; UTRIA, 2019).

Uma forma alternativa de interpretação do modelo dos sapos é como um sistema de transmissão de informação. De fato, pode-se imaginar as partículas ativas como agentes que carregam uma informação e as inativas como agentes desinformados. Neste sentido o leitor pode consultar: (LEBENSZTAYN; MACHADO; POPOV, 2005), (LEBENSZTAYN; MACHADO; RODRIGUEZ, 2011b), (LEBENSZTAYN; MACHADO; RODRIGUEZ, 2011a), (LEBENSZTAYN; RODRIGUEZ, 2013). Diferentes pesquisadores focaram no estudo deste processo em grafos finitos. Nesta direção, as quantidades de interesse estão relacionadas com a proporção final de vértices visitados por partículas ativas, ver (ALVES et al., 2006).

Se considerarmos a motivação de interpretar o modelo dos sapos como um processo epidemiológico é imediata a relação entre os vetores de uma epidemia com partículas ativas que se movem em vértices de grafos finitos. Em (KURTZ et al., 2008) foram provados uma Lei dos Grandes Números e um Teorema do Limite Central para a proporção de vértices visitados ao fim do processo, numa abordagem na qual permite-se assumir que as partículas ativas morrem após percorrerem um número  $L \geq 1$  de vértices visitados sem ativar nenhuma partícula.

A questão sobre a determinação da recorrência e transiência nas árvores infinitas foi um importante tópico de investigação no modelo dos sapos até que em (HOFFMAN; JOHNSON; JUNGE, 2017) foi provado que o modelo é recorrente no caso das árvores binárias, porém é transiente nas árvores  $d$ -árias, nos casos onde  $d \geq 5$ .

Até o presente momento, os resultados para os modelos com morte aleatória em grafos finitos estão restritos ao caso do grafo completo (LEBENSZTAYN; ESTRADA, 2019). Neste trabalho, são propostas duas formas de aproximação para estudar a proporção final de vértices não visitados e os resultados serão exemplificados para alguns grafos, como por exemplo: o grafo bipartido e o grafo  $2k$ -cíclico, entre outros.

## 2.2 Definições básicas

Seja  $\mathcal{G}_n = (V, E)$  um grafo finito de ordem  $n$ , não orientado, sem laços, constituído por um conjunto  $V = \{1, 2, 3, \dots, n\}$  de elementos denominados vértices e o conjunto  $E$  de pares ordenados de distintos elementos de  $V$  denominados arestas. Uma aresta é um segmento que une dois vértices distintos  $x, y \in V$  tal que o par:  $(x, y) \in E$ . O número total de vértices é  $|V| = n$ , o número de arestas do grafo é dado por  $|E|$  e o número máximo possível de arestas é dado por  $\binom{|V|}{2}$ .

Os vértices que pertencem a uma aresta comum são denominados vértices vizinhos ou adjacentes. Representa-se dois vértices adjacentes com a notação:  $x \sim y$ . Um caminho de  $\mathcal{G}_n$ , que conecta  $x$  e  $y$  é definido como a sequência mais curta  $\{x = x_0, x_1, \dots, x_l = y\}$  dos vértices tais que  $x_i \sim x_{i+1}$  para  $i \in \{0, 1, \dots, l-1\}$ . O valor  $l$  na relação anterior é a distância entre  $x$  e  $y$ , denotada por  $dist(x, y)$ . Num grafo conectado é possível sempre obter um caminho entre quaisquer dois vértices do mesmo, caso contrário, temos um grafo desconectado. Para qualquer vértice  $x \in V$ , o grau do vértice é o número de arestas,  $k_x$ , que possuem o vértice comum  $x$  como ponto de chegada. Um vértice de grau zero é dito isolado. Um grafo de tamanho  $n$  pode ser representado por uma matriz de adjacência  $A := A(\mathcal{G}_n)$  cujos elementos  $A_{i,j}$  são dados por:

$$A_{i,j} = \begin{cases} 1, & \text{se } i, j \text{ são adjacentes,} \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.2)$$

Para este trabalho serão considerados apenas a classe de grafos denominada de grafos simples. Nos grafos simples não existem arestas orientadas, apenas uma aresta une qualquer par de vértice (o caso contrário denomina-se de multi-grafo) e também não admite a ocorrência de laços (arestas que unem um vértice a ele próprio).

**Definição 1.** *Densidade de um grafo.*

A densidade  $\rho(\mathcal{G}_n)$  é definida como a fração de arestas em  $\mathcal{G}_n$ :

$$\rho(\mathcal{G}_n) = \frac{|E|}{\binom{|V|}{2}} = \frac{\bar{k}}{|V| - 1}$$

onde  $k_i$  é o grau do vértice  $i$  e  $\bar{k} = \frac{\sum_{i=1}^n k_i}{n} = \frac{2|E|}{|V|}$  é o grau médio do grafo.

Um grafo é denso, se a densidade  $\rho(\mathcal{G}_n)$  tende a uma constante positiva quando  $|V| \rightarrow \infty$ . Em outras palavras, a fração de arestas (ou fração de elementos com  $A_{i,j} = 1$  na matriz de adjacência  $A$ ) se mantêm constante na medida que são adicionados mais vértices no grafo. Por outro lado, se  $\rho(\mathcal{G}_n) \rightarrow 0$  quando  $|V| \rightarrow \infty$ , é denominado como grafo esparso.

### 3 MÉTODO DAS CADEIAS DE MARKOV DEPENDENTES DA DENSIDADE

#### 3.1 Teoremas limite no grafo completo

Apresenta-se aqui o modelo dos sapos para o caso específico de uma população homogênea fechada de tamanho  $n$  representada pelo grafo completo. O grafo completo é definido como um grafo finito no qual todos os vértices são conectados entre si (ver Figura 2). Este caso foi estudado em (KURTZ et al., 2008) para o modelo dos sapos, no qual cada partícula possuía  $L$  vidas no grafo completo. Aqui o recordamos com uma notação alternativa afim de ilustrar uma nova abordagem.

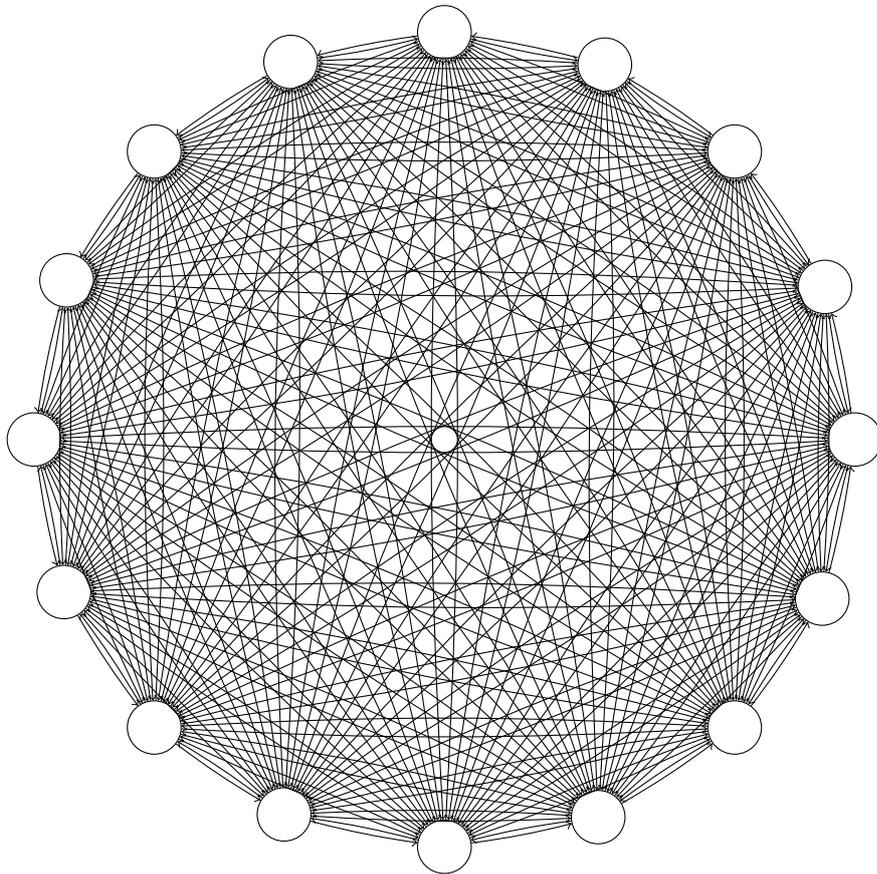


Figura 2 – Grafo completo com 16 vértices

Sejam  $X(t), Y(t), Z(t), W(t)$ , as variáveis aleatórias que representam, respectivamente, o número de vértices contendo apenas partículas inativas, vazios, com uma partícula ativa e com duas partículas ativas no tempo  $t$ , para  $t \geq 0$ . Suponha que:

$$X(t) + Y(t) + Z(t) + W(t) = n \text{ para todo } t \geq 0.$$

As condições iniciais do modelo são dadas por  $X(0) = n - 1$ ,  $Y(0) = 0$ ,  $Z(0) = 1$  e  $W(0) = 0$ . A dinâmica do modelo dos sapos no grafo completo pode ser especificada por uma cadeia de Markov dependente da densidade (C.M.T.C.) com  $\mathbf{V} = \{V(t) : t \geq 0\}$ , onde  $V(t) = (X(t), Y(t), Z(t), W(t))$ , com transições dadas por:

$$\begin{array}{ll}
 \textit{Incrementos} & \textit{Taxas} \\
 \ell_1 = (0, +1, -1, 0) & \longrightarrow \frac{(n-X)}{n} Z, \\
 \ell_2 = (-1, +1, -1, +1) & \longrightarrow \frac{X}{n} Z, \\
 \ell_3 = (-1, 0, +1, 0) & \longrightarrow 2W \frac{X}{n}, \\
 \ell_4 = (0, 0, +1, -1) & \longrightarrow 2W \frac{(n-X)}{n}.
 \end{array} \tag{3.1}$$

A primeira linha de transição apresentada em (3.1) é interpretada como o salto de uma partícula ativa de um vértice que possuía apenas 1 partícula ativa para um vértice vazio ou com 1 ou 2 partículas ativas. A segunda linha, por sua vez, representa o salto da partícula de um vértice com 1 partícula ativa para um vértice com partículas inativas, o qual produz 2 partículas ativas e após esse evento ocorre a desocupação do vértice previamente ativo. Na terceira linha uma das partículas de um vértice que continha 2 partículas ativas salta para um vértice inativo. Finalmente na quarta linha temos o evento no qual uma das partículas de um vértice com 2 partículas ativas salta para um vértice não inativo.

### 3.1.1 Convergência para um sistema de equações diferenciais ordinárias

O processo definido anteriormente é um caso particular de um processo dependente da densidade (ver Apêndice A.1 para mais detalhes). Dados os vetores de mudança de estados  $\ell = \{\ell_1, \ell_2, \ell_3, \ell_4\}$ , listados em (3.1) e o vetor  $\mathbf{V} = (X, Y, Z, W)$  cujas componentes podem ser normalizadas por  $n$ , de modo que dependem da densidade do processo e assim definem-se as taxas de transições como:

$$q_{V, V+\ell}^{(n)} = n \left( \beta_\ell \left( \frac{V}{n} \right) \right), \tag{3.2}$$

e as probabilidades das transições do processo como:

$$P(V(t+h) = v + \ell \mid V(t) = v) = hn \left( \beta_\ell \left( \frac{V}{n} \right) \right) + o(h), \ell \neq \mathbf{0}$$

para  $h$  suficientemente pequeno, onde  $o(h)$  é uma função  $f(x)$  tal que  $\lim_{h \rightarrow 0} f(h)/h = 0$ . As proporções:  $x = \frac{X}{n}$ ,  $y = \frac{Y}{n}$ ,  $z = \frac{Z}{n}$  e  $w = \frac{W}{n}$  são componentes do vetor  $v = (x, y, z, w)$ .

As funções  $\beta_{\ell_i} \left( \frac{V}{n} \right)$  são dadas por

$$\begin{cases} \beta_{\ell_1}(x, y, z, w) = (1 - x)z, \\ \beta_{\ell_2}(x, y, z, w) = xz, \\ \beta_{\ell_3}(x, y, z, w) = 2wx, \\ \beta_{\ell_4}(x, y, z, w) = 2w(1 - x). \end{cases}$$

Seja a função deriva (do termo original em inglês *drift function*) é definida como

$$F(x, y, z, w) = \sum_{i=1}^4 \ell_i \cdot \beta_{\ell_i} \left( \frac{\mathbf{V}}{n} \right),$$

Note que o processo tem um número finito de transições e que as funções  $\beta_{\ell} \left( \frac{\mathbf{V}}{n} \right)$  são contínuas.

Pode-se aplicar então o resultado para cadeias de Markov a tempo contínuo e dependentes da densidade (ver o Apêndice A ou (ETHIER; KURTZ, 2009), Teorema 2.1 do capítulo 11). Este teorema, de forma resumida implica que, quando  $n \rightarrow \infty$  obtemos aproximações cada vez melhores das trajetórias da cadeia de Markov para a solução de um sistema de equações diferenciais ordinárias, determinadas pela função deriva, que no caso do MS no grafo completo é dada por:

$$F(x, y, z, w) = (-(z + 2w)x, z, -z + 2w, -2w + (z + 2w)x). \quad (3.3)$$

Empregando os resultados de convergência comentados previamente, definimos o sistema de EDOs por  $\frac{dv}{dt} = F(v)$  e especificamente para o caso do modelo dos sapos em grafos completos é dado pelas equações abaixo:

$$\begin{cases} x'(t) = -(z(t) + 2w(t))x(t), \\ y'(t) = z(t), \\ z'(t) = -z(t) + 2w(t), \\ w'(t) = -2w(t) + (z(t) + 2w(t))x(t). \end{cases} \quad (3.4)$$

Os respectivos valores iniciais de cada variável, são dados por

$$\begin{cases} x(0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{X(0)}{n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n-1}{n} = 1, \\ y(0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{Y(0)}{n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{0}{n} = 0, \\ z(0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{Z(0)}{n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} = 0, \\ w(0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{W(0)}{n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{0}{n} = 0. \end{cases} \quad (3.5)$$

### 3.2 Proporções limite no grafo completo

O sistema de equações dado em (3.4) fornece aproximações determinísticas para as equações de evolução das proporções  $x(t)$ ,  $y(t)$ ,  $z(t)$  e  $w(t)$ . Deste modo, estão disponíveis todos os elementos para aproximar essas quantidades ao longo do tempo  $t$ . Em (KURTZ et al., 2008) foram obtidos os resultados do modelo dos sapos para o grafo completo, como um caso particular, porém as variáveis consideradas foram as relativas aos vértices visitados, ou correspondente a soma  $y(t) + z(t) + w(t)$  e as proporções dos vértices não visitados  $x(t)$ .

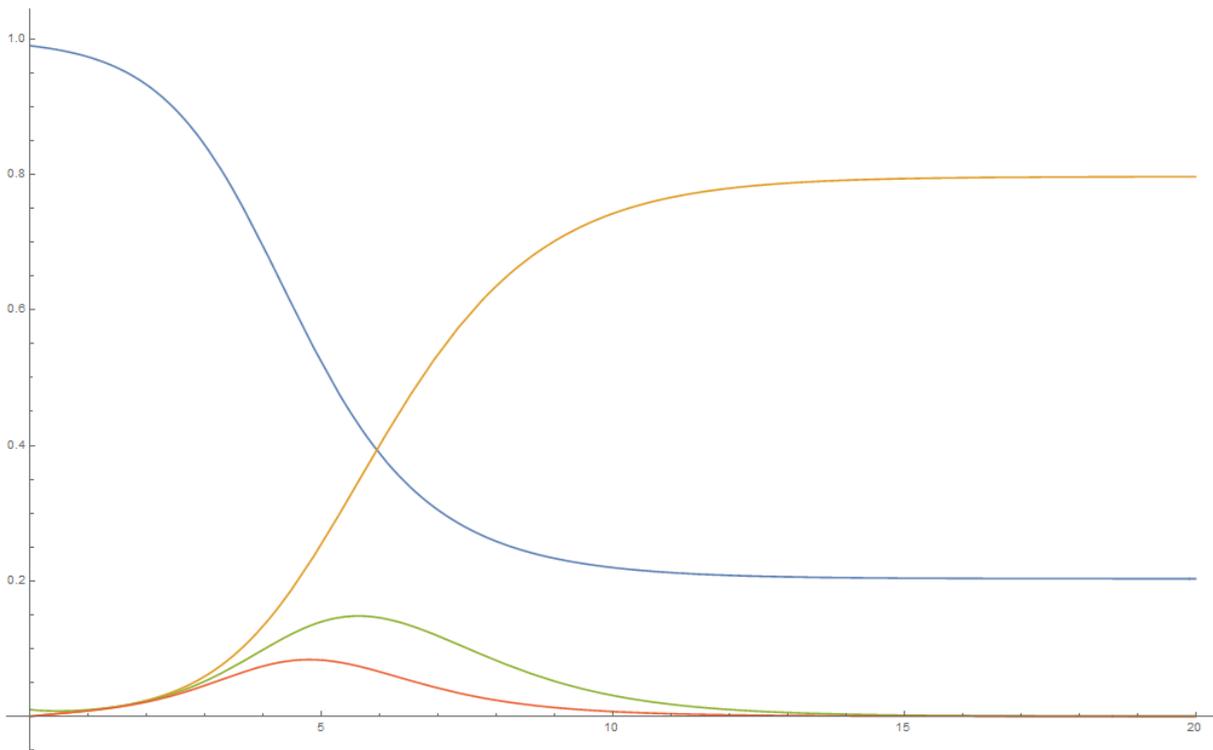


Figura 3 – Evolução das soluções do sistema limite do modelo dos sapos para um grafo completo. A linha azul representa a dinâmica de  $x(t)$ , em amarelo  $y(t)$ , em verde  $z(t)$  e em vermelho  $w(t)$ . Gráfico com valores iniciais  $x(0) = 0,99$ ,  $y(0) = 0$ ,  $z(0) = 0,01$  e  $w(0) = 0$ .

Observando os resultados obtidos através das soluções numéricas das equações diferenciais e apresentadas na Figura 3 e considerando os valores iniciais:  $x(0) = 0,99$  e  $z(0) = 0,01$ , nota-se que as proporções evoluem até um determinado valor assintótico para cada uma das variáveis de interesse. Conseqüentemente isso indica que os limites  $x(\infty)$ ,  $y(\infty)$ ,  $z(\infty)$  e  $w(\infty)$  existem. Essas quantidades serão denominadas de: coberturas do modelo dos sapos no grafo completo.

Deduziremos a seguir as equações para determinação das coberturas no grafo completo. Inicialmente obteremos uma relação para  $x(t)$  a partir da primeira equação do

sistema (3.4):

$$x(t) = c \exp \left\{ - \int_0^t (z(s) + 2w(s)) ds \right\}. \quad (3.6)$$

Como comentado previamente no Capítulo 2, inicia-se o processo com uma partícula ativa num grafo completo de  $n$  vértices, considerando os seguintes valores iniciais:  $x(0) = 1$ ,  $y(0) = 0$ ,  $z(0) = 0$  e  $w(0) = 0$  (Ver (3.5)). Utilizando a segunda e terceira equação do sistema, respectivamente  $z(t) = \frac{dy(t)}{dt}$  e  $2w(t) = z(t) + \frac{dz(t)}{dt}$  resulta em

$$\int_0^t w(s) ds = \frac{z(t) - z(0) + y(t) - y(0)}{2}, \quad (3.7)$$

e empregando os resultados prévios em (3.6) obtemos:

$$\begin{aligned} \int_0^t (z(s) + 2w(s)) ds &= \int_0^t \left( \frac{dy(s)}{ds} + \frac{dz(s)}{ds} + \frac{dy(s)}{ds} \right) ds, \\ &= 2(y(t) - y(0)) + (z(t) - z(0)), \end{aligned} \quad (3.8)$$

Substituindo (3.8) em (3.6) e tomando  $t = 0$  na relação (3.6), temos que  $c = x(0)$  e deste modo, determina-se a seguinte expressão

$$x(t) = x(0) \exp \left\{ - [2(y(t) - y(0)) + (z(t) - z(0))] \right\}. \quad (3.9)$$

Substituindo os valores iniciais em (3.9) resulta em

$$x(t) = \exp \left\{ - [2y(t) + z(t)] \right\}. \quad (3.10)$$

Com isso a equação (3.10) pode ser determinada em função das proporções dos vértices vazios e dos vértices ocupados com uma partícula ativa. A equação para evolução dos vértices visitados  $y(t)$ , por sua vez, pode ser obtida integrando a segunda equação de (3.4) e resulta em

$$y(t) = \int_0^t z(s) ds, \quad (3.11)$$

a equação (3.11) representa o acúmulo de vértices vazios ao longo do tempo  $(0, t)$ .

As coberturas limites são definidas como as proporções para cada estado no tempo  $t$  ( $\psi_t$ ) que converge para um valor fixo quando  $t \rightarrow \infty$ . No nosso caso, temos quatro proporções associadas a cada estado de interesse definidas como  $x(\infty)$ ,  $y(\infty)$ ,  $z(\infty)$  e  $w(\infty)$ .

Dado que as proporções limites existem, inicialmente calcula-se o limite para a variável  $z(\infty)$

$$z(\infty) := \lim_{t \rightarrow \infty} z(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{dy(t)}{dt} = 0. \quad (3.12)$$

A cobertura para  $w(\infty)$  é também igual a zero, pois:

$$w(\infty) := \lim_{t \rightarrow \infty} w(t) = \frac{\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{dz(t)}{dt} + \lim_{t \rightarrow \infty} z(t)}{2} = 0. \quad (3.13)$$

Por meio da relação (3.9) calcula-se a cobertura  $x(\infty)$  da seguinte forma

$$x(\infty) := \lim_{t \rightarrow \infty} x(t) = x(0) \exp\{-[2(y(\infty) - y(0)) + (z(\infty) - z(0))]\}, \quad (3.14)$$

e utilizando as condições iniciais propostas e os resultados anteriores obtemos a seguinte relação para  $x(\infty)$ :

$$x(\infty) = \exp\{-2y(\infty)\}. \quad (3.15)$$

Fazendo  $y(\infty) := \lim_{t \rightarrow \infty} y(t)$  e dado que  $z(\infty) = 0$  e  $w(\infty) = 0$  implica em  $y(\infty) = 1 - x(\infty)$  obtemos finalmente

$$x(\infty) = \exp\{-2(1 - x(\infty))\}. \quad (3.16)$$

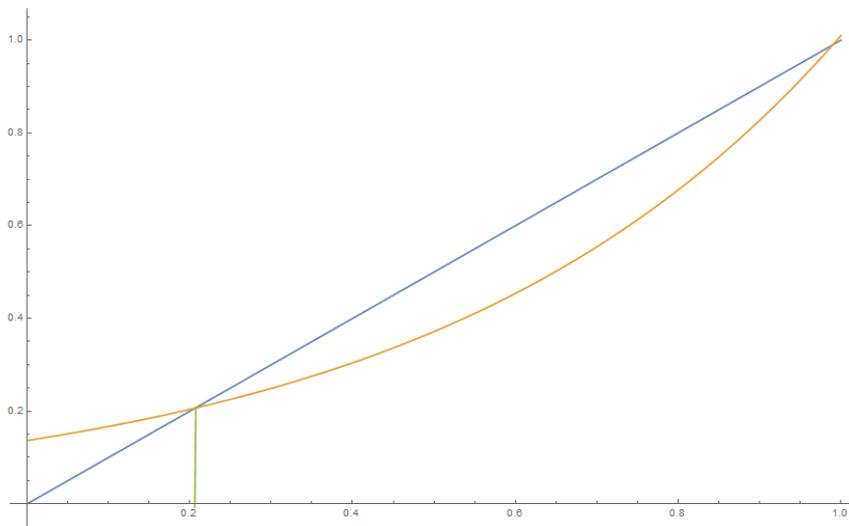


Figura 4 – Solução numérica da cobertura  $x(\infty)$  no grafo completo

Na Figura 4 observa-se o ponto  $x(\infty)$  como intersecção das curvas representando o lado esquerdo e direito da equação (3.15). Para um grafo completo com 1000 vértices,

obtemos numericamente os valores limite  $x(\infty) = 0,203188$  e conseqüentemente  $y(\infty) = 1 - x(\infty) = 0,796812$  e deste modo, no limite, ocorre a extinção de todas as partículas ativas, determinando que cerca de 80% dos vértices foram visitados em algum momento e deixando outros 20% permanentemente inativos. Esses resultados podem ser visualizados na Figura 3.

