



UNIVERSIDADE DA BEIRA INTERIOR

Ciências

**Métodos numéricos utilizados para a resolução de
Equações Diferenciais Ordinárias de 1ª ordem:**

Aplicação ao modelo SIR e problemas de controlo ótimo

Versão final após defesa

Teixeira Bartolomeu Mussenga

Dissertação para obtenção do Grau de Mestre em

Matemática para Professores

(2º ciclo de estudos)

Orientador: Prof. Doutor Paulo Jorge dos Santos Rebelo

Covilhã, 30 de Julho de 2018

Dedicatória

À minha querida Mãe,
Maria Francisco Bartolomeu (a título póstumo), Eterna e Memorável,
cuja dedicação abnegada fez granjear a educação para os seus filhos. Suas orientações,
guardadas aqui no âmago da minha alma, edificaram a personalidade com que hoje me
caracterizo e elegeram-na como modelo para a vida que sigo e pretendo seguir sempre.

Agradecimentos

Na concretização deste trabalho, muitas pessoas contribuíram e influenciaram de forma direta e indireta. Desde já, deixo a minha sincera gratidão, reconhecendo que seu apoio foi fundamental e extremamente valoroso.

Agradeço a Deus pelo fôlego da vida e pelas vitórias conseguidas nos últimos anos, sem Quem nada seria possível.

Presto agradecimentos aos meus progenitores, Domingos Teixeira Mussenga e Maria Francisco Bartolomeu (In memoriam), irmãos e restantes familiares, pelo apoio dado ao longo desta caminhada.

Aos meus amigos e colegas pela amizade, companheirismo, disponibilidade e atenção prestadas na realização do trabalho.

Um sentido agradecimento vai para o meu orientador, Professor Doutor Paulo Jorge dos Santos Rebelo, pela atenção e proatividade durante toda a orientação, amizade e companheirismo prestados durante a realização do trabalho. Mais, pela sua sinceridade e serenidade em avaliar e corrigir o trabalho.

Sou grato ao Dr. Infeliz Coxe (Professor da Escola Superior Politécnica de Malanje-Angola), por ter abraçado esta causa e pela forma como tem conduzido o espírito académico na província de Malanje.

Ao Professor Doutor Rui Almeida, pelo carisma, didatismo e disponibilidade em ajudar-me sempre que se fez necessário.

Minhas gratulações são ainda extensivas ao corpo docente do Curso de Mestrado em Matemática para Professores e ao laborioso pessoal da UBI, que no delinear deste curso, tudo fizeram em benefício de todos e para todos.

Resumo

O objectivo deste trabalho é apresentar alguns métodos numéricos que são utilizados para resolução de Equações Diferenciais Ordinárias de primeira ordem. Visa essencialmente resolver um problema de valores iniciais para o modelo SIR. Os resultados obtidos são comparados e analisados. Depois, utilizamos a Teoria do controlo ótimo para minimizar o número de elementos infectados da população quer, por vacinação (prevenção nos indivíduos susceptíveis da população) e tratamento (dos elementos infectados da população), só utilizando a prevenção e no último caso, só o tratamento. A simulação numérica permitiu-nos retirar algumas conclusões sobre a aplicação dos métodos numéricos. A precisão dos resultados obtidos depende muito do valor do passo h . No caso do método de Euler, os resultados obtidos pela sua utilização são razoáveis apenas para valores muito pequenos de h (quando comparados com outros métodos).

Quando consideramos os problemas de controlo ótimo, mostramos que os resultados são melhores (o número de infectados diminui mais rapidamente) quando é utilizada a prevenção e o tratamento quando comparados com os outros casos (só vacinação e só tratamento).

Palavras-chave

Métodos numéricos, EDOs, Modelo epidémico SIR e Controlo Ótimo.

Abstract

The aim of this work is to present several numerical methods and their application to solve an initial value problem for a first order system. Namely, we solve an initial value problem for the SIR model: the results are compared and analysed. Then, we use optimal control theory to minimize the infected elements of the population, by vaccination (prevention of the susceptible elements of the population) and treatment (of the infected elements of the population), only vaccination and the last case, treatment. The numerical simulation allows us to withdraw some conclusions upon the numerical methods. The accuracy of the results depends upon the value of h . For the Euler method the results are "reasonable" for very small values of the step, h (when compared with other methods).

When we consider the optimal control problems, it is showed that controlled SIR model with prevention and treatment has some advantages with the other two cases (only prevention and only treatment).

Keywords

Numerical methods, ODEs, SIR epidemic model. and Optimal control.