**Definição 2.** *Função  $W$  de Lambert*

A função de Lambert é definida como sendo a inversa da função  $x \rightarrow xe^x$ , isto é, a função que satisfaz  $W(x)e^{W(x)} = x$ . Denotamos por  $W_0(x)$  ao ramo principal de  $W$ . Os principais resultados e mais detalhes sobre essa função encontram-se em (CORLESS et al., 1996).

Por meio da Definição 2, para uma dada constante  $a \in \mathbb{R}$ , se  $ze^z = a \Rightarrow z = W(a)$ , pode-se então rescrever a equação (3.16) como  $ze^z = -2e^{-2}$ , onde  $z = -2x(\infty)$ . Fazendo as substituições subsequentes temos uma expressão para  $x(\infty)$ .

**Proposição 1.** *Proporção limite  $x(\infty)$  em função do ramo principal de Lambert  $W_0$ .*

$$x(\infty) = \frac{-W_0(-2e^{-2})}{2} \quad (3.17)$$

e conseqüentemente

$$y(\infty) = 1 + \frac{W_0(-2e^{-2})}{2}. \quad (3.18)$$

Nota-se que  $x(\infty) = 1$  é também uma solução da equação (3.15) (ver Figura 4), porém essa solução não se define no ramo principal, neste caso classifica-se a solução como do ramo  $W_{-1}$  de Lambert.

Os resultados para as proporções limite  $x(\infty)$  e  $y(\infty)$  para o grafo completo coincidem com os obtidos em (KURTZ et al., 2008) ao supormos o caso das partículas com uma vida ( $L = 1$ ).

### 3.3 Proporções limite no grafo bipartido completo

**Definição 3.** *Grafo bipartido completo.*

Um grafo bipartido completo  $\mathcal{K}_{n_1, n_2} = (V, E)$  é um grafo finito e denso com duas partições de tamanhos  $n_1, n_2$  e tal que  $V = V_1 \cup V_2$  com  $V_1 \cap V_2 = \emptyset$  e  $|V_1| = n_1, |V_2| = n_2$ .

Seja  $A_{i,j}$  elementos da sua matriz de adjacência  $A$  e tal que  $A_{i,j} = 0$  se, e somente se,  $i, j \in V_k$ , para  $k \in \{1, 2\}$ . Em outras palavras, o conjunto de vértices de  $\mathcal{K}_{n_1, n_2}$  pode ser particionado em dois subconjuntos disjuntos, de forma que, cada par de vértices pertencentes aos dois subconjuntos distintos são sempre conectados, por outro lado, pares de vértice do mesmo subconjunto nunca são conectados(ver Figura 3.3)

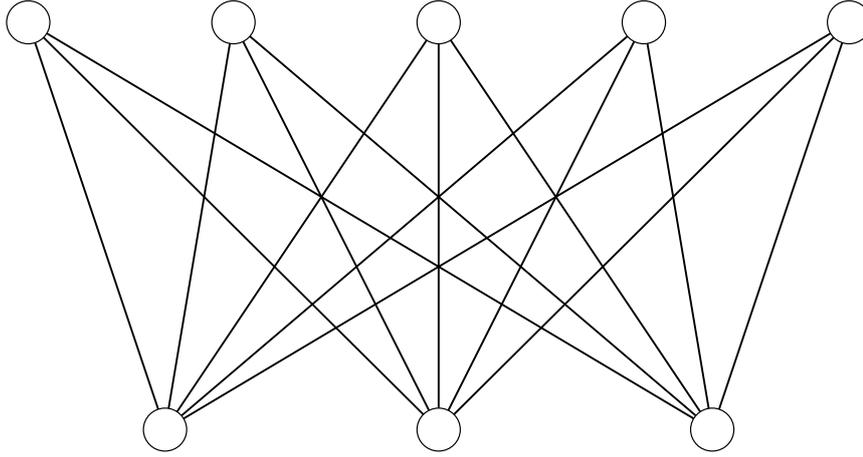


Figura 5 – Grafo bipartido completo  $K_{n_1, n_2}$  com  $n_1 = 3$  e  $n_2 = 5$

Vamos definir o modelo dos sapos no grafo bipartido completo  $\mathcal{K}_{n_1, n_2}$ , onde  $n_1 = \theta n$  e  $n_2 = (1 - \theta)n$  com  $\theta \in (0, 1)$ . Considere as variáveis:  $X_1(t)$ ,  $Y_1(t)$ ,  $Z_1(t)$ ,  $W_1(t)$  e  $X_2(t)$ ,  $Y_2(t)$ ,  $Z_2(t)$ ,  $W_2(t)$ , que representam respectivamente as quantidades de vértices com partículas inativas, vértices vazios, ativos contendo 1 ou 2 partículas no tempo  $t$ , para  $t \geq 0$  nas duas partições do grafo, note que

$$X_1(t) + Y_1(t) + Z_1(t) + W_1(t) = n_1,$$

$$X_2(t) + Y_2(t) + Z_2(t) + W_2(t) = n_2.$$

O modelo dos sapos é a cadeia de Markov dependente da densidade  $\mathbf{H}^{(n)} = \{H^{(n)}(t)\}_{t \geq 0}$ ,  $H^{(n)}(t) = (X_1(t), Y_1(t), Z_1(t), W_1(t), X_2(t), Y_2(t), Z_2(t), W_2(t))$ , com o conjunto de transições possíveis e taxas dadas por:

incrementos	$(X_1, Y_1, Z_1, W_1, X_2, Y_2, Z_2, W_2)$	taxas	
$\ell_0 =$	$(0, +1, -1, 0, -1, 0, 0, +1)$	$\frac{Z_1 X_2}{(1-\theta)n}$ ,	
$\ell_1 =$	$(-1, 0, 0, +1, 0, +1, -1, 0)$	$\frac{Z_2 X_1}{\theta n}$ ,	
$\ell_2 =$	$(0, 0, +1, -1, -1, 0, 0, +1)$	$\frac{2W_1 X_2}{(1-\theta)n}$ ,	
$\ell_3 =$	$(-1, 0, 0, +1, 0, 0, +1, -1)$	$\frac{2W_2 X_1}{\theta n}$ ,	(3.19)
$\ell_4 =$	$(0, +1, -1, 0, 0, 0, 0, 0)$	$\frac{((1-\theta)n - X_2)Z_1}{(1-\theta)n}$ ,	
$\ell_5 =$	$(0, 0, 0, 0, 0, +1, -1, 0)$	$\frac{(\theta n - X_1)Z_2}{\theta n}$ ,	
$\ell_6 =$	$(0, 0, +1, -1, 0, 0, 0, 0)$	$\frac{((1-\theta)n - X_2)W_1}{(1-\theta)n}$ ,	
$\ell_7 =$	$(0, 0, 0, 0, 0, 0, +1, -1)$	$\frac{(\theta n - X_1)W_2}{\theta n}$ .	

As condições iniciais do modelo são dadas por:  $X_1(0) = \theta n - 1$ ,  $Y_1(0) = 0$ ,  $Z_1(0) = 1$  e  $W_1(0) = 0$ ,  $X_2(0) = (1 - \theta)n$ ,  $Y_2(0) = 0$ ,  $Z_2(0) = 0$  e  $W_2(0) = 0$ .

Seguindo procedimento similar ao exemplificado no caso do grafo completo o objetivo aqui também é estudar a proporção coberta pelas partículas no grafo bipartido. Empregaremos a técnica de convergência para populações dependentes da densidade (recomenda-se ao leitor ler o Apêndice A ou (ETHIER; KURTZ, 2009), teorema 2.1 do capítulo 11)) para obter o sistema de equações diferenciais limites para determinar as quantidades de interesse no modelo dos sapos.

As taxas do processo (3.19) podem ser escritas como:

$$q_{\mathbf{h}, \mathbf{h}+\ell}^{(n)} = n \left[ \beta_{\ell_i} \left( \frac{X_1}{n}, \frac{Y_1}{n}, \frac{Z_1}{n}, \frac{W_1}{n}, \frac{X_2}{n}, \frac{Y_2}{n}, \frac{Z_2}{n}, \frac{W_2}{n} \right) \right],$$

e cada uma das funções  $\beta_{\ell_i}$ , com  $i \in \{0, 1, \dots, 7\}$  são listadas abaixo:

$$\begin{aligned} \beta_{\ell_0}(x_1, y_1, z_1, w_1, x_2, y_2, z_2, w_2) &= \frac{z_1 x_2}{1 - \theta}, \\ \beta_{\ell_1}(x_1, y_1, z_1, w_1, x_2, y_2, z_2, w_2) &= \frac{z_2 x_1}{\theta}, \\ \beta_{\ell_2}(x_1, y_1, z_1, w_1, x_2, y_2, z_2, w_2) &= \frac{2w_1 x_2}{1 - \theta}, \\ \beta_{\ell_3}(x_1, y_1, z_1, w_1, x_2, y_2, z_2, w_2) &= \frac{2w_2 x_1}{\theta}, \\ \beta_{\ell_4}(x_1, y_1, z_1, w_1, x_2, y_2, z_2, w_2) &= \frac{((1 - \theta) - x_2) z_1}{1 - \theta}, \\ \beta_{\ell_5}(x_1, y_1, z_1, w_1, x_2, y_2, z_2, w_2) &= \frac{(\theta - x_1) z_2}{\theta}, \\ \beta_{\ell_6}(x_1, y_1, z_1, w_1, x_2, y_2, z_2, w_2) &= \frac{((1 - \theta) - x_2) w_1}{1 - \theta}, \\ \beta_{\ell_7}(x_1, y_1, z_1, w_1, x_2, y_2, z_2, w_2) &= \frac{(\theta - x_1) w_2}{\theta}. \end{aligned}$$

Seja

$$h(t) = (x_1(t), y_1(t), z_1(t), w_1(t), x_2(t), y_2(t), z_2(t), w_2(t))$$

onde  $h_0 = (x_1(0), y_1(0), z_1(0), w_1(0), x_2(0), y_2(0), z_2(0), w_2(0))$ , representa o valor inicial da função determinística. Observando que as hipóteses do Teorema 3 do apêndice A são satisfeitas, a função desvio  $F$  é definida como  $F(h(t)) = \sum_{i=0}^7 \ell_i \cdot \beta_{\ell_i}(h(t))$ . De forma que, qualquer trajetória  $(h(t, h_0), t \geq 0)$  é solução do sistema

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} h(t, h_0) = F(h(t)), \\ h(0, h_0) = h_0. \end{cases}$$

Consequentemente, obtemos as equações diferenciais ordinárias dos sistemas componentes do modelo dos sapos no grafo bipartido, de modo que, o sistema para o grafo

bipartido é dado por:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1'(t) = -(z_2(t) + 2w_2(t)) \frac{x_1(t)}{\theta}, \\ y_1'(t) = z_1(t), \\ z_1'(t) = -z_1(t) + 2w_1(t), \\ w_1'(t) = -2w_1(t) + (z_2(t) + 2w_2(t)) \frac{x_1(t)}{\theta}, \\ x_2'(t) = -(z_1(t) + 2w_1(t)) \frac{x_2(t)}{1-\theta}, \\ y_2'(t) = z_2(t), \\ z_2'(t) = -z_2(t) + 2w_2(t), \\ w_2'(t) = -2w_2(t) + (z_1(t) + 2w_1(t)) \frac{x_2(t)}{1-\theta}, \end{array} \right. \quad (3.20)$$

e o vetor de condições iniciais dado por  $h_0 = (\theta, 0, 0, 0, 1 - \theta, 0, 0, 0)$ . Utilizando o resultado A.4 do Teorema 3 do Apêndice A temos que:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{s \leq t} \left| \frac{H^n(s)}{n} - h(s) \right| = 0, \quad q.c., \quad \text{para todo } t > 0.$$

Vamos empregar as equações diferenciais apresentadas em (3.20) para encontrar as coberturas para o grafo completo bipartido. Mais precisamente vamos definir as seguintes quantidades  $x_{1,\infty} = \lim_{t \rightarrow \infty} x_1(t)$  e  $x_{2,\infty} = \lim_{t \rightarrow \infty} x_2(t)$ . As funções a seguir são de interesse para encontrar esses valores.

**Definição 4.** Para  $0 < \theta < 1$  e seja  $r_\theta = \theta/(1 - \theta)$  enunciamos as seguintes funções:

1. Seja  $f_1 : (0, \theta) \rightarrow \mathbb{R}$  tal que

$$f_1(x) = x - \theta \exp \left\{ -\frac{2}{r_\theta} \left( 1 - \exp \left\{ -2r_\theta \left( 1 - \frac{x}{\theta} \right) \right\} \right) \right\}, \quad (3.21)$$

2. e  $f_2 : (0, 1 - \theta) \rightarrow \mathbb{R}$  dada por

$$f_2(x) = x - (1 - \theta) \exp \left\{ -2r_\theta \left( 1 - \exp \left\{ -\frac{2}{r_\theta} \left( 1 - \frac{x}{1 - \theta} \right) \right\} \right) \right\}. \quad (3.22)$$

Com o objetivo de determinar os valores  $x_{1,\infty}$  e  $x_{2,\infty}$ , vamos inicialmente obter a solução para a primeira equação do sistema (3.20), relativa ao primeiro grupo do grafo bipartido

$$x_1(t) = c \exp \left( - \int_0^t \frac{(z_2(s) + 2w_2(s))}{\theta} ds \right). \quad (3.23)$$

As condições iniciais são dadas pela configuração definida por uma partícula ativada no grupo 1 do grafo bipartido, e as demais  $(n - 1)$  inativas, neste caso, temos  $x_1(0) = c$  e

considerando o limite  $n \rightarrow \infty$  resulta em  $c = \theta$ . Utilizando a terceira equação do sistema (3.20),  $z_2'(t) = -z_2(t) + 2w_2(t)$  obtemos

$$x_1(t) = \theta \exp \frac{1}{\theta} \left( - \int_0^t z_2(s) ds - \int_0^t (z_2(s) + z_2'(s)) ds \right). \quad (3.24)$$

Empregando neste momento a segunda equação  $y_2'(t) = z_2(t)$  do sistema (3.20) resulta em

$$x_1(t) = \theta \exp \frac{1}{\theta} (-2(y_2(t) - y_2(0)) - (z_2(t) - z_2(0))). \quad (3.25)$$

Dada as condições iniciais:  $y_2(0) = 0$ ,  $z_2(0) = 0$  e quando  $t \rightarrow \infty$ , temos que  $z_2(\infty) = 0$  e substituindo esses valores em (3.25) temos

$$x_{1,\infty} = \theta \exp \left( \frac{-2}{\theta} y_{2,\infty} \right). \quad (3.26)$$

Por meio do mesmo procedimento anterior obtêm-se a relação para a quantidade de vértices inativos na segunda partição  $x_{2,\infty}$

$$x_{2,\infty} = (1 - \theta) \exp \left( \frac{-2}{(1 - \theta)} y_{1,\infty} \right). \quad (3.27)$$

Fazendo  $t \rightarrow \infty$  restam apenas vértices não visitados e vértices vazios, de modo que:  $y_{1,\infty} = \theta - x_{1,\infty}$  e  $y_{2,\infty} = 1 - \theta - x_{2,\infty}$  e substituindo nas equações: (3.27) e (3.26):

$$x_{1,\infty} = \theta \exp \left( \frac{-2(1 - \theta)}{\theta} \right) \exp \left( \frac{2x_{2,\infty}}{\theta} \right), \quad (3.28)$$

$$x_{2,\infty} = (1 - \theta) \exp \left( \frac{-2\theta}{1 - \theta} \right) \exp \left( \frac{2x_{1,\infty}}{1 - \theta} \right). \quad (3.29)$$

De forma análoga pode-se encontrar as relações para  $y_{1,\infty}$  e  $y_{2,\infty}$

$$y_{1,\infty} = 1 - \theta \exp \left( \frac{-2y_{2,\infty}}{\theta} \right), \quad (3.30)$$

$$y_{2,\infty} = 1 - (1 - \theta) \exp \left( \frac{-2y_{1,\infty}}{1 - \theta} \right). \quad (3.31)$$

Combinando-se as soluções (3.28), (3.29) e por meio da função  $f_1(x)$  ( Definição 3.21), concluímos que  $x_{1,\infty}$  é a raiz dessa função no intervalo  $(0, \theta)$ . De fato obtemos:

$$f_1(x_{1,\infty}) = x_{1,\infty} - \theta \exp \left( \frac{-2}{r_\theta} \right) \exp \left( \frac{2}{r_\theta} e^{(-2r_\theta(1 - \frac{x_{1,\infty}}{\theta}))} \right) = 0, \quad (3.32)$$

dado  $r_\theta = \frac{\theta}{1-\theta}$ .

Na Figura 6 observa-se o comportamento da função  $f_1(x)$

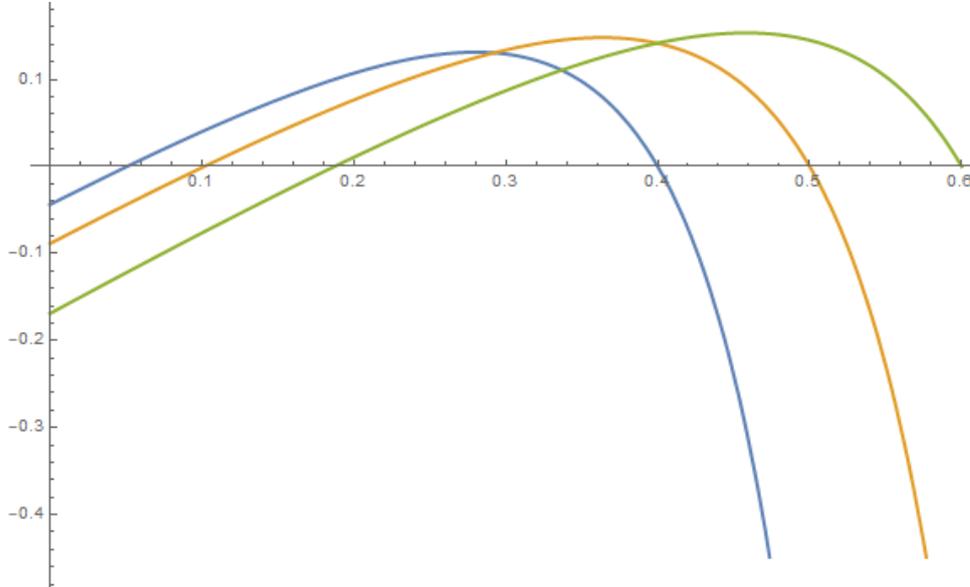


Figura 6 – As curvas da esquerda para a direita representam respectivamente a função  $f_1(x)$  com parâmetro de partição  $\theta = 0,4$ ,  $\theta = 0,5$  e  $\theta = 0,6$

Retornado agora para o caso dos vértices não visitados do segundo subconjunto do grafo bipartido  $x_{2,\infty}$ , de forma similar, considera-se a função  $f_2(x)$ , dada por (3.22) obtemos

$$f_2(x_{2,\infty}) = x_{2,\infty} - (1 - \theta) \exp(-2r_\theta) \exp\left(2r_\theta \exp\left(\frac{-2}{r_\theta}\right) \exp\left(\frac{2x_{2,\infty}}{\theta}\right)\right) = 0. \quad (3.33)$$

### 3.4 Discussão de resultados

O comportamento dinâmico de todas as variáveis do sistema (3.20) são apresentadas na Figura 7 para o caso do modelo dos sapos no grafo bipartido com  $n_1 = 8000$  e  $n_2 = 2000$ .

Observando a Figura 7 vemos que o primeiro conjunto do grafo bipartido completo GPB que inicialmente possuía uma proporção de vértices inativos  $x_1(0)$  de 0,8 se estabiliza com uma cobertura em torno de  $x_{1,\infty} = 0,5$  e conseqüentemente os vértices atingem uma proporção limite  $y_{1,\infty} = 0,3$ . no segundo conjunto do GBC temos que inicialmente  $x_2(0) = 0,2$  diminui ate ficar próxima de zero e conseqüentemente e deixar vazios cerca da totalidade dos vértices desse conjunto.

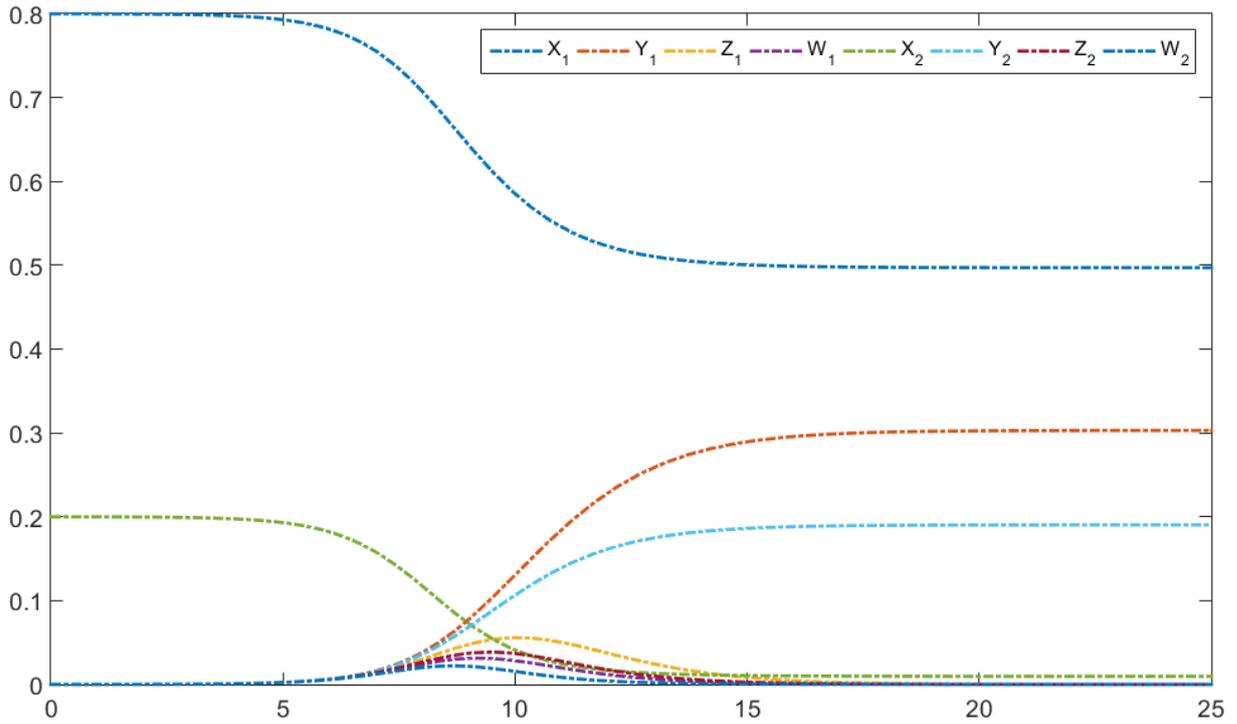


Figura 7 – Solução das EDOs do MS no gráfico bipartido completo, obtidas via método dependente da densidade com  $n_1 = 8000$  e  $n_2 = 2000$

### 3.4.1 Existência da solução

Substituindo  $x := x_{1,\infty}$  em (3.32) e calculando a derivada segunda de  $f_1(x)$  resulta em:

$$f_1''(x) = -4 \left[ \frac{2r_\theta}{\theta} + \frac{4e^{(-2r_\theta(1-\frac{x}{\theta}))}}{\theta} \right] \exp \left\{ \frac{-2 \left( 1 - e^{(-2r_\theta(1-\frac{x}{\theta}))} \right)}{r_\theta} - 2r_\theta \left( 1 - \frac{x}{\theta} \right) \right\}. \quad (3.34)$$

Como  $f_1''(x) < 0$ , a função  $f_1(x)$  ((3.32)) possui concavidade negativa para toda a reta  $x$  e para verificar a existência de pelo menos uma raiz no intervalo  $(0; x_0]$ . Dado que  $f_1(\theta) = 0$  e nota-se que na origem,  $x = 0$ , a função  $f_1(0)$  é negativa para todo  $\theta \in (0, 1)$

$$f_1(0) = -\theta \exp \left\{ -\frac{2}{r_\theta} \left( 1 - e^{\{-2r_\theta\}} \right) \right\}.$$

Por outro lado a função  $f_1(x)$  possui a seguinte derivada

$$f_1'(x) = 1 - 4 \exp \left( -\frac{2}{r_\theta} \left( 1 - e^{-2r_\theta(1-\frac{x}{\theta})} \right) - 2r_\theta \left( 1 - \frac{x}{\theta} \right) \right),$$

e em  $x = \theta$  assume o valor  $f_1'(\theta) = -3 < 0$ . Desta forma garanti-se que a função  $f_1(x)$  não é negativa para todo o domínio  $(0, \theta)$  pois a mesma não é tangente ao ponto  $x = \theta$  e nem crescente na sua vizinhança. Existe portanto uma raiz para  $f_1(x)$  no intervalo  $(0, \theta)$ .

O mesmo procedimento é válido para a função  $f_2(x)$ .

Analisando um pouco mais as soluções, apresentamos os valores das raízes  $x_{1,\infty}$  a seguir na Tabela 2 e calculados numericamente por meio do pacote Wolfram Mathematica 11.3

$\theta$	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
$x_1(\infty)$	0,0030	0,0097	0,0234	0,0508	0,1016	0,1874	0,3176	0,4971	0,7256

Tabela 2 – Valores de  $x_{1,\infty}$  em função de  $\theta$

e na Figura 8 temos os valores apresentados na tabela 2 e interpolados numericamente no gráfico das raízes  $x_{1,\infty}$  em função de  $\theta$ .

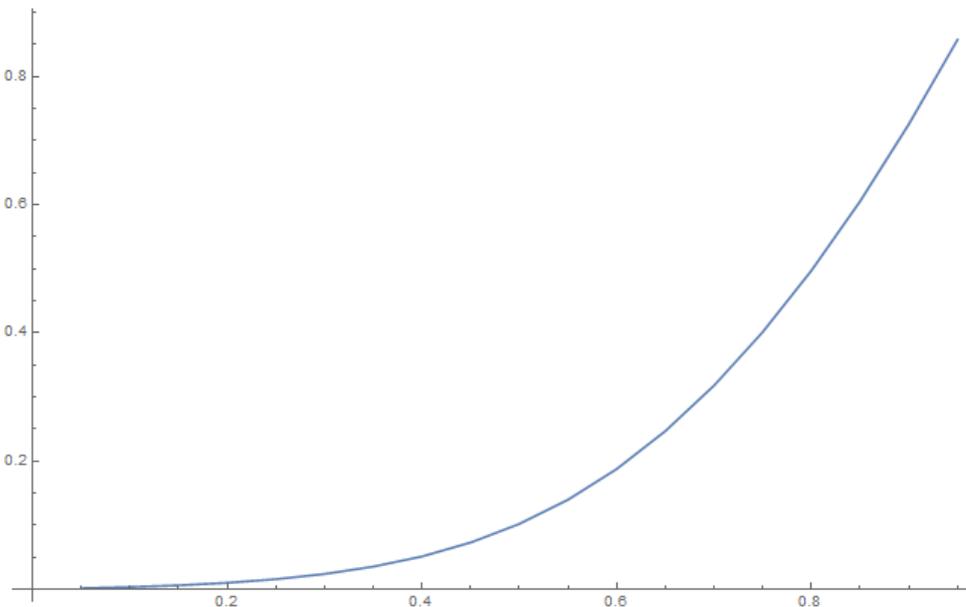


Figura 8 – Proporção de vértices não visitados  $x_{1,\infty}$  do grafo bipartido em função do parâmetro  $\theta$ .

Para consolidar os resultados no grafo bipartido com os resultados a serem apresentados nas demais abordagens, soma-se as quantidades determinadas para os dois subgrafos  $x(\infty) = x_{1,\infty} + x_{2,\infty}$  e  $y(\infty) = y_{1,\infty} + y_{2,\infty}$  para se obter as quantidades relativas ao grafo bipartido completo  $\mathcal{K}_{n_1, n_2}$  como um todo. Na Figura 9 temos a soma  $x(\infty) = x_{1,\infty} + x_{2,\infty}$  em função de  $\theta$ .

O gráfico da soma de  $x(\infty)$ , Figura 9, é simétrico em relação a  $\theta$ , possuindo ponto de mínimo em  $\theta = 0,5$ , determinando que a proporção total de vértices que continuam inativos no grafo  $x_{1,\infty} \approx 0,2$ , que é um resultado similar ao obtido para o caso grafo

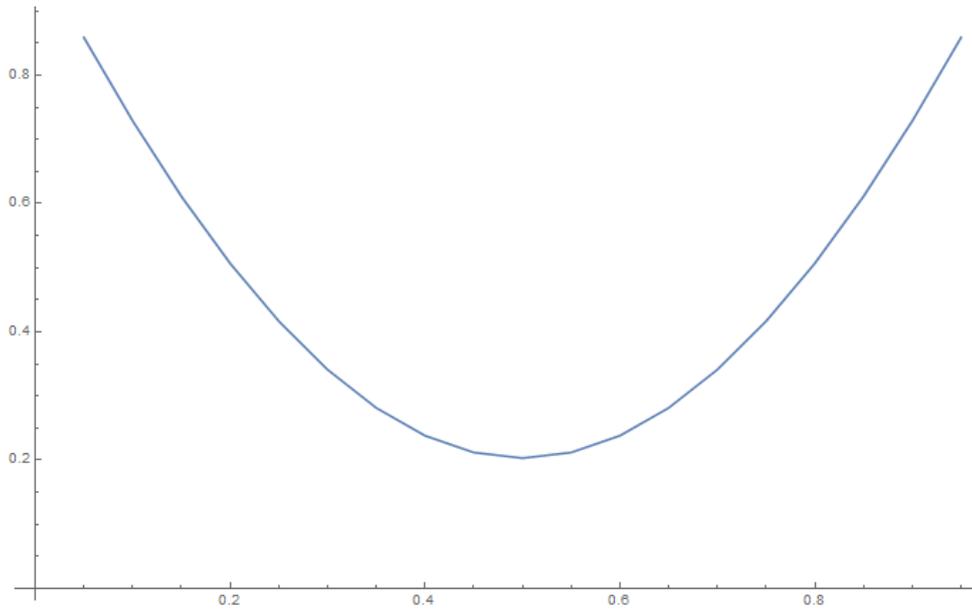


Figura 9 – Gráfico das soluções numéricas das soma das raízes de  $x(\infty) = x_{1,\infty} + x_{2,\infty}$  em função do parâmetro de partição:  $\theta$ .

completo (ver Figura 3). Nos casos onde o parâmetro de partição assume os valores  $\theta = 0,2$  e  $\theta = 0,8$ , determina que  $x(\infty)$ , para ambos os valores, são iguais e em torno de 0,5, estes resultados são devido a propriedade de simetria apresentada na soma  $x(\infty)$  e podem também serem observados somando os valores assintóticos relativos a  $x_1$  e  $x_2$  na Figura 7.

Para o caso análogo da quantidade  $y(\infty)$ , dado que  $y(\infty) = 1 - x(\infty)$ , temos que o seu respectivo gráfico é simétrico em relação ao eixo horizontal na Figura 9 e com concavidade negativa.



## 4 MÉTODO DE APROXIMAÇÃO POR CAMPO MÉDIO

### 4.1 Modelo geral das aproximações para grafos finitos

A abordagem apresentada aqui, denominada de aproximação por campo médio (ACM), esta aproximação é obtida empregando o método apresentado em (RODRIGUEZ et al., 2015) para um modelo análogo, de forma que, é possível fornecer uma descrição aproximada da evolução dos estados de cada vértice quando o modelo é definido em grafos finitos. Para este fim é empregado uma técnica de campo médio assume-se algumas premissas. Conforme apresentado no Capítulo 2 e de acordo com a definição geral do modelo dos sapos discutida em (2.1) para o grafo  $\mathcal{G}_n$ . Neste trabalho foram analisados os ajustes do modelo dos sapos utilizando a abordagem ACM para os grafos: completo, bipartido completo, grafos cíclicos  $C_{n,c}$ , onde  $c$  representa a quantidade de vizinhos conectados aos seus  $2k$  vértices mais próximos, sendo  $k$  um inteiro fixo.

Inicialmente apresenta-se as definições para as quantidades de interesse nesta abordagem, de forma que, cada estado do modelo é representado por meio da função  $\psi_t$  e define-se a seguinte notação:

$$\begin{cases} x_i(t) := P(\psi_t(i) = -1), \\ y_i(t) := P(\psi_t(i) = 0), \\ z_i(t) := P(\psi_t(i) = 1), \\ w_i(t) := P(\psi_t(i) = 2), \end{cases} \quad (4.1)$$

para todo  $i \in V$ .

Para determinar as quantidades apresentadas em (4.1) é necessário conhecer as probabilidades de transição associadas a uma janela temporal  $t + h$  utilizando o teorema da probabilidade total.

Exemplificando este procedimento para obter  $P(\psi_{t+h}(i) = 0)$ , temos

$$\begin{aligned} P(\psi_{t+h}(i) = 0) = & \\ & P(\psi_{t+h}(i) = 0 | \psi_t(i) = 0)P(\psi_t(i) = 0) + P(\psi_{t+h}(i) = 0 | \psi_t(i) = 1)P(\psi_t(i) = 1) \\ & + o(h). \end{aligned} \quad (4.2)$$

Onde o termo  $o(h)$  que aparece na equação é uma função  $f(x)$  tal que  $\lim_{h \rightarrow 0} f(h)/h = 0$ , além disso,  $o(h)$  representa a possibilidade (mesmo quando remota) da ocorrência de uma transição do estado 2 para o estado 0, o qual implica em duas marcas (ou eventos) no mesmo intervalo de tempo  $(t, t + h)$  em um processo de Poisson. Neste caso, isto implica

que as probabilidades condicionais tais que:  $P(\psi_{t+h}(i) = 0 | \psi_t(i) = 2) = o(h)$ . Quaisquer transições remotas similares serão também representadas por  $o(h)$ .

Seja  $i$  um vértice contendo uma única partícula ativa, a probabilidade de que a partícula salte espontaneamente, em um tempo exponencial e após isso deixe o vértice  $i$  vazio, é dada por:  $P(\psi_{t+h}(i) = 0 | \psi_t(i) = 1) = h + o(h)$ . Substituindo esses resultados na equação (4.2), obtemos a relação para a probabilidade

$$P(\psi_{t+h}(i) = 0) = P(\psi_t(i) = 0) + (h + o(h))P(\psi_t(i) = 1) + o(h), \quad (4.3)$$

rearranjando os termos, temos que

$$P(\psi_{t+h}(i) = 0) - P(\psi_t(i) = 0) = (h + o(h))P(\psi_t(i) = 1) + o(h).$$

Finalmente, como  $y'_i(t) = \lim_{h \rightarrow \infty} \frac{y_i(t+h) - y_i(t)}{h}$  obtemos a equação diferencial  $y'_i(t) = z_i(t)$ .

A probabilidade de um vértice  $i$  conter uma partícula ativa no tempo  $t + h$  é dada por  $P(\psi_{t+h}(i) = 1)$  :

$$P(\psi_{t+h}(i) = 1) = (1 - (h + o(h))) P(\psi_t(i) = 1) + (2h + o(h))P(\psi_t(i) = 2) + o(h). \quad (4.4)$$

Por meio do mesmo procedimento para  $P(\psi_t(i) = 0)$  obtemos que

$$z'_i(t) = 2w_i(t) - z_i(t).$$

Entretanto, as probabilidades da mudança de estado do tipo  $P(\psi_{t+h}(i) = 2 | \psi_t(i) = -1)$  são não espontâneas e neste caso dependem da configuração dos outros vértices diferentes de  $i$  no grafo  $\mathcal{G}_n$ . Para obter as probabilidades derivadas dos casos não espontâneos é necessário definir o seguinte evento auxiliar:  $\mathcal{C}_{j,i}(h)$ , que consiste em interseções dos seguintes eventos:

(i) Existe apenas uma única marcação de Poisson no intervalo de tempo  $(t, t + h)$  associada ao vértice  $j$ , (ii) uma partícula ativa em  $j$ , salta para  $i$  no intervalo  $(t, t + h)$ . (iii)  $\psi_s(j) \in \{1, 2\}$ , para  $t < s \leq t + h$ . A probabilidade de saltos relativa a (ii), é dada por  $\frac{A_{j,i}}{k_j}$ , onde  $A_{j,i}$  é o elemento  $i, j$  da matriz da adjacência  $A$  e  $k_j$  é o grau do vértice  $j$  (ver essas definições em 2.2).

Todas essas propriedades podem ser expressas na seguinte equação:

$$\begin{aligned}
P(\psi_{t+h}(i) = 2 \mid \psi_t(i) = -1) = \\
P\left(\psi_{t+h}(i) = 2 \mid \bigcup_{j=1}^n \mathcal{C}_{j,i}(h), \psi_t(i) = -1\right) P\left(\bigcup_{j=1}^n \mathcal{C}_{j,i}(h) \mid \psi_t(i) = -1\right) \\
+ o(h). \quad (4.5)
\end{aligned}$$

O primeiro termo do lado direito de (4.5) é igual a 1, visto que, dado o estado do vértice de chegada  $i$  ser inativo no tempo  $t$  e a ocorrência do evento  $\mathcal{C}_{j,i}$  no intervalo de tempo  $h$  implica que em  $t + h$  a partícula ativa oriunda de  $j$  ative a partícula inativa que existia em  $i$ , conforme premissas do modelo dos sapos adotada, impomos uma aproximação assumindo inicialmente a seguinte condição :

$$P\left(\bigcup_{j=1}^n \mathcal{C}_{j,i}(h) \mid \psi_t(i) = -1\right) = \sum_{j=1}^n P(\mathcal{C}_{j,i}(h) \mid \psi_t(i) = -1) + o(h).$$

Dado que a ativação das partículas só é possível quando o vértice de saída  $j$  conter 1 ou 2 partículas ativas, segue a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
P(\psi_{t+h}(i) = 2 \mid \psi_t(i) = -1) = \\
\sum_{j=1}^n P(\mathcal{C}_{j,i}(h) \mid \psi_t(j) = 1, \psi_t(i) = -1) P(\psi_t(j) = 1 \mid \psi_t(i) = -1) \\
+ P(\mathcal{C}_{j,i}(h) \mid \psi_t(j) = 2, \psi_t(i) = -1) P(\psi_t(j) = 2 \mid \psi_t(i) = -1) \\
+ o(h). \quad (4.6)
\end{aligned}$$

De acordo com nosso formalismo, adotam-se também as seguintes condições de independência:

$$\begin{aligned}
P(\psi_t(j) = 1 \mid \psi_t(i) = -1) &= P(\psi_t(j) = 1), \\
P(\psi_t(j) = 2 \mid \psi_t(i) = -1) &= P(\psi_t(j) = 2),
\end{aligned}$$

e os primeiros termos de (4.6) são calculados como:

$$\begin{aligned}
P(\mathcal{C}_{j,i}(h) \mid \psi_t(j) = 1, \psi_t(i) = -1) &= \frac{A_{j,i}}{k_j} (h + o(h)), \\
P(\mathcal{C}_{j,i}(h) \mid \psi_t(j) = 2, \psi_t(i) = -1) &= \frac{A_{j,i}}{k_j} (2h + o(h)).
\end{aligned}$$

Substituindo esses resultados em (4.6) obtemos que

$$P(\psi_{t+h}(i) = 2 \mid \psi_t(i) = -1) = \sum_{j=1}^n \frac{A_{j,i}}{k_j} [(h + o(h)) P(\psi_t(j) = 1) + (2h + o(h)) P(\psi_t(j) = 2)]. \quad (4.7)$$

Este resultado constitui a relação básica da nossa aproximação via campo médio. Empregando agora o teorema da probabilidade total para  $P(\psi_{t+h}(i) = 2)$ , temos que

$$P(\psi_{t+h}(i) = 2) = P(\psi_{t+h}(i) = 2 \mid \psi_t(i) = 2)P(\psi_t(i) = 2) + P(\psi_{t+h}(i) = 2 \mid \psi_t(i) = -1)P(\psi_t(i) = -1) + o(h). \quad (4.8)$$

Substituindo agora (4.7) em (4.8) e rearranjando os termos da equação anterior, temos que

$$P(\psi_{t+h}(i) = 2) - P(\psi_t(i) = 2) = -(2h + o(h))P(\psi_t(i) = 2) + \left( \sum_{j=1}^n \frac{A_{j,i}}{k_j} (h + o(h)) P(\psi_t(j) = 1) + (2h + o(h)) P(\psi_t(j) = 2) \right) P(\psi_t(i) = -1) + o(h). \quad (4.9)$$

Dividindo (4.9) por  $h$  e tomando o limite quando  $h \rightarrow 0$ , segue que:

$$w'_i(t) = -2w_i(t) - \sum_{j=1}^n \frac{A_{i,j}}{k_j} (z_j(t) + 2w_j(t))x_i(t).$$

Seguindo procedimentos similares, obtemos as equações para  $x'_i(t)$ . Desta forma obtemos o seguinte conjunto de equações diferenciais ordinárias :

$$\begin{cases} x'_i(t) = -\sum_{j=1}^n \frac{A_{j,i}}{k_j} (z_j(t) + 2w_j(t)) \times x_i(t), \\ y'_i(t) = z_i(t), \\ z'_i(t) = -z_i(t) + 2w_i(t), \\ w'_i(t) = -2w_i(t) + \sum_{j=1}^n \frac{A_{j,i}}{k_j} (z_j(t) + 2w_j(t)) \times x_i(t). \end{cases} \quad (4.10)$$

A partir deste ponto, denominamos o sistema (4.10) como a abordagem das aproximações via campo médio para o modelo dos sapos no grafo finito ou resumidamente como método ACM.

#### 4.1.1 Redução ao grafo completo

Para o caso em que  $\mathcal{G}_n$  é o grafo completo de  $n$  vértices, o sistema de equações diferenciais cuja solução se aproxima das trajetórias do processo estocástico para valores suficientemente grandes de  $n$ . Foi obtido previamente em (3.4) por meio da aplicação dos teoremas de convergência no modelo abordado na Seção 3.1.

Por outro lado se consideramos que as quantidades  $x(t)$ ,  $y(t)$ ,  $z(t)$  e  $w(t)$  que representam as proporções de vértices em cada categoria no instante  $t$  suficientemente homogêneas, quando o grafo finito for o grafo completo então as respectivas quantidades características do sistema das aproximações (4.10) podem ser consideradas tecnicamente indistinguíveis do vértice  $i$ , resultando nas equações:

$$\begin{cases} x'(t) = -(z(t) + 2w(t))x(t), \\ y'(t) = z(t), \\ z'(t) = -z(t) + 2w(t), \\ w'(t) = -2w(t) + (z(t) + 2w(t))x(t), \end{cases} \quad (4.11)$$

ou seja, no grafo completo os resultados da ACM no modelo dos sapos são idênticos aos obtidos através do sistema de EDOs 3.4 da abordagem CMDD.

## 4.2 Programas para o cálculo numérico da aproximação via campo médio

Com o intuito de calcular as trajetórias  $x_i(t)$ ,  $y_i(t)$ ,  $z_i(t)$  e  $w_i(t)$  para cada vértice  $i$  em cada tempo  $t$ , implementamos uma função no Matlab para computar os valores numericamente e possibilitar analisar o modelo dos sapos para qualquer tipo de grafo finito desejável.

Código 4.1 – Função para cálculo numérico do sistema de equações (4.10)

---

```

1
  function dydt = fn_sapo_v(t,y,N,A,K)
3 dydt = zeros(4*N,1);
  count = 0;
5 for i = 1:N
  s = 0.0;
7 countj = 0;
  for j = 1:N
9 s = s + A(j,i)*(y(j+2+countj)+2.0*y(j+3+countj))/K(j) ;
  countj = countj + 3;
11 end

```

---

```

13 dydt(i+count) = -s*y(i+count);
    dydt(i+1+count) = y(i+2+count);
15 dydt(i+2+count) = -y(i+2+count) + 2.0*y(i+3+count);
    dydt(i+3+count) = -2.0*y(i+3+count) + s*y(i+count);
17 count = count + 3;
    end
19 end

```

---

Os dados de entrada para os métodos computacionais no geral são definidos pelo tamanho do grafo finito  $n$  e sua matriz de adjacência  $A = (A_{i,j})_{n \times n}$  associada. Os demais valores especificados na função como: a janela temporal, definida por  $T_{max}$  os vetores das variáveis, dado por  $y$  e dos graus de cada vértice  $K$  são construídos no programa para o método das aproximações. A função, nomeada como `fn_sapo_v1`, é evocada a partir do programa base da simulação do modelo dos sapos pela função de solução numérica `ode45` do Matlab.