Conteúdo

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Introdução | 1 |
| 1.1 | Objectivos | 2 |
| 1.1.1 | Objectivo Geral | 2 |
| 1.1.2 | Objectivos específicos | 2 |
| 1.2 | Estrutura do trabalho | 2 |
| 2 | Modelos epidémicos | 5 |
| 2.1 | Descrição do Modelo SIR | 6 |
| 2.1.1 | Estado de equilíbrio do modelo SIR | 7 |
| 3 | Aproximação numérica da solução exata do problema de valor inicial | 11 |
| 3.1 | Aproximação pelo Método de Euler | 11 |
| 3.1.1 | Discretização do Método de Euler | 11 |
| 3.1.2 | Discretização do modelo SIR pelo método de Euler | 12 |
| 3.1.3 | Simulação numérica | 12 |
| 3.2 | Aproximação pelo Método de Runge-Kutta | 15 |
| 3.2.1 | Discretização do método de Runge-Kutta | 15 |
| 3.2.2 | Discretização do modelo SIR pelo método de Runge-Kutta | 17 |
| 3.2.3 | Simulação numérica | 18 |
| 3.3 | Aproximação pelo Método de passo múltiplo | 19 |
| 3.3.1 | Discretização do método de passo múltiplo | 19 |
| 3.3.2 | Discretização do método explícito | 20 |
| 3.3.3 | Discretização do método implícito | 21 |
| 3.3.4 | Descrição do método Predictor-Corrector | 22 |
| 3.4 | Aplicação do método Predictor-Corrector ao modelo SIR | 23 |
| 3.4.1 | Simulação numérica | 23 |
| 3.5 | Comparação dos Métodos | 24 |
| 3.5.1 | Principais vantagens dos métodos | 27 |
| 3.5.2 | Principais Desvantagens dos métodos | 27 |
| 4 | Teoria do Controlo Ótimo | 29 |
| 4.1 | Breve introdução à teoria de controlo ótimo | 29 |
| 4.2 | Descrição do problema básico de controlo ótimo | 30 |
| 4.2.1 | Função objectivo | 31 |
| 4.2.2 | Função valor | 31 |
| 4.2.3 | Princípio de programação dinâmica de Bellman (PPD) | 31 |
| 4.3 | Fórmula de diferenças regressivas ou Euler regressivo | 34 |
| 4.4 | Apresentação do problema controlado com Vacinação e Tratamento | 35 |
| 4.4.1 | O Hamiltoniano e o problema de valores na fronteira | 36 |
| 4.4.2 | Simulação numérica | 37 |

| | | |
|-------|--|-----------|
| 4.4.3 | Discretização do problema controlado com vacinação e tratamento pelo método de Euler | 38 |
| 4.4.4 | Discretização do problema controlado com vacinação e tratamento pelo método de Runge-Kutta | 40 |
| 4.5 | Apresentação do problema controlado apenas com Vacinação | 42 |
| 4.5.1 | O Hamiltoniano e o problema de valores na fronteira | 42 |
| 4.5.2 | Discretização do problema controlado apenas com vacinação pelo método de Euler | 44 |
| 4.5.3 | Discretização do problema controlado só com vacinação pelo método de Runge-Kutta | 46 |
| 4.6 | Apresentação do problema controlado só com tratamento | 48 |
| 4.6.1 | O Hamiltoniano e o problema de valores na fronteira | 48 |
| 4.6.2 | Discretização do problema controlado só com tratamento pelo método de Euler | 50 |
| 4.6.3 | Discretização do problema controlado só com tratamento pelo método de RK | 52 |
| | Considerações finais | 54 |
| | Bibliografia | 57 |