---

Código 4.2 – Programa Base para o método das aproximações de campo médio

---

```

1 %inicializacoes
  % Numero de vertices do grafo finito
3 N=1000;
  % Grau de cada vertice,
5 % numero de vizinhos a direita e esquerda de cada vertice = 2k
  c= 10;
7 Tmax = 50;
  lambda = 1;
9 % Matriz de adjacencia do Grafo finito
  %(neste exemplo, grafo small world)
11 A = zeros(N);
    for i=1:N
13 for j=1:N
        if i==j
15 A(i , j)=0 ;
            elseif min(N- abs(i-j) , abs(i-j)) >=0 &&
17 min(N- abs(i-j) , abs(i-j)) <= c/2
                A(i , j)=1 ;
19 end
        end
21 end
    K = sum(A);
23

```

---

```

    %Vetor de condicoes iniciais para cada vertice
25 y0 = zeros(4*N,1);
    count = 0;
27
    % 1 Sapo ativo inicialmente no vertice 1
29 y0(1)= 0 ; y0(2)= 0 ; y0(3)= 1 ; y0(4)= 0 ;
    for i = 5:N+3
31 % Apenas sapos inativos nos demais vertices
    y0(i+count) = 1;      %x(i)
33 y0(i+1+count) = 0;    %y(i)
    y0(i+2+count) = 0;    %z(i)
35 y0(i+3+count) = 0;    %w(i)
    count = count + 3;
37 end

39 %-----
    %Aproximacao Numerica
41 %-----
    %Funcao para definir o sistema EDO do modelo do Sapo
43 ode = @(t,y) fn_sapo_v1(t,y,N,A,K);
    [t,y] = ode45(ode,[0,Tmax], y0);    %Solver de MATLAB
45
    %Solucoes em cada tempo
47 m = size(y); m = m(1,1);

49 x_i = zeros(m,N);
    y_i = zeros(m,N);
51 z_i = zeros(m,N);
    w_i = zeros(m,N);
53
    for i = 1:m
55 count = 0;
    for j =1:N
57 x_i(i,j) = y(i,j+count);      %x_i
    y_i(i,j) = y(i,j+1+count);  %y_i
59 z_i(i,j) = y(i,j+2+count);  %z_i
    w_i(i,j) = y(i,j+3+count);  %w_i
61 count = count + 3;
    end

```

63 **end**

```
65 prom_y = zeros(m,4);
    prom_y(:,1) = ((1/N)*sum(x_i'))';           %Media para x_i
67 prom_y(:,2) = ((1/N)*sum(y_i'))';           %Media para y_i
    prom_y(:,3) = ((1/N)*sum(z_i'))';           %Media para z_i
69 prom_y(:,4) = ((1/N)*sum(w_i'))';           %Media para w_i

71 %Grafico da media da solucao para cada vertice
    plot(t, prom_y(:,1:4), 'LineWidth',2, 'LineStyle', '-.')
73 legend('Ina', 'Vag', '1S', '2S')
```

---

## 5 SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS PARA O MODELO DOS SAPOS NUM GRAFO FINITO

Foi desenvolvido um programa de simulação computacional com o propósito de fornecer os resultados do modelo dos sapos para um grafo finito qualquer em uma dada janela de tempo, para cumprir os objetivos de avaliar a qualidade das previsões fornecidas pelo método das aproximações via campo médio e consequentemente verificar o comportamento dinâmico e a validade das premissas adotados nesta abordagem.

O método usual para simular processos estocásticos para cadeias de Markov a tempo contínuo é amplamente conhecido como Algoritmo de Gillespie (GILLESPIE, 1976). Esse método foi proposto por Gillespie em 1976 para simular os processos da cinética química (área que estuda a velocidade das reações químicas) numa abordagem estocástica. O algoritmo (ver B) assume que, no processo as moléculas estão espalhadas numa dada caixa de volume  $V$  e as suas colisões são aleatórias e com frequência dada pelas taxas  $\lambda$  de cada transição. O algoritmo padrão funciona bem para diversas aplicações, tais como: reações químicas e processos biológicos, com certa homogeneidade de interações, porém seus resultados podem ser impraticáveis para certas situações devido a limitações de tempo computacional requerido na sua implementação. Para contornar alguns desses casos Gillespie propôs métodos alternativos, como por exemplo, o método  $\tau$  leap. (BANKS et al., 2012)

Para o caso específico do modelo dos sapos em um grafo finito qualquer, não é adequado nenhum desses métodos derivados do algoritmo de Gillespie, pois o mesmo supõe uma propriedade de interações razoavelmente homogêneas, como por exemplo, as reações químicas e consequentemente mais indicado para dinâmicas em grafos densos, como por exemplo, no grafo completo. Para contornar esta limitação foi desenvolvido um código para simular a dinâmica de cada uma das partículas para o modelo dos sapos no grafo finito qualquer e calcular as quantidades de interesse a cada incremento de tempo.

### 5.1 Programa Simulação do processo estocástico dos sapos

A simulação, apresentada a seguir, foi desenvolvida em Matlab R2015a com o objetivo de criar computacionalmente o processo das partículas percorrendo um dado grafo finito, de forma que, a partir da escolha do posicionamento inicial da primeira partícula ativa, os estados subsequentes de cada vértice evoluam a cada evento, dado pelo salto das partículas ativas. Os valores iniciais e parâmetros necessários são dados então pela posição inicial da partícula ativa, o número de vértices do grafo  $n$ , a janela temporal da processo  $T_{max}$  e a matriz de adjacências  $A$  (a qual se especifica o tipo de grafo finito empregado na simulação).

Por exemplo, para o caso do modelo no grafo completo a matriz de adjacência é dada por

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 0 & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \dots & 0 \end{pmatrix}.$$

Após a entrada dos dados são calculados os graus de cada vértice e suas listas de adjacências, são definidos vetores indicadores do posicionamento e o estado de cada partícula, todas as demais condições e atualizações a partir daí são baseadas na posição da partícula ativa e na escolha aleatória uniforme de qual vértice adjacente de destino será ativado. Para cada vértice e incremento de tempo são registrados numa tabela cada um dos quatro diferentes estados. A matriz  $A$  é atualizada e no fim do processo são calculadas as médias para cada quantidade de interesse  $x(t)$ ,  $y(t)$ ,  $z(t)$ ,  $w(t)$  e apresentados num gráfico contendo suas trajetórias ao longo do intervalo  $[0, T_{max}]$ .

---

Código 5.1 – Programa para simular o modelo dos sapos num grafo finito

---

```

1 N = 1000;
  Tmax = 100;
3 lambda = 1;

5 % Matriz de adjacencia, exemplo para o grafo completo
  A = ones(N) - eye(N);
7 k = sum(A);

9
  % construindo lista de adjacencias do grafo
11 LA = {};
  for i=1:N
13 v_tmp = zeros(k(i),1);
    ki=1;
15
    for j=1:N
17 if A(i,j) == 1
      v_tmp(ki) = j;
19 ki = ki+1;
    end
21 end

23 LA{i} = v_tmp;

```

---

```
end
25
    % vetor inicial de estados (s(i) e posicao do sapo i)
27 s = -ones(2*N,1);

29 % estados iniciais dos vertices da rede
    v = zeros(N,4);
31
    % condicao inicial: Sapo no vertice 1
33 s(1) = 1;
    Ns = 1; % Numero de sapos vivos
35 v(1,3) = 1;
    v(2:N,1) = ones(N-1,1);
37
    t = 0;
39 Psi = [];
    Psi = [Psi; [t, sum(v)/N]];
41 while t <= Tmax && Ns >= 1
    % incremento do tempo
43 t = t + (1/(lambda*Ns));

45 % escolhe um sapo aleatoriamente
    s_atual = randi(Ns);
47
    % vertice em que o sapo esta
49 no_sapo = s(s_atual);

51 % vertice (vizinho na rede) em que o sapo vai pular
    viz_sapo = LA{no_sapo}(randi(k(no_sapo)));
53
    if v(viz_sapo, 1) == 1
55 % sapo pula para um vertice inativo
        s(s_atual) = viz_sapo;
57
        % nasceu o sapo novo
59 Ns = Ns+1;
        s(Ns) = viz_sapo;
61 v(viz_sapo, 1) = 0;
        v(viz_sapo, 4) = 1;
```

```
63
    % atualizando o estado da rede
65 if v(no_sapo, 3) == 1
    % havia somente um sapo
67 v(no_sapo, 2) = 1;
    v(no_sapo, 3) = 0;
69 else
    % haviam 2 sapos
71 v(no_sapo, 3) = 1;
    v(no_sapo, 4) = 0;
73 end

75 else
    % atualizando o estado da rede
77 if v(no_sapo, 3) == 1
    % havia somente um sapo
79 v(no_sapo, 2) = 1;
    v(no_sapo, 3) = 0;
81 else
    % haviam 2 sapos
83 v(no_sapo, 3) = 1;
    v(no_sapo, 4) = 0;
85 end

87 s(s_atual) = s(Ns);
    s(Ns) = -1;
89
    % sapo pula para um vertice vazio
91 % ou sapo pula para um vertice com 1 sapo
    % ou o sapo pula para um vertice com 2 sapos
93 Ns = Ns-1;
    end
95
    Psi = [Psi; [t, sum(v)/N]];
97
    disp([t, sum(v)])
99 end

101 plot(Psi(:,1), Psi(:,2:5), 'o-')
```

`legend( 'Ina' , 'Vag' , '1S' , '2S' )`

---

A performance do programa é satisfatória para uma realização do processo, com um tempo de processamento razoável para grafos com  $n \leq 10.000$  e com janela temporal de até  $T_{max} = 1000$ , a partir destes parâmetros e a depender das características do grafo como regularidade e densidade (ver Seção 2.2 ) o tempo de processamento vai sendo impactado. Estas conclusões foram obtidas a medida que foram se processando varias realizações, não foi feita uma análise estatística minuciosa para coletar os dados de tempo de processamento do programa e fazer um resumo dos mesmos pois este não era o escopo deste trabalho.



## 6 COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DO MODELO DOS SAPOS VIA SIMULAÇÃO E MÉTODO DA APROXIMAÇÃO

Nos capítulos anteriores foram apresentadas três diferentes abordagens para analisar o modelo dos sapos MS. Recordando que na primeira abordagem (Capítulo 3) foram obtidas as aproximações determinísticas e os resultados para as proporções limites por meio do método das cadeias de Markov dependentes da densidade CMDD. Essa abordagem possui a premissa de que as taxas das transições sejam normalizadas por  $n$  (Ver Apêndice A). Pode-se considerar esse método efetivamente apropriado ao modelo dos sapos nos grafos completos e bipartidos completos, porém não é aplicável na maioria dos casos dos grafos finitos.

A segunda abordagem, denominada aproximação via campo médio ACM (Capítulo 4), possui a finalidade de propor um método generalizado, porém aproximado, para o modelo num grafo finito qualquer, esta abordagem permitiu obter um sistema de equações aproximadas para o modelo dos sapos a partir de poucas pressuposições. Na terceira abordagem, foi desenvolvido um programa para a simulação estocástica dos passeios aleatórios das partículas percorrendo um dado grafo finito (capítulo 5).

Com base nessas abordagens, temos como objetivo desta seção analisar o desempenho e confrontar os diferentes resultados gerados pelo método ACM, fornecido pelo sistema (4.10), com os resultados gerados pela simulação estocástica e também por meio dos resultados na Seção 3.3 referente a abordagem 1 no caso do grafo bipartido completo (BP).

### 6.1 Grafo bipartido completo

Na seção 3.3 foram apresentados os resultados analíticos demonstrados matematicamente para o modelo dos sapos no grafo BP, pelo método das aproximações determinísticas via abordagem CMDD. Iniciaremos aqui, uma discussão a partir dos resultados dessa abordagem comparativamente aos fornecidos pelo programa de simulação para o modelo dos sapos no grafo bipartido completo.

Na figura 10 temos os resultados do modelo dos sapos em três grafos bipartidos com diferentes parâmetros de partição. Inicialmente (i.e. em  $t = 0$ ) uma partícula ativa habita um vértice do primeiro subgrupo do grafo BP e os resultados foram gerados na forma de proporção agregada total, ou seja, as quantidades de interesse são somadas para ambos os grupos e para cada um dos seus estados. Na Figura 10.1, o grafo possui uma partição  $\theta = 0, 1$ , com  $n = 10.000$  vértices, conseqüentemente  $n_1 = 1.000$  para o primeiro subgrupo e  $n_2 = 9.000$  no segundo. Na Figura 10.2, vemos os resultados para o  $\theta = 0, 2$  e por último, na Figura 10.3 temos  $\theta = 0, 5$ , deste modo, ambos os conjuntos possuem

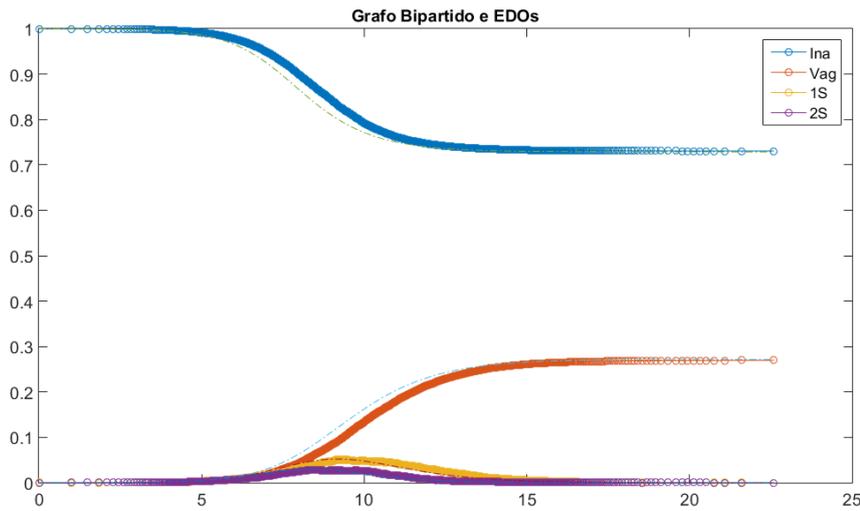
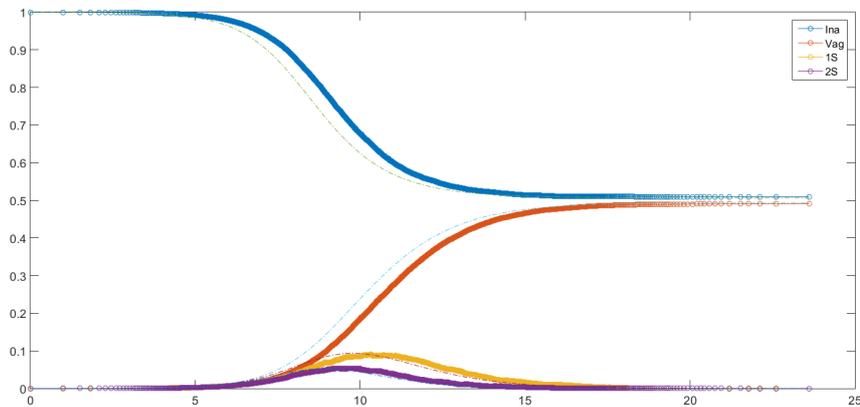
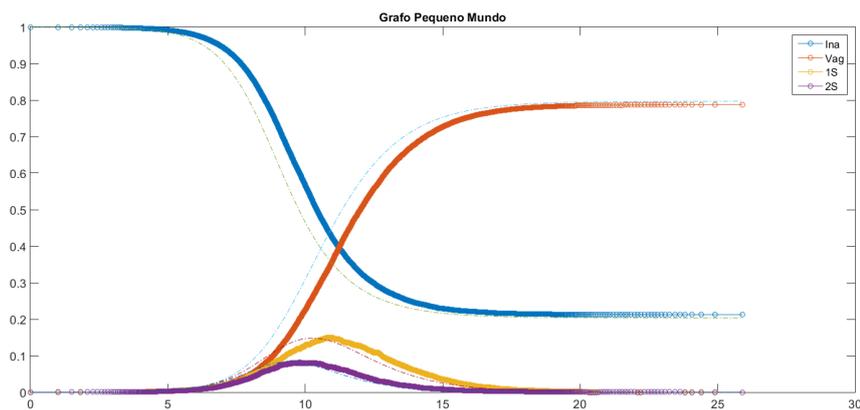
10.1: Grafo BP com  $\theta = 0.1$ ,  $n_1 = 1000$  e  $n_2 = 9000$ 10.2: Grafo BP com  $\theta = 0.2$ ,  $n_1 = 2000$  e  $n_2 = 8000$ 10.3: Grafo BP com  $\theta = 0.5$ ,  $n_1 = 5000$  e  $n_2 = 5000$ 

Figura 10 – Comparação entre os resultados para os estados Inativos - ("Ina"), Vagos - ("Vag"), contendo "1" partícula ativa - ("1S") e com "2" partículas - ("2S") do método das CMDs (em linhas tracejadas) em relação aos valores simulados (em linhas grossas) do modelo dos sapos percorrendo três diferentes grafos bipartidos completos (BP) com  $n = 10.000$  e  $\theta = 0,1$  para o primeiro caso (Figura 10.1). com  $\theta = 0,2$  (Figura 10.2) e por último  $\theta = 0,5$  (Figura 10.3)

mesmo tamanho  $n_1 = n_2 = 5000$ . Os resultados da simulação do processo são apresentados em linhas grossas enquanto que os resultados do método das CMDDs são mostrados em linhas tracejadas.

Os resultados gerais do método das CMDDs diferem muito pouco em relação ao processo simulado computacionalmente (para o modelo dos sapos no grafo BP) e essa diferença diminui assintoticamente em todos os casos observados. Isto indica que os resultados para as proporções limites são razoavelmente equivalentes nas duas abordagens. Observa-se novamente o efeito da simetria, comentada na seção 3.4, no caso quando o grafo bipartido completo possui partição  $\theta = 0.2$  em relação ao grafo com  $\theta = 0.5$  (respectivamente nas Figuras 10.2 e 10.3). Este resultado pode ser entendido observando a característica da curva apresentada na Figura 9 que mostra os valores da soma  $x(\infty) = x_{1,\infty} + x_{2,\infty}$  em função do parâmetro  $\theta$  que é simétrica em torno da reta vertical com  $\theta = 0.5$ .

## 6.2 Grafo $2k$ cíclico

Considera-se aqui as análises para o modelo dos sapos percorrendo um grafo denominado de  $2k$ -cíclico de  $n$  vértices, também citado em alguns casos como grafo pequeno mundo regular. Tal grafo é obtido a partir de  $n$  vértices arranjados em um ciclo e conectando cada vértice  $i$  com seus  $k$  vértices vizinhos mais próximos à esquerda e  $k$  vizinhos mais próximos da direita, de modo que  $c := 2k$ , representa o grau de cada vértice. Defini-se os grafos cíclicos resumidamente por  $C_{n,c}$  e um exemplo de um grafo cíclico  $C_{10,4}$  é apresentado na Figura 11.

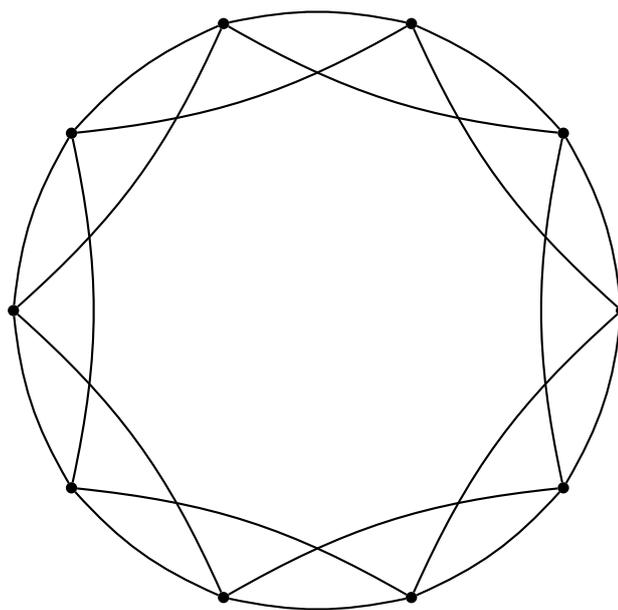


Figura 11 – Grafo cíclico  $C_{n,c}$  com  $c = 4$  e 10 vértices.

As trajetórias para cada quantidade, para a abordagem ACM, foram calculadas por meio das equações diferenciais (4.10) para os grafos  $C_{n,c}$  e apresentadas na Figura 12 para diferentes valores do parâmetro  $c$ .

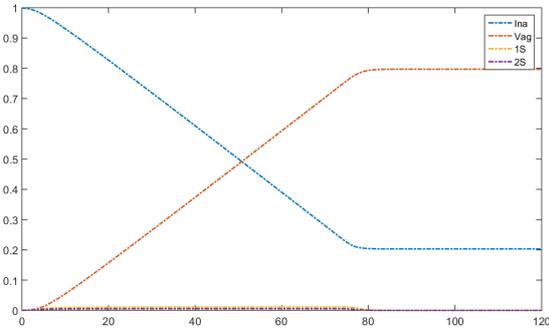
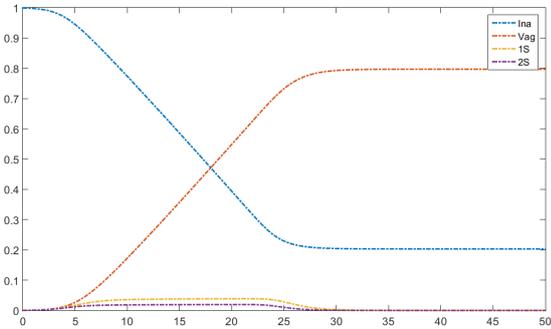
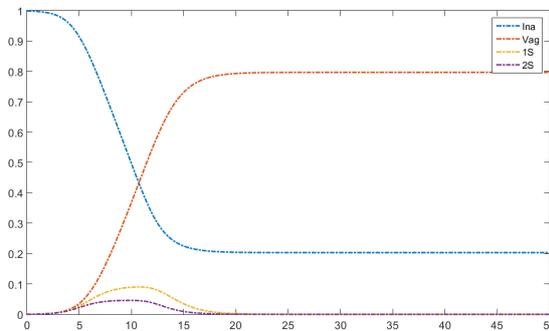
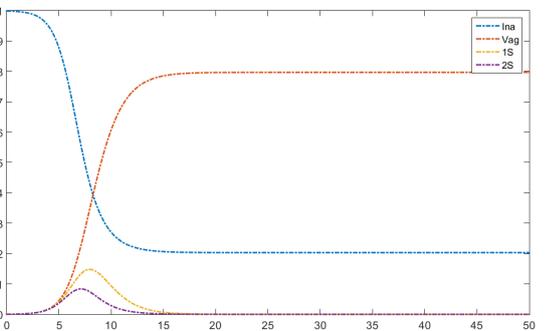
12.1: Grafo cíclico  $c = 10$ 12.2: Grafo cíclico  $c = 40$ 12.3: Grafo cíclico  $c = 100$ 12.4: Grafo cíclico  $c = 498$ 

Figura 12 – Aproximação de campo médio do modelo dos sapos em  $C_{n,c}$  para  $n = 1000$  e diferentes valores de  $c$ .

A Figura acima apresenta uma inconsistência para o método ACM neste caso, pois as proporções limites possuem sempre os valores previstos para o grafo completo mesmo para pequenos valores de  $c$ , o que de fato não é o resultado previsto para este caso o que implica em uma limitação da ACM no contexto de alguns grafos finitos.

Apesar do método computacional não ser um resultado analítico como uma prova matemática é uma poderosa ferramenta e fornece resultados válidos, reprodutíveis e estatisticamente significativos, visto que a simulação foi confrontada com os resultados analíticos da abordagem CMDDD onde apresentou ótimo desempenho. A simulação será empregada agora para avaliar o modelo dos sapos na grafo  $C_{n,c}$  e comparar seus resultados com os previstos pelo método das aproximações. O programa 5.1 foi desenvolvido para "imitar" o passeio das partículas em qualquer grafo finito e se baseia na matriz de adjacência e leva em conta todas as propriedades do processo e não necessita de condições restritivas ou irreais ao modelo teórico. As ACMs, por sua vez, necessitaram de algumas pressuposições (conforme descrito no Capítulo 4).

Voltando a atenção para o método computacional. Foram considerados os processo

estocásticos do MS em grafos  $C_{n,c}$  com tamanho fixado em  $n = 1.000$  vértices. Neste caso, a configuração inicial com uma partícula ativa em um vértice do grafo e os outros 999 vértices, habitados por partículas inativas. Uma definição também necessária ao programa é a matriz de adjacência  $A$  do grafo  $C_{n,c}$ , que foi definida por meio do seguinte algoritmo

$$\begin{cases} A_{i,j} = 1, \text{ se e somente se } 0 \leq \min(n - |i - j|, |i - j|) \leq \frac{c}{2}, \\ A_{i,j} = 0, \text{ caso contrário.} \end{cases}$$

Com posse de todas essas informações e dos parâmetros de entrada necessários, foram gerados os resultados apresentados nas Figuras 13 e 14.

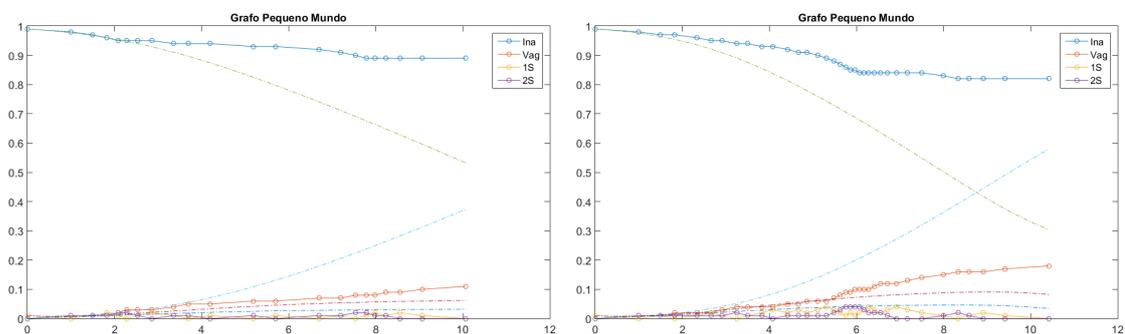
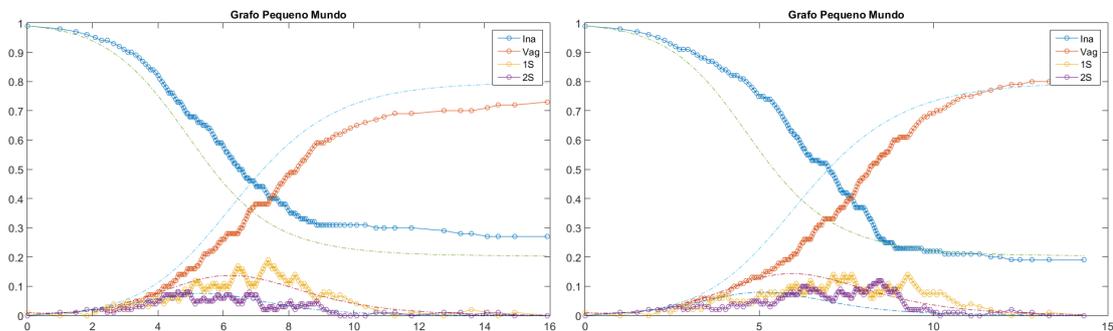
13.1: Grafo cíclico  $c = 6$ 13.2: Grafo cíclico  $c = 10$ 13.3: Grafo cíclico  $c = 24$ 13.4: Grafo cíclico  $c = 30$ 

Figura 13 – Solução computacional (linhas grossas) comparadas com aproximações via campo médio (linhas finas) do modelo dos sapos em  $C_{n,c}$  para  $n = 100$  para diferentes valores de  $c$ .

Observa-se que, a medida que  $c$  aumenta, a proporção de vértices visitados por qualquer partícula ativa em  $C_{n,c}$  também aumenta. Intuitivamente isto se deve ao fato de que, para valores pequenos de  $c$ , aumentam-se as chances das partículas ativas visitarem novamente vértices previamente visitados nos primeiros estágios do processo. Segundo essa lógica, a tendência natural é que o processo finalize rápido.

Pode-se observar este comportamento nas Figuras: 13.1 bem como em 14.1, que mostram os resultados do MS nos grafos  $C_{n,c}$  para dois tamanhos fixos diferentes de  $n$  e nestes casos, para  $c = 6$  para o grafo com  $n = 100$ , comparado com  $c = 20$  para o grafo

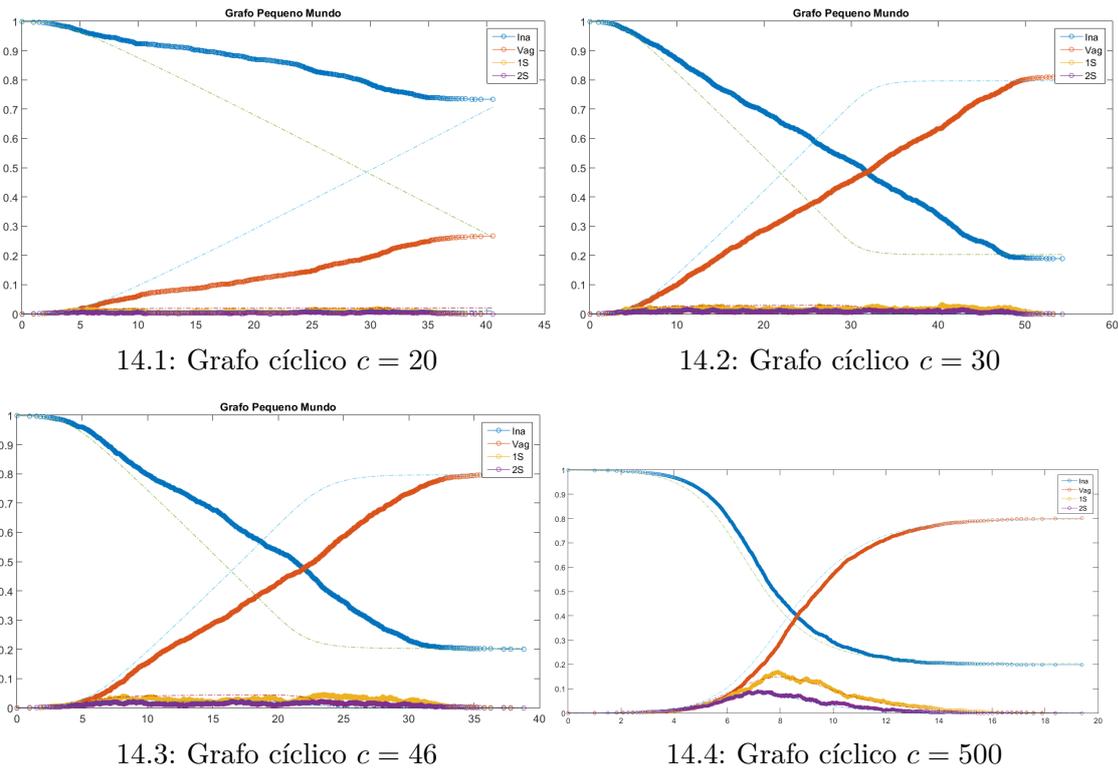


Figura 14 – Solução computacional (linhas grossas) comparadas com aproximações via campo médio (linhas finas) do modelo dos sapos em  $C_{n,c}$  para  $n = 1000$  e diferentes valores do parâmetro  $c$ .

com  $n = 1000$ . O método das simulações apresenta respectivamente os resultados das coberturas,  $x_\infty \approx 0.9$  e  $x_\infty \approx 0.8$ , que são bem distantes do valor atribuído ao método das aproximação que estimou  $x_\infty \approx 0.2$  para todos os cenários (retomando aos resultados da Figura 12). De modo oposto, a medida que o parâmetro  $c$  aumenta, o processo baseado em  $C_{n,c}$  se aproxima do comportamento para o MS num grafo completo e portanto é de esperar que o mesmo aconteça com o comportamento do modelo estocástico, conforme Figuras 13.4, 14.4.

Esses resultados indicam a existência de uma relação envolvendo  $c$  e  $n$  para o modelo dos sapos nos grafos  $2k$  cíclicos, a qual possivelmente determinaria, que o método da aproximação por campo médio, apresentaria uma performance melhor para os casos dos grafos cíclicos quanto maior a fração  $\frac{c}{n}$ .

### 6.2.1 Simulações computacionais no grafo $2k$ cíclico

Com o objetivo de avaliar as propriedades observadas em relação aos parâmetros  $c$  e  $n$  foram realizadas uma série de simulações computacionais do modelo dos sapos no grafo  $C_{n,c}$  com o objetivo de estimar as médias das proporções limites  $\bar{x}_\infty$  e  $\bar{y}_\infty$  em função do parâmetro  $c$ . Num primeiro caso, considerando grafos com tamanhos fixos de  $n = 1.000$ ,

foram executadas 100 simulações do processo, variando  $c$  de 0 a 200 em iterações de 2 em 2 unidades. Na Figura 15. As médias das proporções finais foram computadas como  $\bar{x}_\infty$  e  $\bar{y}_\infty$  em função dos valores de  $c$ .

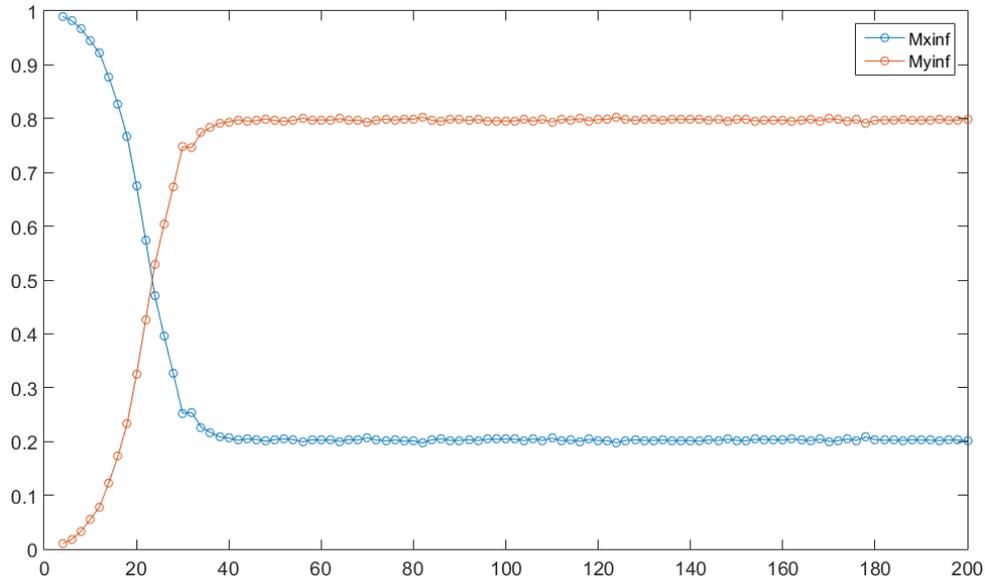


Figura 15 – Médias de 100 simulações para  $\bar{x}_\infty$  (Leg: Mxinf) e  $\bar{y}_\infty$  (Leg: Myinf) Modelo dos sapos percorrendo um grafo do tipo cíclico com  $c = 2k$  elos vizinhos, variando o valor de  $c$  de 4 a 200 e  $n = 1000$  vértices.

Conforme observado, a proporção média de vértices inativos  $\bar{x}_\infty$  que inicialmente era em torno de 1, decresce a medida que  $c$  aumenta, ate atingir o patamar tipicamente assintótico  $\bar{x}_\infty \approx 0.2$ , de forma que, quando  $c \geq 40$ , os valores médios da simulação variam cada vez menos.

Uma questão importante é verificar se o limiar assintótico de  $c$  varia para grafos cíclicos de tamanhos distintos. Neste sentido, foram processadas uma nova série de 500 simulações, comparando o modelo em dois grafos cíclicos, um com  $n = 100$  e outro com  $n = 1000$  e variando os valores do parâmetro  $c$  de 4 a 50. Observando os resultados, na Figura 16, nota-se que o limiar do grafo de menor tamanho,  $n = 100$  determina um limiar  $c > 26$ , que é diferente em relação ao valor para um grafo com  $n = 1000$  (com  $c > 40$ ).

### 6.3 Relação entre a densidade do grafo e a adequação da abordagem via campo médio para o modelo dos sapos

Na Seção 1 do Capítulo 2 foi apresentada a definição da densidade de um grafo  $\mathcal{G}_n$  qualquer. No caso do grafo completo  $\mathcal{K}_n$ , o grau médio é dado por  $\bar{k} = n - 1$ , visto que, todos os vértices possuem esse mesmo grau. Neste caso, a densidade do grafo é calculada como  $\rho(\mathcal{K}_n) = 1$ . Logo o grafo completo é um exemplo de grafo denso, pois a densidade é constante para qualquer  $n$  finito.

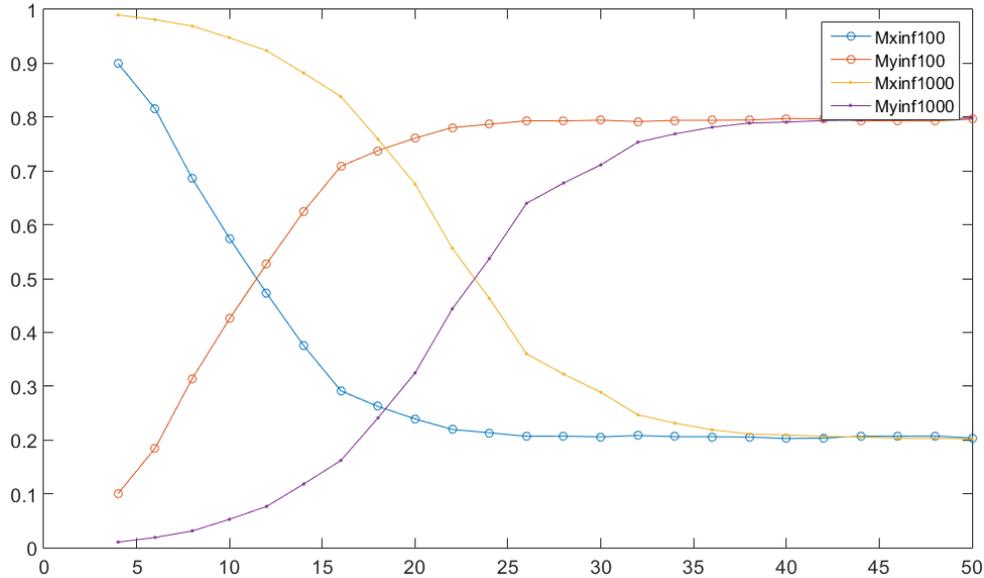


Figura 16 – Médias de 500 simulações para  $\bar{x}_\infty$  (Leg: Mxinf100, Mxinf1000) e  $\bar{y}_\infty$  (Leg: Myinf100, Myinf1000) Modelo dos sapos percorrendo um grafo do tipo cíclico com  $c = 2k$  elos vizinhos, variando o valor de  $c$  de 2 em 2 para grafos com  $n = 100$  e  $n = 1000$  vértices.

No caso dos grafos bipartidos completos, (ver Seção 3.3) e recordando que  $\theta$  é a fração de partição do grafo  $\mathcal{K}_{n_1, n_2}$  relativa ao primeiro sub conjunto de tamanho  $n_1$ . Assim  $n_1 = \theta n$  e  $n_2 = (1 - \theta)n$  e cada vértice da primeira partição possui grau  $k_1 = n_2$  e respectivamente cada vértice da segunda possui  $k_2 = n_1$ . A densidade do grafo bipartido completo é calculada como  $\rho(\mathcal{K}_{n_1, n_2}) = \frac{2n_1 n_2}{(n_1 + n_2 - 1)^2} \approx 2(1 - \theta)\theta$ , implica que os grafos  $\mathcal{K}_{n_1, n_2}$  são também considerados densos para  $\theta \in (0, 1)$ .

Os grafos cíclicos  $C_{n, c}$  ( Seção 6.2 ) possuem grau médio,  $\bar{k} = c$ , logo  $\rho(C_{n, c}) = \frac{c}{n-1}$  e nos casos onde  $c$  é pequeno em relação ao tamanho do grafo, temos  $\rho(C_{n, c}) \rightarrow 0$ , quando considera-se  $n \rightarrow \infty$ , o que caracteriza um grafo esparso. Entretanto, os grafos cíclicos podem ser considerados também densos, quando o parâmetro  $c$  for uma proporção considerável do tamanho  $n$ . No limite destes casos, o grafo cíclico tende a ficar semelhante a um grafo completo a medida que  $c$  se aproxima de  $n$  e conseqüentemente se torna denso.

Os argumentos anteriores, juntamente aos resultados apresentados ao longo do Capítulo 6, indicam existir uma relação direta entre a densidade dos grafos finitos  $\mathcal{G}_n$  e a sua adequação para a abordagem das aproximações via campo médio (A.C.M.). A partir desses resultados pode-se então concluir que: os casos, onde a abordagem A.C.M. foi empregada no M.S. para grafos esparsos, apresentaram sérias inconsistências e que as soluções dadas pelo conjunto de equações (4.10), não forneceriam portanto, as trajetórias corretas para as quantidades de interesse  $(x(t), y(t), z(t), w(t))$  ao longo da evolução do processo para este contexto. Estas características podem ser observados nas Figuras 13 e 14. De acordo com sua definição (A.1), a abordagem C.M.D.D também não é empregada

no contexto de grafos esparsos.

Por outro lado, quando o modelo dos sapos são aplicados em grafos mais densos, como por exemplo: nos grafos bipartidos completos, grafos completos e nos casos dos grafos cíclicos densos, as equações (4.10) apresentaram resultados satisfatórios.

#### 6.4 Conclusões-Modelo dos sapos em grafos finitos

Neste trabalho foram analisados os desempenhos das três diferentes abordagens utilizadas aqui como metodologias para o modelo dos sapos: Método das cadeias de Markov dependentes da densidade (CMDD), Abordagem das aproximações via campo médio (ACM) e Simulações computacionais (SC). Essas técnicas foram aplicadas nos grafos: completo, bipartido completo e grafos cíclicos  $C_{n,c}$ , onde  $c$  representa a quantidade de vizinhos conectados aos seus  $2k$  vértices mais próximos, sendo  $k$  um inteiro fixo.

Entre as contribuições deste estudo, destacamos que foi deduzido um sistema de equações diferenciais ordinárias por aproximação determinística via C.M.D.D para o modelo dos sapos, tanto para os grafos completos como para o bipartido completo e as funções  $f_1(x)$  e  $f_2(x)$ , cujas raízes representam as respectivas coberturas finais  $x_{1,\infty}$  e  $x_{2,\infty}$  (em função do parâmetro de partição  $\theta$ ). Estas funções fornecem resultados teóricos para o modelo dos sapos e desta forma permite compara-los com as coberturas finais fornecidas pelas demais abordagens para os grafos completos e bipartidos completos. Outro resultado importante foi que, o grafo bipartido com duas partições iguais ( $\theta = 0.5$ ), possui dinâmica similar ao do grafo completo.

Resultados conhecidos para o modelo dos sapos no grafo completo foram revisitados com uma outra abordagem que foi empregada para deduzir os resultados no grafo bipartido e para verificar que as abordagens CMDD e ACM são praticamente equivalentes para o MS no grafo completo. O método ACM para o modelo dos sapos possui uma adequação relativa que depende da densidade do grafo, de forma que, quanto mais denso o grafo finito, melhor é o ajuste das trajetórias das variáveis do modelo pela abordagem ACM. Em outras palavras, a abordagem ACM fornece resultados mais precisos para grafos razoavelmente densos.

Visando obter resultados computacionais para simular o deslocamento das partículas no grafo e analisar as proporções de interesse, foram desenvolvidos códigos para calcular as trajetórias médias de cada uma das quantidades  $x(t)$ ,  $y(t)$ ,  $z(t)$  e  $w(t)$  calculadas por (4.10) via método das ACMs.

Foi também observado que, nos grafos regulares finitos cíclicos  $C_{n,c}$ , para os menores valores do parâmetro  $c$ , a abordagem ACM perde sua capacidade de ajuste para modelar a evolução das quantidades de interesse, por outro lado, a medida que o valor de  $c$  aumenta temos o resultado do modelo dos sapos no grafo completo como um caso limite.



## **Parte II**

**Equações diferenciais estocásticas aplicadas a um modelo predador presa**



## 7 ANÁLISE DE UM MODELO ESTOCÁSTICO PREDADOR PRESA ESTÁGIO SELETIVO

### 7.1 Introdução

Como amplamente conhecido, a análise teórica e computacional de modelos do tipo predador-presa despertam o interesse de um grande número de pesquisadores de diversas áreas do conhecimento como Biomatemática, Ecologia e Física. Num contexto determinístico, o modelo predador-presa é definido em geral como um conjunto de equações diferenciais ordinárias (EDOs), que descrevem a dinâmica de um sistema biológico no qual duas ou mais espécies interagem, sendo que uma delas, como predador e as demais como presas. O modelo pioneiro do tipo presa-predador foi proposto independentemente por Alfred Lotka e Vito Volterra (ver (MURRAY, 2002, Seção 3.1)). Desde então, muita pesquisa tem sido desenvolvida através de generalizações deste modelo básico. O método tradicional para trabalhar com este tipo de dinâmica é a modelagem via EDOs. Esta metodologia é muito útil quando lidamos com grandes populações, porém ela não fornece informação a respeito dos possíveis efeitos aleatórios do fenômeno que é objeto do estudo. Para tratar efeitos de aleatoriedade uma ferramenta proposta é a modelagem por meio de equações diferenciais estocásticas (EDEs). Neste sentido, as EDEs são uma interessante alternativa às EDOs devido ao fato de serem aptas para representar, matematicamente, perturbações aleatórias no sistema. Para uma referência sobre a teoria de EDEs sugerimos ao leitor consultar (MAO, 2007).

Entre os diversos artigos que abordam o assunto dos modelos estocásticos do tipo predador-presas, pode-se destacar: (WANG *et al.*, 2012; ZHANG; WANG; LV, 2018; AGUIRRE; GONZÁLEZ-OLIVARES; TORRES, 2013; LI; CONG, 2019; LIU; JIANG, 2018; RAFIKOV, 2002) e (ZHAO; SONG, 2014).

Neste trabalho, vamos propor um modelo estocástico predador-presa estágio-seletivo. Este modelo é uma versão modificada do modelo determinístico estudado por De Ross *et al.* em (ROOS; PERSSON; KOOTEN, 2005), o qual insere algumas importantes contribuições em modelos do tipo presa-predador. Entre elas, a premissa que a população das presas é subdividida em indivíduos que podem pertencer a dois diferentes estágios: jovens e adultos. O crescimento da população presa jovem é regulada pela maturação, que depende da disponibilidade de recursos em seu habitat e, conseqüentemente, da competição desses indivíduos por esses recursos. Por outro lado, a população das presas adultas é regulada pela presença de predadores.

Neste trabalho vamos propor e analisar uma versão estocástica do modelo original assumindo que a taxa de mortalidade do predador está sujeita a efeitos de aleatoriedade, provar resultados de estabilidade e ilustrar seu comportamento através de simulações

computacionais.

## 7.2 O modelo

O modelo determinístico no qual vamos nos inspirar é o descrito em (ROOS; PERSSON; KOOTEN, 2005). Sejam  $x_1, x_2$  respectivamente as densidades de presas jovens e adultas e seja  $x_3$  a densidade de predadores. O modelo determinístico é dado pelo seguinte sistema dinâmico:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = bx_2 - \frac{x_1}{1+x_1^2} - \mu_1x_1, \\ \frac{dx_2}{dt} = \frac{x_1}{1+x_1^2} - \mu_2x_2 - x_2x_3, \\ \frac{dx_3}{dt} = x_3(x_2 - \mu_3). \end{cases} \quad (7.1)$$

Todos os parâmetros são positivos, o parâmetro  $b$  representa a taxa de nascimento de presas jovens,  $\mu_1, \mu_2, \mu_3$  são respectivamente as taxas de mortalidade das presas jovens, adultas e dos predadores e  $x_1/(1+x_1^2)$  representa a taxa de maturação das presas jovens em adultas. De modo que, o aumento da densidade populacional das presas jovens dificulta a sua maturação por efeito da competição por alimento. Assim definido o modelo é chamado de modelo determinístico presa-predador estágio-seletivo.