Lista de Figuras

| | | |
|------|--|----|
| 3.1 | Caso de surto epidémico, $R_0 > 1$ pelo método de Euler | 13 |
| 3.2 | Caso de surto extinto, $R_0 < 1$ pelo método de Euler | 13 |
| 3.3 | Surto epidémico, $\gamma = 0$ pelo método de Euler | 13 |
| 3.4 | Caso de surto epidémico, $R_0 > 1$ pelo método de RK | 18 |
| 3.5 | Caso de surto extinto, $R_0 < 1$ pelo método de RK | 18 |
| 3.6 | Caso de surto epidémico $R_0 > 1$ pelo método de PC | 23 |
| 3.7 | Caso de surto extinto $R_0 < 1$ pelo método de PC | 23 |
| | | |
| 4.1 | Modelo controlado com vacina e tratamento, caso de $R_0 > 1$ pelo Euler . . . | 39 |
| 4.2 | Modelo controlado com vacina e tratamento, caso de $R_0 < 1$ pelo Euler . . . | 39 |
| 4.3 | Níveis dos controlos para o caso em que $R_0 > 1$ utilizando Euler | 39 |
| 4.4 | Níveis dos controlos para o caso em que $R_0 < 1$ utilizando Euler | 39 |
| 4.5 | Co-estado das funções para caso em que $R_0 > 1$ em vacinação e tratamento utilizando Euler | 39 |
| 4.6 | Co-estado das funções para caso em que $R_0 < 1$ em vacinação e tratamento utilizando Euler | 39 |
| 4.7 | Modelo controlado com vacina e tratamento, caso de $R_0 > 1$ utilizando RK | 41 |
| 4.8 | Modelo controlado com vacina e tratamento, caso de $R_0 < 1$ utilizando RK | 41 |
| 4.9 | Níveis dos controlos para o caso em que $R_0 > 1$ utilizando RK | 41 |
| 4.10 | Níveis dos controlos para o caso em que $R_0 < 1$ utilizando RK | 41 |
| 4.11 | Co-estado das funções para caso em que $R_0 > 1$ em vacinação e tratamento utilizando RK | 41 |
| 4.12 | Co-estado das funções para caso em que $R_0 < 1$ em vacinação e tratamento utilizando RK | 41 |
| 4.13 | Modelo controlado só com vacinação, caso de $R_0 > 1$ pelo método de Euler | 44 |
| 4.14 | Modelo controlado só com vacinação, caso de $R_0 < 1$ pelo método de Euler | 44 |
| 4.15 | Nível de vacinação para o caso de $R_0 > 1$ utilizando Euler | 45 |
| 4.16 | Nível de vacinação para o caso de $R_0 < 1$ utilizando Euler | 45 |
| 4.17 | Co-estado das funções para caso em que $R_0 > 1$ em vacinação utilizando Euler | 45 |
| 4.18 | Co-estado das funções para caso em que $R_0 < 1$ em vacinação utilizando Euler | 45 |
| 4.19 | Modelo controlado só com vacinação caso de $R_0 > 1$ pelo método de RK . . | 47 |
| 4.20 | Modelo controlado só com vacinação caso de $R_0 < 1$ pelo método de RK . . | 47 |
| 4.21 | Nível de vacinação para o caso de $R_0 > 1$ utilizando RK | 47 |
| 4.22 | Nível de vacinação para o caso de $R_0 < 1$ utilizando RK | 47 |
| 4.23 | Co-estado das funções para caso em que $R_0 > 1$ em vacinação utilizando RK | 47 |
| 4.24 | Co-estado das funções para caso em que $R_0 < 1$ em vacinação utilizando RK | 47 |
| 4.25 | Modelo controlado só com tratamento, caso de $R_0 > 1$ pelo método de Euler | 50 |
| 4.26 | Modelo controlado só com tratamento caso de $R_0 < 1$ pelo método de Euler | 50 |
| 4.27 | Nível de tratamento para o caso de $R_0 > 1$ utilizando Euler | 51 |

| | | |
|------|---|----|
| 4.28 | Nível de tratamento para o caso de $R_0 < 1$ utilizando Euler | 51 |
| 4.29 | Co-estado das funções para caso em que $R_0 > 1$ em tratamento utilizando Euler | 51 |
| 4.30 | Co-estado das funções para caso em que $R_0 < 1$ em tratamento utilizando Euler | 51 |
| 4.31 | Modelo controlado só com tratamento caso de $R_0 > 1$ pelo método de RK . | 53 |
| 4.32 | Modelo controlado só com tratamento caso de $R_0 < 1$ pelo método de RK . | 53 |
| 4.33 | Nível de tratamento para o caso de $R_0 > 1$ utilizando RK | 53 |
| 4.34 | Nível de tratamento para o caso de $R_0 < 1$ utilizando RK | 53 |
| 4.35 | Co-estado das funções para caso em que $R_0 > 1$ em tratamento utilizando RK | 53 |
| 4.36 | Co-estado das funções para caso em que $R_0 < 1$ em tratamento utilizando RK | 53 |