Entre as importantes contribuições de (ROOS; PERSSON; KOOTEN, 2005) está a proposta de condições paramétricas para o modelo (como o apresentado em 7.1) que permitem a emergência de efeito Alle. O efeito Alle pode ser definido como o risco de extinção repentina de uma espécie causado por mecanismos de diminuição da taxa de fecundidade per capita quando a sua população está abaixo de um determinado limiar, o que provoca, conseqüentemente, uma redução da capacidade de sobrevivência dos seus indivíduos. Outro resultado do trabalho foi demonstrar que a predação estágio-específica também pode propiciar biestabilidade entre estados alternativos quando os predadores e presas ainda estão presentes no sistema.

Com o intuito de obter uma versão estocástica do modelo determinístico (7.1), vamos empregar equações diferenciais estocásticas. As EDEs são processos estocásticos a tempo contínuo, cuja solução pode ser definida de forma resumida para o modelo de interesse:

**Definição 5.** *Seja  $B(t)$  um movimento Browniano padrão para  $0 \leq t < \infty$  e dado o vetor de trajetórias  $x(t) = (x_1(t), x_2(t), x_3(t))$  e sejam as funções  $f : \mathbb{R}^3 \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^3$  e  $g : \mathbb{R}^3 \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^3$ :*

define-se a EDE:

$$dx(t) = f(\mathbf{x}(t), t)dt + g(\mathbf{x}(t), t)dB(t). \quad (7.2)$$

A função  $f(\mathbf{x}(t), t)$  é denominada coeficiente de desvio e o termo  $g(\mathbf{x}(t), t)$  seria o coeficiente de difusão (como citado em (ALLEN, 2010)).

No nosso modelo vamos supor que a taxa de mortalidade do predador  $\mu_3$ , em (7.1), está suscetível a uma variabilidade ambiental equivalente a uma perturbação de maneira que  $\hat{\mu}_3 = \mu_3 + \dot{B}(t)$  e com isto obtemos o seguinte sistema de EDEs:

$$\begin{cases} dx_1 &= \left( bx_2 - \frac{x_1}{1+x_1^2} - \mu_1 x_1 \right) dt, \\ dx_2 &= \left( \frac{x_1}{1+x_1^2} - \mu_2 x_2 - x_2 x_3 \right) dt, \\ dx_3 &= x_3(x_2 - \mu_3) dt - x_3 dB(t). \end{cases} \quad (7.3)$$

Os coeficientes da EDE 7.2 são então definidos como:

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, x_3, t) &= bx_2 - \frac{x_1}{1+x_1^2} - \mu_1 x_1, \\ f_2(x_1, x_2, x_3, t) &= \frac{x_1}{1+x_1^2} - \mu_2 x_2 - x_2 x_3, \\ f_3(x_1, x_2, x_3, t) &= x_3(x_2 - x_3) \end{aligned}$$

e

$$g_1 = g_2 \equiv 0, \text{ e } g_3(x_1, x_2, x_3, t) = -x_3.$$

Nossa escolha da taxa de mortalidade do predador como o parâmetro aleatório do modelo está motivada pelo fato de que na natureza a mortalidade dos predadores pode sofrer interferências do ambiente via causas naturais como secas, inundações, incêndios ou impactos antropomórficos. Uma segunda motivação é que o parâmetro  $\mu_3$  é bastante sensível à dinâmica do sistema determinístico (7.1) e possui um importante papel em relação ao estudo de caracterização de equilíbrio desenvolvida em (ROOS; PERSSON; KOOTEN, 2005).

### 7.2.1 Notações e definições básicas

Estabeleceremos a seguir dois teoremas que apresentam resultados sobre o espaço de soluções e a análise de estabilidade do modelo, porem apresentaremos previamente algumas notações e definições importantes.

Se tomarmos  $f(0, t) \equiv g(0, t) \equiv 0$  in (7.2) então a solução  $x(t) \equiv 0$  é dita trivial. Denota-se  $C^{2,1}(O \times \mathbb{R}_+; \mathbb{R}_+)$  como a representação da família de todas as funções não negativas  $V(x, t)$  definidas sob  $O \times \mathbb{R}_+$  onde  $O$  é um subconjunto aberto de  $\mathbb{R}^d$ , que são contínuas e duas vezes diferenciáveis em  $x$  e uma vez em  $t$ . Define-se o operador diferencial  $L$  associado com a equação (7.2) por

$$L = \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^d f_i(x, t) \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d [g(x, t)g^T(x, t)]_{ij} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}.$$

Seja  $\mathcal{K}$  a família de todas as funções contínuas não decrescentes  $\mu : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$  tal que  $\mu(0) = 0$  e  $\mu(r) > 0$  se  $r > 0$ . Para  $h > 0$ , seja  $S_h = \{x \in \mathbb{R}^d : \|x\| < h\}$ . Uma função contínua  $V(x, t)$  definida sob  $S_h \times \mathbb{R}_+$  é dita como definida-positiva (nos termos de Lyapunov) se  $V(0, t) \equiv 0$  e, para algum  $\mu \in \mathcal{K}$ ,

$$V(x, t) \geq \mu(\|x\|) \quad \text{para todo } (x, t) \in S_h \times \mathbb{R}_+.$$

Uma função contínua não negativa  $V(x, t)$  é denominada decrescente se para algum  $\mu \in \mathcal{K}$ ,

$$V(x, t) \leq \mu(\|x\|) \quad \text{para todo } (x, t) \in S_h \times \mathbb{R}_+.$$

Uma função  $V(x, t)$  definida sob  $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+$  é radialmente ilimitada se

$$\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} \inf_{t \geq 0} V(x, t) = \infty.$$

Para mais detalhes, o leitor pode consultar (MAO, 2007), (MAO; YUAN, 2006) (PANIK, 2017) e (CAPASSO; BAKSTEIN, 2005).

### 7.3 Teorema das soluções positivas globais

Os coeficientes do modelo (7.3) são contínuos e localmente Lipschitz (visto que são diferenciáveis e com derivada contínua), no entanto não cumprem com a condição de crescimento linear, e isto poderia implicar na possibilidade da solução explodir em um tempo finito. Mostraremos que além da solução não explodir num tempo finito, também possui um cone positivo  $\mathbb{R}_+^3 = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : x > 0, y > 0, z > 0\}$  como conjunto invariante; isto é, dado  $X = (x, y, z)$  e se  $X(0) \in \mathbb{R}_+^3$  então  $\mathbb{P}[X(t) \in \mathbb{R}_+^3, \text{ para todo } t \geq 0] = 1$ . Esta propriedade é um ponto chave em modelos do tipo predador-presa ou de competição entre espécies.

**Teorema 1.** *Suponha que  $X(0) = (x_1(0), x_2(0), x_3(0)) \in \mathbb{R}_+^3$ . Então a solução  $X(t)$  permanecerá em  $\mathbb{R}_+^3$  com probabilidade 1, isto é,*

$$\mathbb{P}[X(t) \in \mathbb{R}_+^3, \text{ para todo } t \geq 0] = 1.$$

Antes da prova do teorema necessitamos algumas definições. O operador de Lyapunov associado a equação (7.3) é:

$$L = \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 f_i \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{g_3^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \quad (7.4)$$

onde

- $f_1 = bx_2 - \frac{x_1}{1+x_1^2} - \mu_1 x_1$ .
- $f_2 = \frac{x_1}{1+x_1^2} - \mu_2 x_2 - x_2 x_3$ .
- $f_3 = x_3(x_2 - x_3)$ .
- $g_3 = -x_3$ .

Dizemos que uma função  $V$  é de classe  $C^{2,1}$  em um conjunto da forma  $O \times [0, \infty)$  com  $O$  subconjunto aberto de  $\mathbb{R}^3$ , se é duas vezes continuamente diferenciável em  $O$  e uma vez continuamente diferenciável em  $[0, \infty)$ . Defina a seguinte função  $V : \mathbb{R}_+^3 \times [0, \infty) \rightarrow [0, \infty)$  por

$$V(x, t) = \sum_{i=1}^n (x_i - 1 - \log(x_i)), \text{ para } x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}_+^3$$

logo

- $f_1 \frac{\partial V}{\partial x_1} = bx_2 - \frac{x_1}{1+x_1^2} - \mu_1 x_1 - b \frac{x_2}{x_1} + \frac{1}{1+x_1^2} + \mu_1$ .
- $f_2 \frac{\partial V}{\partial x_2} = \frac{x_1}{1+x_1^2} - \mu_2 x_2 - x_2 x_3 - \frac{x_1}{(1+x_1^2)x_2} + \mu_2 + x_3$ .
- $f_3 \frac{\partial V}{\partial x_3} = x_3 x_2 - x_3^2 - x_2 + x_3$
- $\frac{g_3^2}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial x_3^2} = \frac{1}{2}$ .

Depois de uma sequência simples de contas, obtemos que se  $(x, t) \in \mathbb{R}_+^3 \times [0, \infty)$ , então  $LV(x, t) \leq bx_2 + 2x_3 + 3 + \mu_1 + \mu_2$ , porém para demonstrar o teorema necessitamos uma cota superior distinta. Agora, se  $(x, t) \in \mathbb{R}_+^3 \times [0, \infty)$

$$\begin{aligned} LV(x, t) &\leq \max\{2, b\}(x_2 + x_3) + 3 + \mu_1 + \mu_2 \\ &\leq \max\{2, b\}(x_1 + x_2 + x_3) + 3 + \mu_1 + \mu_2 \\ &\leq 2 \max\{2, b\}(V(x, t) + 3) + 3 + \mu_1 + \mu_2 \\ &\leq C_1 V(x, t) + C_2, \end{aligned} \quad (7.5)$$

onde  $C_1$  e  $C_2$  são constantes positivas.

*Demonstração.* Seja  $X(0) = (x_1(0), x_2(0), x_3(0)) \in \mathbb{R}_+^3$  fixo.

Seja  $n_0 \in \mathbb{N}$  suficientemente grande tal que  $\min_{1 \leq i \leq 3} |x_i(0)| > 1/n$  para todo  $n \geq n_0$ . Definimos o seguinte tempo de parada

$$\tau_n = \inf\{t \geq 0 : X(t) \notin [1/n, n]^3\}, \text{ para todo } n \geq n_0.$$

Claramente  $\tau_n$  é crescente em  $n$ , seja  $\lim_{n \rightarrow \infty} \tau_n = \tau_\infty$ , então  $\tau_\infty \leq \tau_e$  com probabilidade 1, onde  $\tau_e$  é o tempo de explosão. Queremos mostrar que  $\mathbb{P}[\tau_\infty = \infty] = 1$ , o que implica que com probabilidade 1 o processo permanece em  $\mathbb{R}_+^3$  e além de que, não exploda num tempo finito pois  $\tau_e = \infty$  com probabilidade 1. Suponhamos o contrário, isto é,  $\mathbb{P}[\tau_\infty = \infty] < 1$ , portanto existe  $T > 0$  e  $\eta > 0$  tal que

$$\mathbb{P}[\tau_\infty < T] > \eta,$$

logo existe  $n_1 \geq n_0$  tal que

$$\mathbb{P}[\tau_n < T] > \eta, \text{ para todo } n \geq n_1.$$

Empregando a formula de Itô

$$dV(X(t), t) = LV(X(t), t)dt + \frac{\partial V}{\partial x_3} dB(t).$$

Logo,

$$V(X(\tau_n \wedge T), \tau_n \wedge T) = V(X(0), 0) + \int_0^{\tau_n \wedge T} LV(X(\tau_n \wedge T), \tau_n \wedge T)dt + \int_0^{\tau_n \wedge T} \frac{\partial V}{\partial x_3} dB(t).$$

Tomando valor esperado e utilizando que  $LV(x, t) \leq C_1V + C_2$  e que  $\mathbb{E} \left[ \int_0^{\tau_n \wedge T} \frac{\partial V}{\partial x_3} dB(t) \right] = 0$ , obtemos

$$\begin{aligned} \mathbb{E}V(X(\tau_n \wedge T), \tau_n \wedge T) &\leq V(X(0), 0) + \mathbb{E} \int_0^{\tau_n \wedge T} (C_1V(X(t), t) + c_2)dt \\ &\leq V(X(0), 0) + \mathbb{E} \int_0^T (C_1V(X(\tau_n \wedge T), \tau_n \wedge T) + C_2)dt \\ &\leq V(X(0), 0) + C_2T + C_1\mathbb{E} \int_0^T V(X(\tau_n \wedge T), \tau_n \wedge T)dt \end{aligned} \tag{7.6}$$

Agora, pelo Teorema de Fubini,

$$\mathbb{E} \int_0^T V(X(\tau_n \wedge T), \tau_n \wedge T) dt = \int_0^T \mathbb{E} V(X(\tau_n \wedge T), \tau_n \wedge T) dt$$

e da desigualdade de Gronwall (Ver Apêndice A, Lema 3) em (7.6), se obtêm que

$$\mathbb{E} V(X(\tau_n \wedge T), \tau_n \wedge T) \leq [V(X(0), 0) + C_2 T] e^{C_1 T}. \quad (7.7)$$

Por outro lado, se  $h(n) = \min\{1/n - 1 - \log(1/n), n - 1 - \log(n)\}$  então

$$\mathbb{E} V(X(\tau_n \wedge T), \tau_n \wedge T) 1_{\{\tau_n < T\}} \geq h(n) \mathbb{P}[\tau_n < T] \geq h(n) \eta. \quad (7.8)$$

Porém esta última desigualdade contradiz a (7.7). Portanto  $\mathbb{P}[\tau_\infty = \infty] = 1$ .

□

#### 7.4 Estabilidade estocástica assintótica

Iniciaremos com algumas definições básicas necessárias.

**Definição 6.** (i) Uma solução trivial de uma equação (7.2) é denominada estocasticamente estável ou estável em probabilidade, se para cada par de  $\epsilon \in (0, 1)$  e  $r > 0$ , existir um  $\delta = \delta(\epsilon, r) > 0$  tal que

$$\mathbb{P}(\|x(t)\| < r \text{ para todo } t \geq 0) \geq \epsilon,$$

para qualquer  $\|x(0)\| < \delta$ .

(ii) A solução trivial é denominada estocasticamente e assintoticamente estável, se é estável estocasticamente e, além disso, para cada  $\epsilon \in (0, 1)$ , existe um  $\delta = \delta(\epsilon)$  tal que

$$\mathbb{P}\left(\lim_{t \rightarrow \infty} x(t) = 0\right) \geq 1 - \epsilon,$$

para qualquer  $\|x(0)\| < \delta$ .

(iii) A solução é denominada estocasticamente assintoticamente estável global, se é estável estocasticamente e, além disso, para todo  $x(0) \in \mathbb{R}^3$

$$\mathbb{P}\left(\lim_{t \rightarrow \infty} x(t) = 0\right) = 1.$$

Os dois resultados seguintes são importantes para a prova do resultado principal desta seção.

**Lema 1.** Seja uma função definida positiva, decrescente e ilimitada  $V(x, t) \in C^{2,1}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+; \mathbb{R}_+)$  tal que  $LV(x, t)$  é definida negativa, então, a solução trivial da equação (7.2) é estocasticamente estável global.

*Demonstração.* Ver página 114, Teorema 2.4 em (MAO, 2007).  $\square$

**Lema 2.** *Se a solução trivial do sistema linear associado a (7.2) é estocasticamente assintoticamente estável, então a solução trivial relativa a (7.2) é também estocasticamente assintoticamente estável.*

*Demonstração.* Ver página 228, Teorema 7.1 em (KHASHMINSKII; MILSTEIN, 2011).  $\square$

A partir daqui, podemos enunciar o seguinte teorema

**Teorema 2.** *Dados os parâmetros do modelo (7.3)  $b, \mu_1, \mu_2$  e  $\mu_3$ . Se*

$$b > 0, \quad \mu_1 > 0, \quad \mu_2 > \frac{b}{\mu_1 + 1} \text{ e } \mu_3 > \frac{1}{2}, \quad (7.9)$$

*então o ponto de equilíbrio  $X^* = (0, 0, 0)$  do sistema (7.3), é assintoticamente estável em probabilidade.*

*Demonstração.* Por meio dos lemas 1 e 2, apresentados anteriormente, o primeiro passo para provar o teorema é linearizar o modelo (7.3) em torno do ponto de equilíbrio  $(0, 0, 0)$ ,

$$\begin{cases} dx_1 &= (-(\mu_1 + 1)x_1 + bx_2) dt, \\ dx_2 &= (x_1 - \mu_2 x_2 - x_3) dt, \\ dx_3 &= (-\mu_3 x_3) dt - x_3 dB(t). \end{cases} \quad (7.10)$$

Na teoria da estabilidade das equações diferenciais estocásticas, é necessário apenas encontrar uma função de Lyapunov  $V(x_1, x_2, x_3)$  satisfazendo  $LV(x_1, x_2, x_3) \leq 0$ . No caso  $X = X^*$ , onde  $X = (x_1(t), x_2(t), x_3(t))$  é a solução da equação diferencial estocástica e  $X^* = (0, 0, 0)$  é ponto de equilíbrio do modelo (7.10).

Agora definindo

$$L = \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 f_{li} \frac{\partial}{\partial x_{li}} + \frac{g_{l3}^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_{l3}^2} \quad (7.11)$$

onde

- $f_{l1} = -(\mu_1 + 1)x_1 + bx_2$ ,
- $f_{l2} = x_1 - \mu_2 x_2$ ,
- $f_{l3} = -\mu_3 x_3$ ,
- $g_{l3} = -x_3$ .

Dada uma função de Lyapunov quadrática em torno do ponto de equilíbrio,

$$V(x_1, x_2, x_3) = \sum_{i=1}^3 c_i(x_i)^2 \quad (7.12)$$

$c_i$  são constantes e aplicando o operador  $L$  na função  $V$ , temos:

$$\begin{aligned} LV &= -2c_1(\mu_1 + 1)x_1^2 \\ &+ (2c_1b + 2c_2)x_1x_2 \\ &- 2c_2\mu_2x_2^2 \\ &+ 2c_3\left((- \mu_3 + \frac{1}{2})x_3^2\right) \end{aligned}$$

tomando  $c_1 = \frac{1}{2b}$ ,  $c_2 = \frac{1}{2}$ ,  $c_3 = \frac{1}{2}$ , pode-se reescrever as relações anteriores como:

$$LV = Ax_1^2 + Bx_1x_2 + Cx_2^2 + Dx_3^2 \quad (7.13)$$

onde

$$A = -\frac{\mu_1+1}{b}, \quad B = 2, \quad C = -\mu_2, \quad D = -\mu_3 + \frac{1}{2}$$

e dado o vetor  $y = (x_1, x_2, x_3)$  e a matriz dos coeficientes

$$Q = \begin{pmatrix} 2A & B & 0 \\ B & 2C & 0 \\ 0 & 0 & 2D \end{pmatrix}$$

é possível colocar (7.13) na forma quadrática :

$$LV = \frac{1}{2}y^T Q y. \quad (7.14)$$

Agora define-se as sub matrizes líderes de ordem  $k$  ( $Q_k$ ), à esquerda da Matriz simétrica  $Q$  como:

$$Q_1 = 2A, \quad Q_2 = \begin{pmatrix} 2A & B \\ B & 2C \end{pmatrix}, \quad Q_3 = Q.$$

Então, para uma matriz simétrica definida negativa, temos  $\det(Q_1) < 0$ ,  $\det(Q_2) > 0$  e  $\det(Q_3) < 0$ .

Se  $b > 0$ ,  $\mu_1 > 0$ , implica que a condição  $2A = -2\left(\frac{\mu_1+1}{b}\right) < 0$  é satisfeita. Por meio da segunda condição temos  $B^2 < 4AC$  e resulta que:  $\left(\frac{\mu_1+1}{b}\right)\mu_2 > 1$ . Finalmente,  $-2D(4AC - B^2) < 0$  temos  $\mu_3 > \frac{1}{2}$ .

Desta forma, obtemos as condições de equilíbrio (7.9) que implicam em  $LV < 0$  para as trajetórias contidas em  $\mathbb{R}_+^3$  com exceção do ponto  $(0, 0, 0)$ . Então, as propriedades estabelecidas são satisfeitas e isto completa a prova.  $\square$

## 7.5 Análise Numérica Computacional

Da teoria dos sistemas dinâmicos é conhecido que: o comportamento assintótico de um sistema dinâmico pode ser alterado para diferentes variações de um ou mais parâmetros de controle desse sistema. Os valores críticos do(s) parâmetro(s) de controle que provocam mudança de regime assintótico são denominados pontos de bifurcação. O objetivo via simulações numéricas é obter uma análise comparativa dos cenários baseados em sequências de bifurcações obtidas do modelo determinístico (7.1) em relação aos resultados estocásticos (7.3).

Por meio da análise qualitativa do sistema (7.1) descrita em (ROOS; PERSSON; KOOTEN, 2005), o equilíbrio presa-predador foi categorizado em quatro diferentes cenários (ou regiões) denominados: **A**, **B**, **C** e **D**. Cada configuração é obtida dos intervalos entre as sequências de bifurcações dada pela expressão:

$$\mu_3 = \frac{1}{b} \left( \frac{x_1}{(1+x_1^2)} + \mu_1 x_1 \right). \quad (7.15)$$

A equação (7.15) é determinada a partir das condições de equilíbrio de (7.1). O conjunto de pares  $(\mu_3, x_1)$  determina o diagrama de bifurcação (mostrado na Figura 17). Os pontos críticos de interesse são representados como pontos vermelhos e respectivamente denominados na Figura 17 como  $Pb1 = (\mu_3^{b1}, x_1^{b1})$  e  $Pb2 = (\mu_3^{b2}, x_1^{b2})$  e  $Pb3 = (\mu_3^{b3}, x_1^{b3})$ .

Por meio dos intervalos obtidos entre cada dois desses pontos sucessivos, determina-se os cenários **A**, **B**, **C** e **D** conforme a seguinte classificação:

**A** - se a densidade de presas juvenis  $x_1$  em equilíbrio estiver na curva (7.15) crescente entre a origem  $(0, 0)$  e  $Pb1 = (\mu_3^{b1}, x_1^{b1})$

**B** - quando  $x_1$  estiver na curva descendente entre os pontos  $Pb1 = (\mu_3^{b1}, x_1^{b1})$  e  $Pb2 = (\mu_3^{b2}, x_1^{b2})$

**C** - caso  $x_1$  estiver entre  $Pb2 = (\mu_3^{b2}, x_1^{b2})$  e  $Pb3 = (\mu_3^{b3}, x_1^{b3})$

**D** - se o ponto de equilíbrio estiver acima do ponto  $Pb3 = (\mu_3^{b3}, x_1^{b3})$  neste caso:  $x_1 > x_1^{b3}$

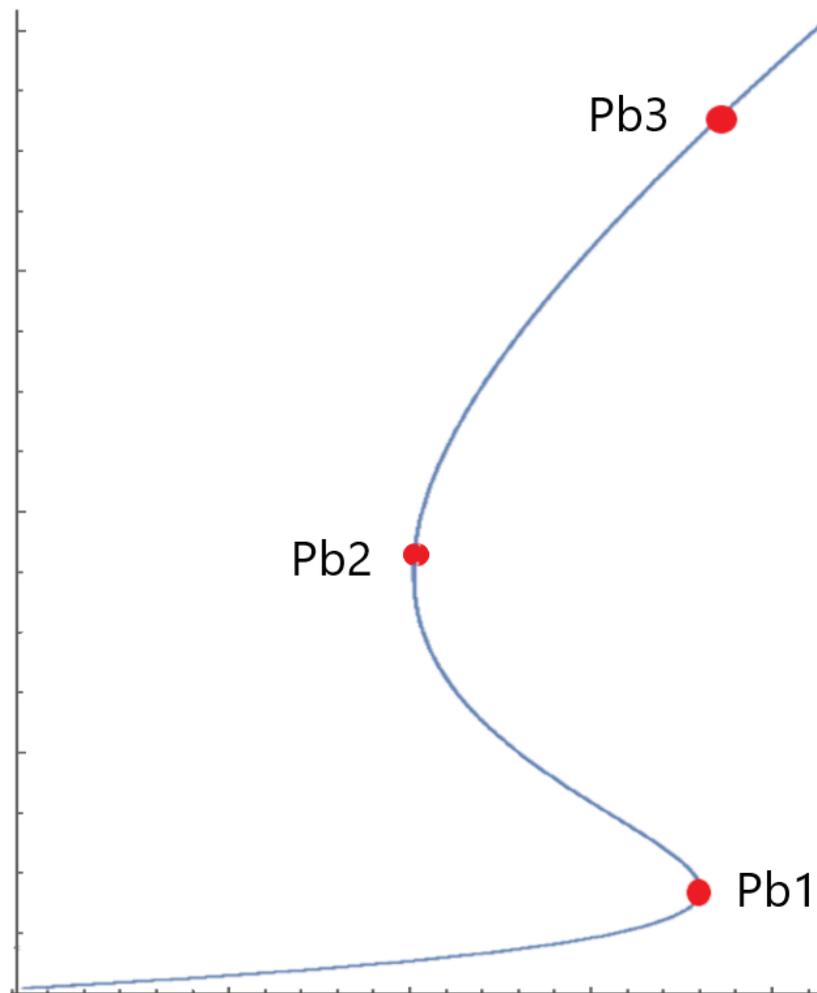


Figura 17 – Diagrama de bifurcação entre a densidade de presas jovens  $x_1$  no equilíbrio em função da taxa de mortalidade do predador  $\mu_3$  conforme equação 7.15. Os três pontos em destaque são os pontos críticos Pb1, Pb2 e Pb3 que delimitam as regiões A, B, C e D

Faremos, a partir desses pressupostos, uma análise comparativa com os resultados numéricos (via Matlab®, vR2015a) gerados via método de Euler-Mayuama a partir do modelo de EDE para cada uma dessas regiões de estabilidade de interesse.

Todos os gráficos são apresentados de forma que: as linhas coloridas representem os resultados do modelo estocástico (7.3), as linhas pretas os resultados do modelo determinístico (7.1) e por sua vez, todas as linhas tracejadas '---' simbolizando a dinâmica das presas jovens  $x_1(t)$ , as linhas pontilhadas '...' respectivamente as presas adultas  $x_2(t)$  e finalmente as linhas sólidas '—' os predadores  $x_3(t)$ .

### 7.5.1 Cenário **A**

Entre as características esperadas no modelo determinístico quando o valor de equilíbrio de  $x_1(t)$  pertence ao domínio **A** destaca-se a ausência de efeitos Allee e de biestabilidade.

Nas simulações para o cenário **A**, o ponto de equilíbrio  $(\mu_3^*, x_1^*)$  se encontra no segmento da curva (7.15) ascendente e é situado entre a origem  $(\mu_3, x_1) = (0, 0)$  e o ponto  $Pb1 = (\mu_3^{b1}, x_1^{b1})$ .

Para simular uma realização do modelo determinístico e estocástico, serão utilizados os seguintes parâmetros fixos: taxa de fertilidade da presa  $b = 0.25$ , taxa de mortalidade das presas jovens  $\mu_1 = 0.12$ , taxa de mortalidade das presas adultas  $\mu_2 = 0.2$  e finalmente, a taxa de mortalidade dos predadores, dada pelo parâmetro  $\mu_3$ , é determinada entre os valores do intervalo  $0 < \mu_3 \leq 2.56$  e por meio desses valores calcula-se o primeiro ponto de bifurcação  $Pb1 = (2.56, 1.53)$ .

Observando inicialmente os resultados do modelo determinístico (Figura 2), nota-se a evolução de um comportamento tipicamente periódico, para menores valores de  $\mu_3$  e a medida que aumenta-se o parâmetro, o padrão cíclico vai dando lugar a um sistema com pontos de equilíbrio estáveis quando as condições iniciais estão próximas de  $Pb1$ .

### 7.5.2 Cenário **B**

Neste caso, o segmento da curva (Figura 17) se dobra entre os pontos  $Pb1$  e  $Pb2$ , isto faz com que os valores de  $\mu_3$  diminuam enquanto os valores de equilíbrios das presas jovens  $x_1$  aumentem e emergindo daí um efeito do tipo Allee. Para as simulações adota-se:  $b = 0.35$  e taxas  $\mu_1 = 0.06$ ,  $\mu_2 = 0.2$  e os valores para o parâmetro  $\mu_3$  são selecionados no intervalo  $1.35 < \mu_3 \leq 1.61$ .

Na Figura 19 (a), com  $\mu_3 = 1.35$ , os pontos de equilíbrio são praticamente coincidentes para as presas adultas, mas no caso das presas jovens temos que:  $x_1^* \approx 0.5$  para o modelo determinístico e  $x_1^* \approx 3.5$  considerando o modelo estocástico.

### 7.5.3 Cenário **C**

A região **C** se caracteriza pela presença tanto de biestabilidade como efeito Allee e se localiza num segmento da curva (7.15) ascendente entre os respectivos pontos de bifurcação  $Pb2$  e  $Pb3$  (Figura 20).

Os parâmetros utilizados para simular o comportamento desse cenário são: taxa de fertilidade da presa  $b = 0.5$ , taxa de mortalidade da presa jovem  $\mu_1 = 0.06$ , a taxa de mortalidade das presas adultas é mantida em 0.2 e os valores do parâmetro de controle variam:  $0.95 \leq \mu_3 \leq 1.13$ .

No cenário **C** (Figura 20) destaca-se que a previsão do equilíbrio não nulo (em torno de 0.5) para os predadores para o modelo determinístico não é observada no caso estocástico. Já os pontos de equilíbrio das presas jovens são bem distintos entre esses modelos, para  $\mu_3 = 0.95$  e  $\mu_3 = 1$ , resultam respectivamente, no ponto de equilíbrio  $x_1^* \approx 0.5$  para o caso determinístico, enquanto observa-se  $x_1^* \approx 5$  para o caso estocástico.

#### 7.5.4 Cenário D

No último cenário, a biestabilidade não é acompanhada de efeito Allee e adota-se os seguintes parâmetros de caracterização:  $b = 1.2$ ,  $\mu_1 = 0.06$ ,  $\mu_2 = 0.2$  e como neste caso, utiliza-se os valores: 0.5, 1.2 e 4.0 para o parâmetro  $\mu_3$  nas simulações (Figura 21).

Os resultados destacados da simulação para essa região é a grande similaridade entre os resultados fornecidos pelos modelos determinístico e estocástico a medida que o parâmetro  $\mu_3$  aumenta. Observa-se que para  $\mu_3 = 4$  os resultados dos modelos são praticamente indistinguíveis. Neste caso, não há diferença entre modelar a partir de um sistema de EDOs ou EDEs.

## 7.6 Conclusões

A demonstração da propriedade de positividade da solução, implica que as soluções do sistema de EDEs (7.3) não "explodam" num tempo finito e que possui sempre solução positiva em  $\mathbb{R}^3$  com probabilidade 1 para qualquer  $t \in [0; \infty)$  dado o conjunto de valores iniciais  $X(0) = (x_1(0), x_2(0), x_3(0)) \in \mathbb{R}_+^3$ . Estes resultados asseguram que o modelo está adequado à natureza da sua finalidade em descrever a dinâmica de um sistema presa-predador tanto em uma modelagem via EDOs quanto em uma modelagem por meio de EDEs.

Os resultados em linhas gerais, demonstram que o sistema determinístico proposto em (ROOS; PERSSON; KOOTEN, 2005) é afetado tanto no aspecto da sua evolução como em seus pontos de equilíbrio, quando a natureza aleatória do parâmetro  $\mu_3$  é considerada. Nosso resultados sugerem que modelo (7.1) é amplamente afetado a medida que a configuração paramétrica e dos seus valores iniciais impõe ao mesmo uma maior proximidade em relação a região de bifurcação em dobra (entre  $Pb1$  a  $Pb3$  na Figura 1) e nestes casos é preferível modelar o sistema por meio de equações diferenciais estocásticas.

---

#### Código 7.1 – Simulações das EDEs

---

```
% Input program values:
2 End time "T" and time intervals "k"
% Calculate the time window
4 dt= T/k ;
% Time spam
6 t = 0:dt:T ;
```

```
% Model Fixed Parameters:
8 b, muj , mua and mup
% The initial variables values:
10 J0 ( Initial Young Preys: x_1(0))
    A0 ( Adult Preys: x_2(0))
12 P0 ( Predators: x_3(0))
% Iterations for the evolution of:
14 J (x_1(t)), A (x_2(t)) and P (x_3(t)) by time intervals k
    for i=1:k
16 J(i+1) = J(i) + (b * A(i) - J(i)/(1+ J(i)^2) - muj * J(i)) * dt ;
    A(i+1) = A(i) + (J(i)/(1+J(i)^2) - mua * A(i) - A(i)*P(i))*dt ;
18 P(i+1) = P(i) + (A(i)*P(i) - mup*P(i))*dt - sqrt(dt)*P(i)*randn ;
    end
20 % Plotting Graphics for J(t), A(t) and P(t)
    plot(t,J, '—',t,A, ':',t,P, '-','Linewidth',3);
22 legend({'x_1','x_2','x_3'},'FontSize',12) ;
    xlabel('t'); ylabel('Populations');
```

---

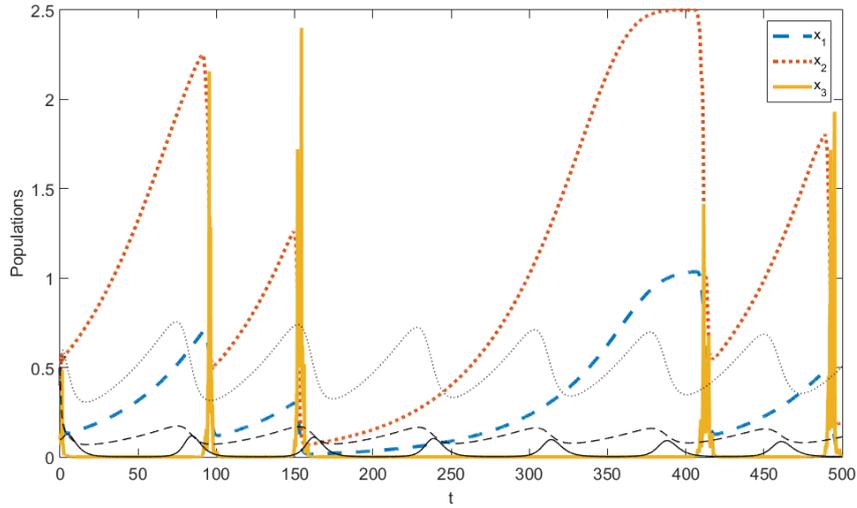
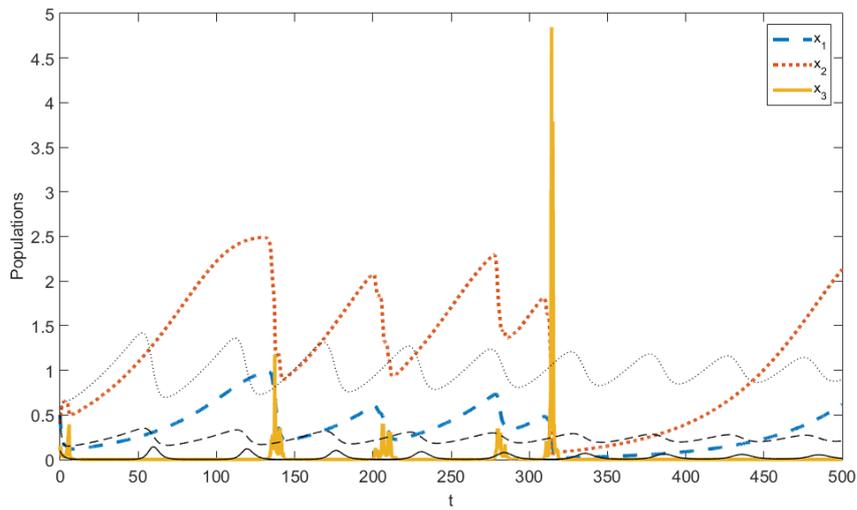
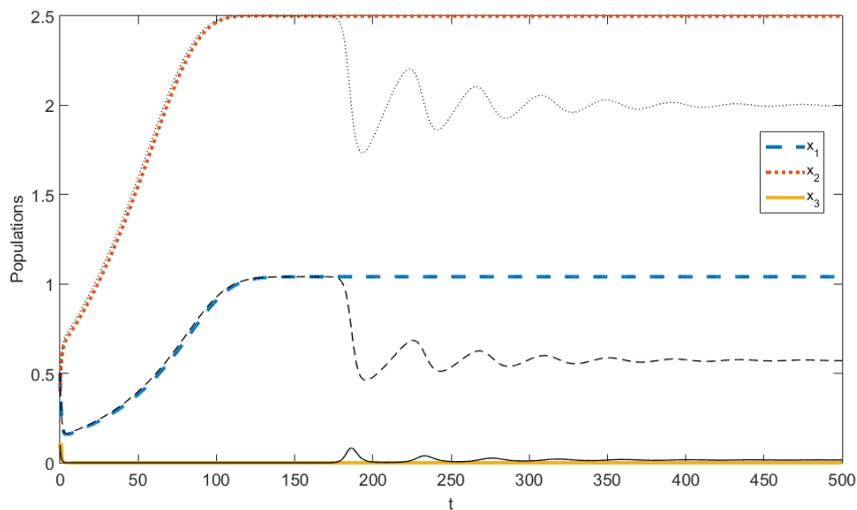
18.1:  $b = 0.25$ ,  $\mu_1 = 0.12$ ,  $\mu_2 = 0.2$  e  $\mu_3 = 0.5$ 18.2:  $b = 0.25$ ,  $\mu_1 = 0.12$ ,  $\mu_2 = 0.2$  e  $\mu_3 = 1.0$ 18.3:  $b = 0.25$ ,  $\mu_1 = 0.12$ ,  $\mu_2 = 0.2$  e  $\mu_3 = 2.0$ 

Figura 18 – Gráficos para uma realização do processo da dinâmica populacional do sistema para o cenário **A**. Linhas coloridas (e mais largas) representam os resultados do modelo estocástico 7.3, as linhas pretas (e mais finas) para o caso determinístico. As presas jovens  $x_1(t)$ , presas adultas  $x_2(t)$  e os predadores  $x_3(t)$  são representados por tipos de linhas distintas conforme a legenda

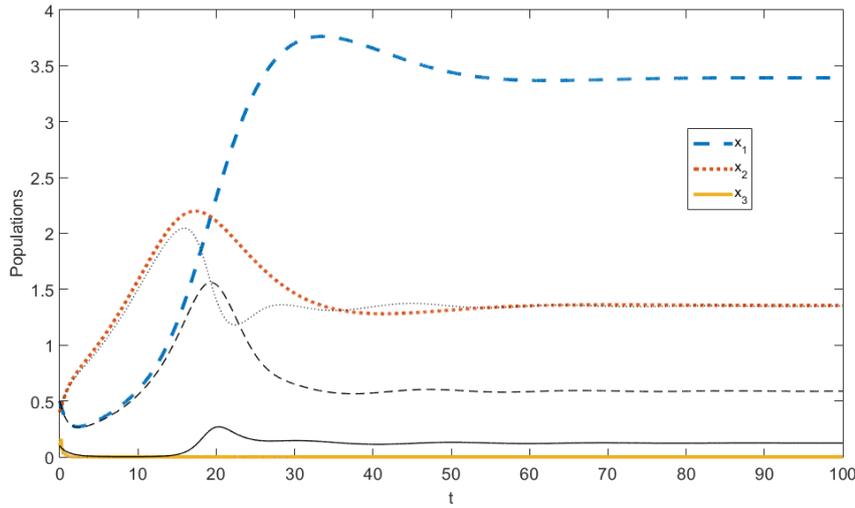
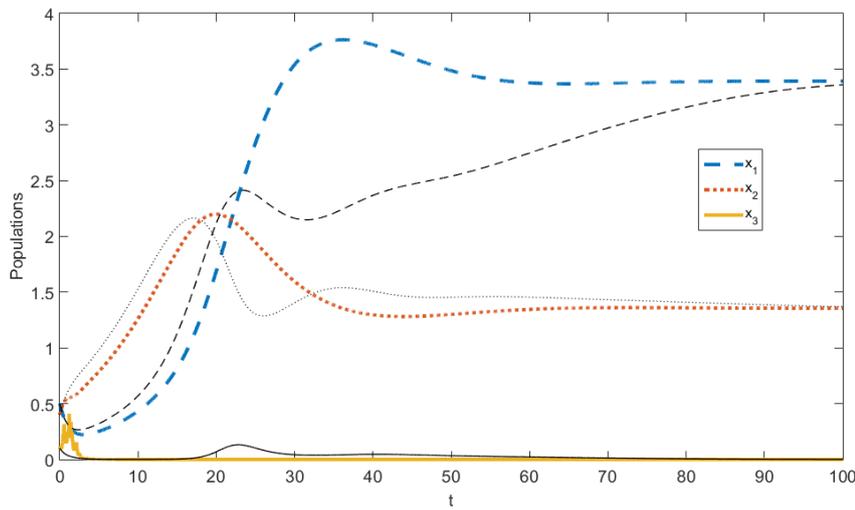
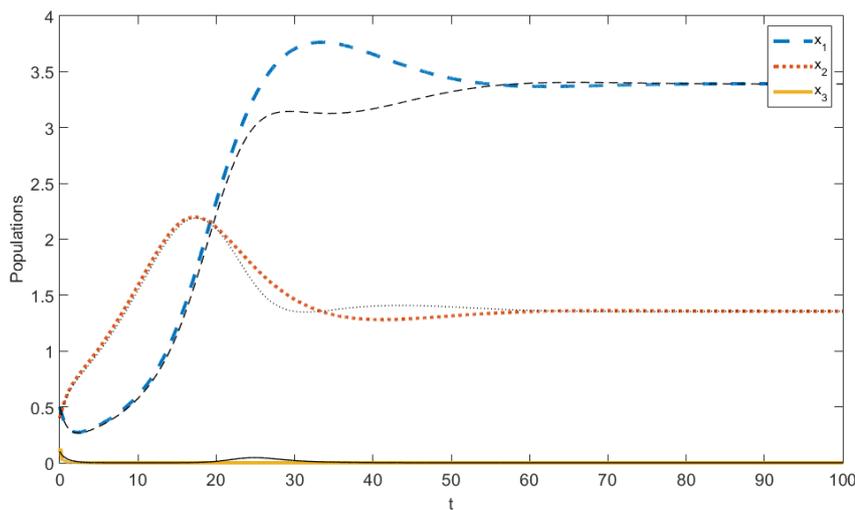
19.1:  $b = 0.35$ ,  $\mu_1 = 0.06$ ,  $\mu_2 = 0.2$  e  $\mu_3 = 1.35$ 19.2:  $b = 0.35$ ,  $\mu_1 = 0.06$ ,  $\mu_2 = 0.2$  e  $\mu_3 = 1.5$ 19.3:  $b = 0.35$ ,  $\mu_1 = 0.06$ ,  $\mu_2 = 0.2$  e  $\mu_3 = 1.6$ 

Figura 19 – Gráficos para uma realização do processo da dinâmica populacional do sistema para o cenário **B**. Linhas coloridas (e mais largas) representam os resultados do modelo estocástico 7.3, as linhas pretas (e mais finas) para o caso determinístico. As presas jovens  $x_1(t)$ , presas adultas  $x_2(t)$  e os predadores  $x_3(t)$  são representados por tipos de linhas distintas conforme a legenda

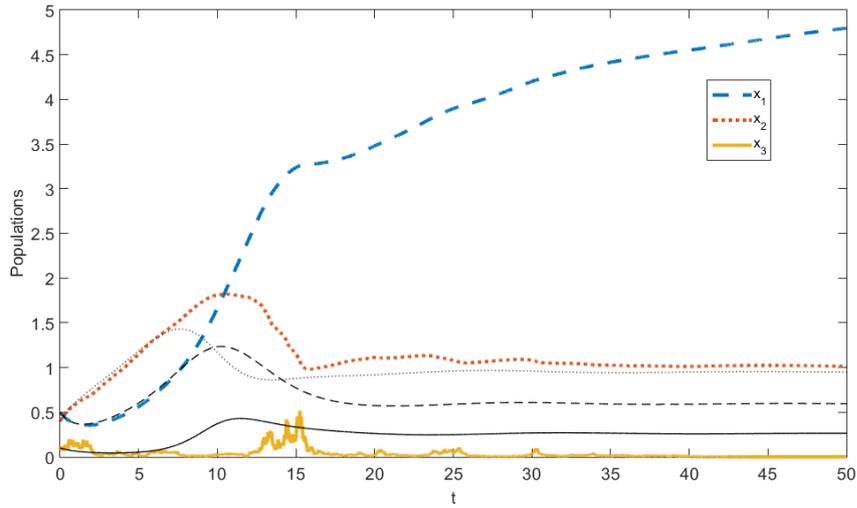
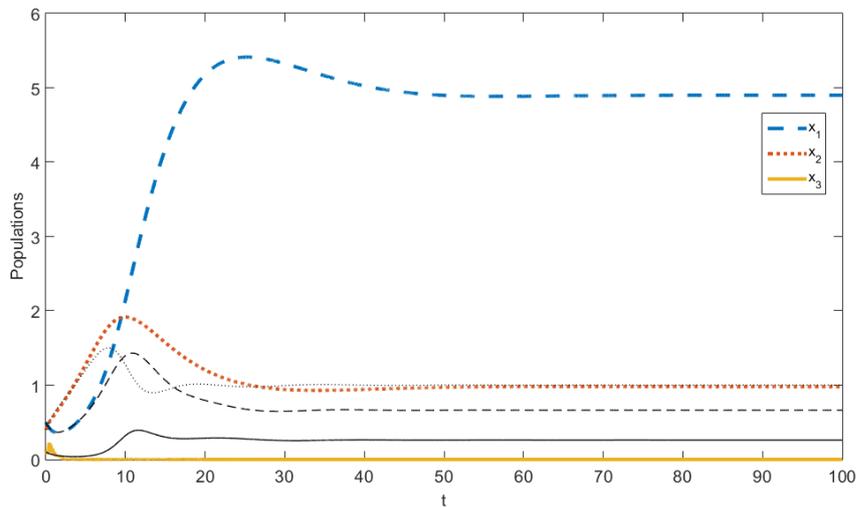
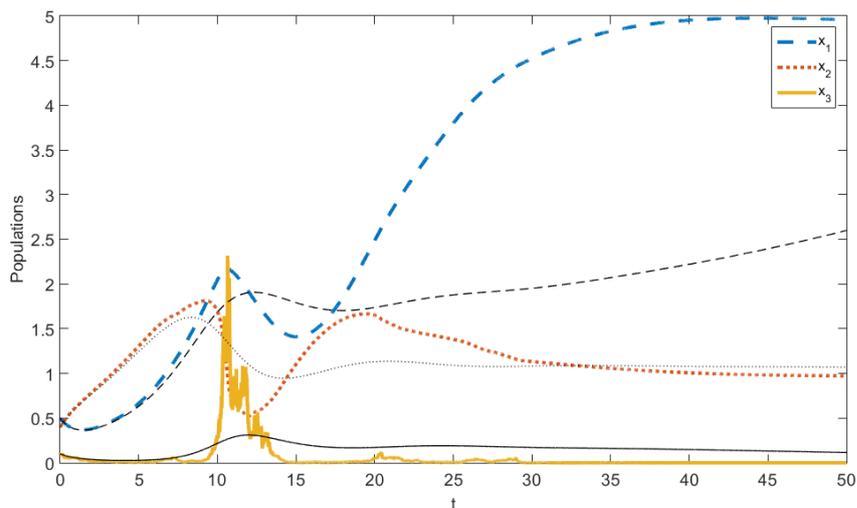
20.1:  $b = 0.5$ ,  $\mu_1 = 0.06$ ,  $\mu_2 = 0.2$  e  $\mu_3 = 0.95$ 20.2:  $b = 0.5$ ,  $\mu_1 = 0.06$ ,  $\mu_2 = 0.2$  e  $\mu_3 = 1.0$ 20.3:  $b = 0.5$ ,  $\mu_1 = 0.06$ ,  $\mu_2 = 0.2$  e  $\mu_3 = 1.1$ 

Figura 20 – Gráficos para uma realização do processo da dinâmica populacional do sistema para o cenário C. Linhas coloridas (e mais largas) representam os resultados do modelo estocástico 7.3, as linhas pretas (e mais finas) para o caso determinístico. As presas jovens  $x_1(t)$ , presas adultas  $x_2(t)$  e os predadores  $x_3(t)$  são representados por tipos de linhas distintas conforme a legenda

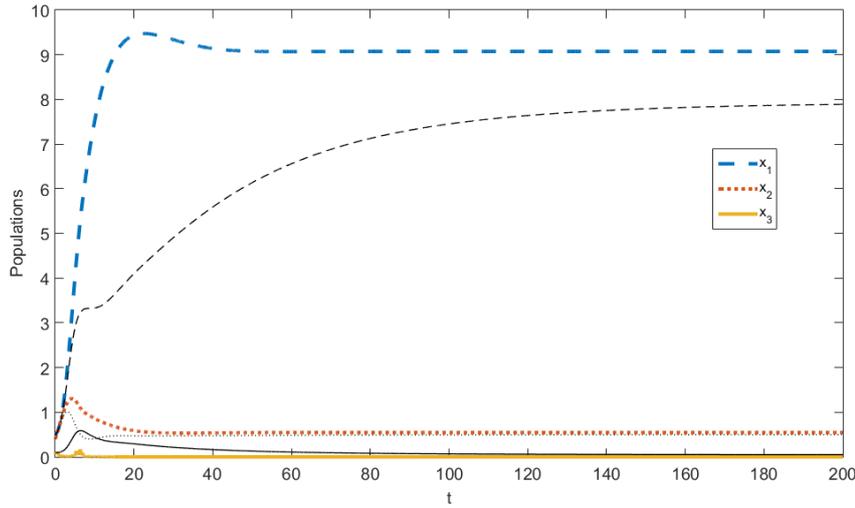
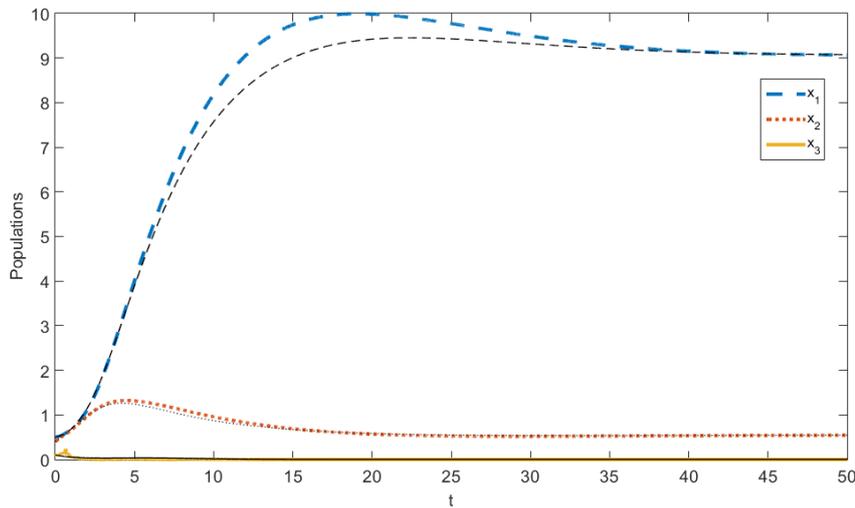
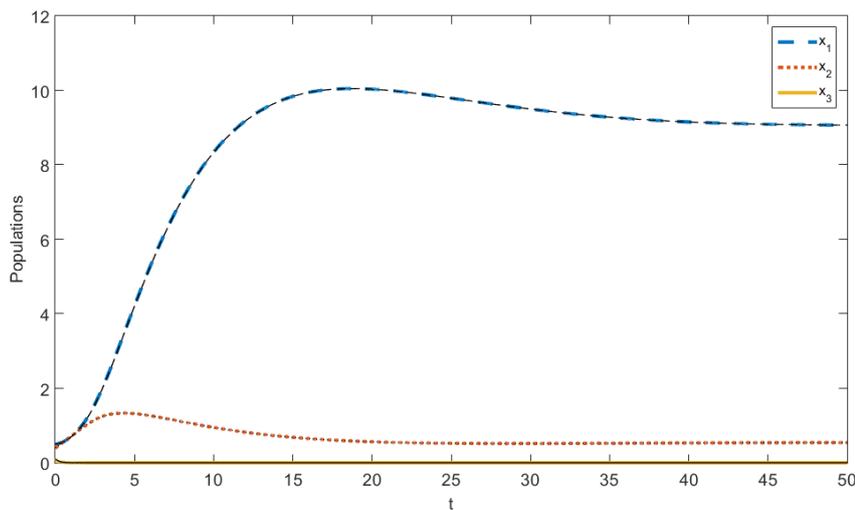
21.1:  $b = 1.2$ ,  $\mu_1 = 0.06$ ,  $\mu_2 = 0.2$  e  $\mu_3 = 0.5$ 21.2:  $b = 1.2$ ,  $\mu_1 = 0.06$ ,  $\mu_2 = 0.2$  e  $\mu_3 = 1.2$ 21.3:  $b = 1.2$ ,  $\mu_1 = 0.06$ ,  $\mu_2 = 0.2$  e  $\mu_3 = 4.0$ 

Figura 21 – Gráficos para uma realização do processo da dinâmica populacional do sistema para o cenário **D**. Linhas coloridas (e mais largas) representam os resultados do modelo estocástico 7.3, as linhas pretas (e mais finas) para o caso determinístico. As presas jovens  $x_1(t)$ , presas adultas  $x_2(t)$  e os predadores  $x_3(t)$  são representados por tipos de linhas distintas conforme a legenda

## REFERÊNCIAS

AGUIRRE, P.; GONZÁLEZ-OLIVARES, E.; TORRES, S. Stochastic predator–prey model with allee effect on prey. **Nonlinear Analysis: Real World Applications**, v. 14, n. 1, p. 768 – 779, 2013. ISSN 1468-1218. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1468121812001575>>.

ALLEN, L. J. **An introduction to stochastic processes with applications to biology**. [S.l.]: CRC Press, 2010.

ALVES, O. S. M. et al. Random walks systems on complete graphs. **Bulletin of the Brazilian Mathematical Society**, Springer, v. 37, n. 4, p. 571–580, 2006.

ALVES, O. S. M.; MACHADO, F. P.; POPOV, S. Phase transition for the frog model. **Electronic Journal of Probability**, v. 7, n. 16, p. 1–25, 2002.

\_\_\_\_\_. The shape theorem for the frog model. **The Annals of Applied Probability**, The Institute of Mathematical Statistics, v. 12, n. 2, p. 533–546, 05 2002. Disponível em: <<https://doi.org/10.1214/aoap/1026915614>>.

ANDERSSON, H.; BRITTON, T. **Stochastic epidemic models and their statistical analysis**. [S.l.]: Springer-Verlag, New York, 2000. v. 151. (Lecture Notes in Statistics, v. 151). ISBN 0-387-95050-8.

BALL, F.; BRITTON, T. An epidemic model with infector dependent severity. **Adv. Appl. Prob.**, 2007.

BANKS, H. et al. Simulation algorithms for continuous time markov chain models. **Studies in Applied Electromagnetics and Mechanics**, v. 37, p. 3–18, 01 2012.

BERTACCHI, D.; MACHADO, F. P.; ZUCCA, F. Local and global survival for nonhomogeneous random walk systems on  $\mathbb{Z}$ . **Advances in Applied Probability**, Cambridge University Press, v. 46, n. 1, p. 256–278, 2014.

CAPASSO, V.; BAKSTEIN, D. **An introduction to continuous-time stochastic processes: theory, models and applications in finance, biology and medicine**. [S.l.]: Birkhauser, 2005. ISBN 0-8176-3234-4.

CORLESS, R. M. et al. On the lambert w function. **Advances in Computational Mathematics**, v. 5, n. 1, p. 329–359, Dec 1996. ISSN 1572-9044. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF02124750>>.

DRAIEF, M.; MASSOULIE, L. **Epidemics and rumours in complex networks**. [S.l.]: Cambridge University Press, Cambridge, 2010. v. 369. (London Mathematical Society Lecture Note Series, v. 369). ISBN 978-0-521-73443-1.

ETHIER, S. N.; KURTZ, T. G. **Markov processes: characterization and convergence**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2009.

FONTES, L. R.; MACHADO, F. P.; SARKAR, A. The critical probability for the frog model is not a monotonic function of the graph. **Journal of Applied Probability**, Cambridge University Press, v. 41, n. 1, p. 292–298, 2004.

GILLESPIE, D. T. A general method for numerically simulating the stochastic time evolution of coupled chemical reactions. **Journal of Computational Physics**, v. 22, n. 4, p. 403 – 434, 1976. ISSN 0021-9991. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999176900413>.

HOFFMAN, C.; JOHNSON, T.; JUNGE, M. Recurrence and transience for the frog model on trees. **The Annals of Probability**, The Institute of Mathematical Statistics, v. 45, n. 5, p. 2826–2854, 09 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1214/16-AOP1125>.

KHASMINSKII, R.; MILSTEIN, G. N. **Stochastic Stability of Differential Equations**. Springer Berlin Heidelberg, 2011. (Stochastic Modelling and Applied Probability). ISBN 9783642232800. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=4hT6oIArOUC>.

KURTZ, T. G. et al. Limit theorems for an epidemic model on the complete graph. **ALEA Latin American Journal of Probability Mathematics and Statistics**, n. 4, p. 45–55, 2008.

LEBENSZTAYN, E.; ESTRADA, M. A. Laws of large numbers for the frog model on the complete graph. **Journal of Mathematical Physics**, v. 60, n. 12, p. 123302, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.5096521>.

LEBENSZTAYN, E.; MACHADO, F. P.; POPOV, S. An improved upper bound for the critical probability of the frog model on homogeneous trees. **Journal of statistical physics**, Springer, v. 119, n. 1, p. 331–345, 2005.

LEBENSZTAYN, E.; MACHADO, F. P.; RODRIGUEZ, P. M. Limit theorems for a general stochastic rumour model. **SIAM Journal on Applied Mathematics**, v. 71, n. 4, p. 1476–1486, 2011.

\_\_\_\_\_. On the behaviour of a rumour process with random stifling. **Environmental Modelling Software**, v. 26, n. 4, p. 517 – 522, 2011. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364815210002872>.

LEBENSZTAYN, E.; MACHADO, F. P.; ZULUAGA, M. Random walks systems with finite lifetime on  $z$ . **Journal of Statistical Physics**, v. 162, n. 3, p. 727–738, Feb 2016. ISSN 1572-9613. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s10955-015-1418-3>.

LEBENSZTAYN, E.; RODRIGUEZ, P. M. A connection between a system of random walks and rumor transmission. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, n. 392, p. 5793–5800, 2013.

LEBENSZTAYN, E.; UTRIA, J. Phase transition for the frog model on biregular trees. **arXiv e-prints**, p. arXiv:1811.05495, Nov 2018.

\_\_\_\_\_. A New Upper Bound for the Critical Probability of the Frog Model on Homogeneous Trees. **Journal of Statistical Physics**, v. 176, n. 1, p. 169–179, Jul 2019.

LI, H.; CONG, F. Dynamics of a stochastic holling–tanner predator–prey model. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 531, p. 121761, 2019. ISSN 0378-4371. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437119310131>.

LIU, Q.; JIANG, D. Stationary distribution and extinction of a stochastic predator–prey model with distributed delay. **Applied Mathematics Letters**, v. 78, p. 79 – 87, 2018. ISSN 0893-9659. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0893965917303452>>.

MAO, X. **Stochastic differential equations and applications**. [S.l.]: Elsevier Science, 2007. ISBN 9780857099402.

MAO, X.; YUAN, C. **Stochastic differential equations with Markovian switching**. [S.l.]: Imperial College Press, 2006.

MURRAY, J. D. **Mathematical Biology: an Introduction**. 3rd. ed. [S.l.]: Springer, 2002. v. 1.

PANIK, M. J. **Stochastic differential equations an introduction with applications in population dynamics modeling**. [S.l.]: John Wiley & Sons, Inc., 2017.

RAFIKOV, C. C. F. e M. Aplicação da função de lyapunov num problema de controle Ótimo de pragas. **TEMA - Tendências em Matemática Aplicada e Computacional**, v. 3, n. 2, p. 83–92, 2002. ISSN 2179-8451. Disponível em: <<https://tema.sbmec.org.br/tema/article/view/403>>.

RODRIGUEZ, P. M. et al. A process of rumour scotching on finite populations. **Royal Society open science**, v. 2, n. 9, p. 150–240, 2015.

ROOS, A. M. de; PERSSON, L.; KOOTEN, T. van. Bistability and an allee effect as emergent consequences of stage-specific predation. **Journal of Theoretical Biology**, v. 237, p. 67–74, 2005.

TELCS, A.; WORMALD, N. C. Branching and tree indexed random walks on fractals. **Journal of applied probability**, Cambridge Univ Press, v. 36, n. 04, p. 999–1011, 1999.

WANG, X. et al. The complex dynamics of a stochastic predator-prey model. **Abstract and Applied Analysis**, p. 1–7, 2012.

ZHANG, B.; WANG, H.; LV, G. Exponential extinction of a stochastic predator–prey model with allee effect. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 507, p. 192 – 204, 2018. ISSN 0378-4371. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437118306198>>.

ZHAO, S.; SONG, M. A stochastic predator-prey system with stage structure for predator. **Abstract and Applied Analysis**, p. 1–7, 2014.



## **Apêndices**



## APÊNDICE A – TEOREMAS LIMITES

### A.1 Cadeias de Markov dependentes da densidade

**Definição 7.** *Cadeias de Markov dependentes da densidade*

Para cada  $n \geq 1$ , dizemos que,  $\mathbf{H}^{(n)} = (H^n(t))_{t \geq 0}$  é uma cadeia de Markov a tempo contínuo sob uma rede hipercúbica  $d$ -dimensional  $\mathbb{Z}^d$  regida pelas seguintes transições

$$q_{h, h+l}^{(n)} = n\beta_l \left( \frac{h}{n} \right), \quad \text{onde } h, l \in \mathbb{Z}^d.$$

Isto implica que

$$\mathbb{P}(H^n(t+k) = h+l | H^n(t) = h) = kn\beta_l \left( \frac{h}{n} \right) + o(k), \quad l \neq \mathbf{0},$$

$$\mathbb{P}(H^n(t+k) = h | H^n(t) = h) = 1 - kn \sum_l \beta_l \left( \frac{h}{n} \right) + o(k).$$

As suposições necessárias são: que o processo possua apenas um número finito de transições possíveis e que essas transições são dadas por taxas  $\beta_l(x)$ , que sejam funções contínuas. Assume-se também que: o valor inicial  $H^n(0)$  seja determinístico. O processo estocástico  $\mathbf{H}^{(n)}$  definido com essas propriedades e na qual as taxas são normalizadas por  $n$  (dependente portanto da homogeneidade do processo) é denominado cadeia de Markov dependente da densidade (do inglês *density dependent Markov chain*).

Neste caso a teoria da convergência de cadeias de Markov dependentes da densidade permite que sua dinâmica pode ser aproximada pela solução de um sistema de EDOs (equações diferenciais ordinárias) .

Como definido em 7, o processo de Markov a tempo contínuo  $n \geq 1$ ,  $\mathbf{H}^{(n)} = (H^n(t))_{t \geq 0}$  pode ser caracterizado por um Processo de Poisson , neste caso, seja  $N_l = \{N_l(t); t \geq 0\}$  um processo de Poisson identicamente independente definido para cada transição  $l$ , então o processo  $H^n(t)$  pode ser escrito como:

$$H^n(t) = H^n(0) + \sum_l l N_l \left( n \int_0^t \beta_l \left( \frac{H^n(s)}{n} \right) ds \right). \quad (\text{A.1})$$

Rescrevendo-o a um processo Poisson centrado, seja  $\tilde{N}_l(t) = N_l(t) - t$ ,  $\bar{H}^n(t) = \frac{H^n(t)}{n}$  e define-se a função deriva (*the drift function*)  $F$ :

$$F(x) = \sum_l l \beta_l(x) \quad x \in \mathbb{Z}^d,$$

e substituindo esses resultados em (A.1), resulta:

$$\bar{H}^n(t) = \bar{H}^n(0) + \frac{1}{n} \sum_l l \tilde{N}_l \left( n \int_0^t \beta_l(\bar{H}^n(s)) ds \right) + \int_0^t F(\bar{H}^n(s)) ds \quad (\text{A.2})$$

Sobre certas condições  $\bar{H}^n(t)$  converge para um processo determinístico que é a solução de um sistema de equações de primeira ordem (EDOs) que é governada pela função  $F$ :

**Teorema 3.** *Aproximação determinística*

Supondo  $\lim_{n \rightarrow \infty} \bar{H}^n(0) = h(0)$  e que para um conjunto compacto  $E \subset \mathbb{R}^d$  existe uma constante positiva  $M_E$  tal que:

$$|F(x) - F(y)| \leq M_E |x - y| \quad \forall x, y \in E.$$

Então

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{s \leq t} |\bar{H}^n(s) - h(s)| = 0 \text{ q.c.}$$

onde  $h(t)$  é a solução do sistema determinístico :

$$h(t) = h(0) + \int_0^t F(h(s)) ds. \quad (\text{A.3})$$

Para provar o teorema 3 é necessário definir previamente o seguinte lema auxiliar:

**Lema 3.** *Desigualdade de Gronwalls*

Assumindo uma função  $f$  satisfazendo

$$0 \leq f(t) \leq a + b \int_0^t f(s) ds$$

, para quaisquer constantes reais positivas  $a, b$  e para  $t \geq 0$ :

$$f(t) \leq a \exp bt$$

*Demonstração.* Partindo da equação (A.2) e do teorema 3 temos:

$$\begin{aligned} |\bar{H}^n(s) - h(s)| &= \left| \bar{H}^n(0) - h_0 + \frac{1}{n} \sum_l l \tilde{N}_l \left( n \int_0^s \beta_l(\bar{H}^n(u)) du \right) + \int_0^s (F(\bar{H}^n(u)) - F(h(u))) du \right| \\ &\leq |\bar{H}^n(0) - h_0| + \sum_l |l| \sup_{u \leq s} |\tilde{N}_l(n \bar{\beta}_l u)| + \int_0^s M_E |\bar{H}^n(u) - h(u)| du \end{aligned}$$

onde  $\bar{\beta}_l = \sup_{x \in E} \beta_l(x)$ ,  $\bar{\beta}_l$  é por consequência finita, visto que a função  $\beta_l$  é finita e contínua.

Agora utilizando o lema 3:

$$| \bar{H}^n(s) - h(s) | \leq \left( | \bar{H}^n(0) - h_0 | + \sum_l | l | \sup_{u \leq s} | \tilde{N}_l(n\bar{\beta}_l u) | \right) \times \exp(M_E)s$$

e aplicando o supremo no último resultado:

$$\sup_{s \leq t} | \bar{H}^n(s) - h(s) | \leq \left( | \bar{H}^n(0) - h_0 | + \sum_l | l | \sup_{s \leq t} | \tilde{N}_l(n\bar{\beta}_l s) | \right) \times \exp(M_E)t$$

Finalmente aplicando  $\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{s \leq t} | \bar{H}^n(s) - h(s) |$  então, o primeiro termo do lado direito é zero, (lembramos que o teorema 3 assume que  $\lim_{n \rightarrow \infty} | \bar{H}^n(0) - h(0) | = 0$ ). Qualquer termo da soma converge para zero por causa do fato de que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{s \leq t} \frac{\tilde{N}_l(ns)}{n} = 0 \quad \forall t \geq 0 \quad q.c.$$

Observando que o termo exponencial não depende de  $n$ , temos conseqüentemente que:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{s \leq t} | \bar{H}^n(s) - h(s) | = 0, q.c. \tag{A.4}$$

Então, pode-se afirmar que: toda trajetória  $(h(t, h_0), t \geq 0)$  satisfaz o sistema:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} h(t, h_0) = F(h(t, h_0)) \\ h(0, h_0) = h_0 \end{cases}$$

onde  $h(t, h_0) \in E$

□

Para mais detalhes o leitor pode consultar ([ANDERSSON; BRITTON, 2000](#)), ([BALL; BRITTON, 2007](#)), ([DRAIEF; MASSOULIE, 2010](#)).



## APÊNDICE B – ALGORITMO DIRETO DE GUILLESPIE

1. Determina-se o vetor de estados iniciais do sistema  $X_0 = x_0$
  
2. Declara-se todas as taxas associadas  $\lambda_l(x)$
  
3. Para cada estado  $X = x$ , calcula-se as taxas de transições  $\lambda_l(x)$ , onde  $l = 1, \dots, \max(l)$  representa as transições possíveis
  
4. Calcule a soma de todas as taxas de transições  $\lambda_s = \sum_{l=1}^{\max(l)} \lambda_l(x)$
  
5. Simule o tempo esperado  $\tau$  até a próxima transição por meio de uma distribuição exponencial  $\tau \sim \exp(\frac{1}{\lambda_s})$
  
6. Determine o tipo de transição por meio de uma distribuição discreta tal que:  $P(\text{transição} = l) = \frac{\lambda_l(x)}{\lambda_s}$ . Gera-se um número aleatório uniforme  $u_1$  e escolhe-se a primeira transição  $l = 1$  se:  $0 < u_1 < \frac{\lambda_1(x)}{\lambda_s}$ , caso contrário se:  $\frac{\lambda_1(x)}{\lambda_s} < u_1 < \frac{(\lambda_1(x) + \lambda_2(x))}{\lambda_s}$  então o evento é associado a transição do tipo 2 e assim sucessivamente.
  
7. Atualiza-se o tempo  $t \leftarrow \tau + t$
  
8. Enquanto ( $t \leq t_{fim}$ ) retorne ao passo 3
  
9. Caso contrário finalize o programa