Lista de Tabelas

| | | |
|-----|---|----|
| 3.1 | Caso de propagação epidémica com $R_0 > 1$, pelo método de Euler | 14 |
| 3.2 | Caso de surto endémico com $R_0 < 1$, pelo método de Euler | 14 |
| 3.3 | Caso de propagação epidémica com $R_0 > 1$. pelo método de RK | 18 |
| 3.4 | Caso de propagação endémica com $R_0 < 1$ pelo método de RK | 19 |
| 3.5 | Caso de propagação epidémica com $R_0 > 1$. pelo método PC | 24 |
| 3.6 | Caso de propagação endémica com $R_0 < 1$. pelo método PC | 24 |
| 3.7 | Comparação dos métodos caso em que $R_0 > 1$ | 25 |
| 3.8 | Comparação dos métodos caso em que $R_0 < 1$ | 26 |

Lista de Notação

| | |
|---|--|
| β | Taxa média de contacto (entre os indivíduos infectados e os susceptíveis) |
| γ | Taxa média de recuperação (dos infectados) |
| S | Variável que representa o estágio dos indivíduos expostos a doença, onde S_i equivale a $S(t_i)$. É a aproximação fornecida por método numérico |
| I | Variável que representa o estágio de infecção dos indivíduos |
| R | Variável que representa o estado de recuperados dos elementos do grupo |
| \mathcal{H} | Hamiltoniano |
| \mathcal{V} | Função de otimalidade funcional da função objectivo (função valor) |
| N | Número total de elementos da população |
| f_i | Valor aproximado da função |
| R_0 | Número básico de reprodução da infecção |
| RK | Runge-Kutta |
| PC | Preditor-Corrector |
| PVI | Problema de Valor Inicial |
| PVF | Problema de Valores na Fronteira |
| EDO | Equação Diferencial Ordinária |
| $x^*(t)$ | Trajectoria do estado do sistema dinâmico |
| $u^*(t)$ | Controlo ótimo para o sistema dinâmico |
| $P(t)$ | Vetor multiplicador correspondente de Lagrange |
| ψ_{i+1} | Solução aproximada à solução exata do PVI no instante $t_i + h$ |
| $f(t_i, \psi_i)$ | Valor da função definida pelas condições iniciais |
| $\psi' = \frac{\psi}{dt}$ | Derivada da função incógnita no instante t |
| $f_t = \frac{\partial f}{\partial t}$ | Derivada parcial da f em ordem t |
| $f_\psi = \frac{\partial f}{\partial \psi}$ | Derivada parcial da f em ordem a ψ |
| $\begin{bmatrix} S \\ I \\ R \end{bmatrix}_i$ | Entende-se por $\begin{bmatrix} S(t_i) \\ I(t_i) \\ R(t_i) \end{bmatrix} \in M_{3,1}$ para $0 \leq i \leq n$. |

Capítulo 1

Introdução

A Matemática (juntamente com outras áreas do conhecimento) fornece modelos (muitas das vezes constituídos por equações diferenciais) que servem para simular (muitas vezes de uma forma simplificada) situações do quotidiano. Em muitas situações não é possível obter a solução exata para as equações que modelam esses fenómenos. Todavia, a matemática fornece métodos para obter soluções aproximadas para os mesmos.

Afim de aproximar a solução, considera-se para o problema condições suplementares, formando assim, o problema de valor inicial (*PVI*), tal como,

$$\begin{cases} \psi' &= f(t, \psi), \quad t \in]t_0, t_f[\\ \psi(t_0) &= \psi_0 \in \mathbb{R}. \end{cases} \quad (1.1)$$

Os métodos numéricos permitem determinar aproximações de $\psi_i \approx \psi(t_i)$ num conjunto de pontos igualmente espaçados, $t_0 < t_1 < \dots < t_n$ designado por malha uniforme na qual os t_i são dados por,

$$t_{i+1} = t_0 + ih, \quad (1.2)$$

com $0 \leq i < n$ e

$$h = \frac{(t_f - t_0)}{n}, \quad (1.3)$$

designado por passo ou medida do passo da malha. Para a solução do *PVI* em (1.1), é necessário escrever a função recursiva tal como veremos nas secções seguintes.

Neste trabalho vamos apresentar métodos de Euler, Runge-Kutta, ambos pertencentes à classe de métodos de passo simples por trabalharem só com um ponto da malha e o método Preditor-Corrector pertencente à classe de métodos passo de múltiplo porque trabalham com mais de um ponto da malha.

No decorrer do trabalho, apresenta-se ainda um método de diferenças regressivas que é utilizado no problema de controlo ótimo para determinar a solução do problema de valores na fronteira (*PVF*).

Afim de mostrar o processo que determina matematicamente a solução aproximada e obter conclusões foram desenvolvidas teorias do modelo *SIR* (autoria do Kermack e McKendrick), dadas condições iniciais; teoria dos métodos numéricos mencionados acima, cujos cálculos foram auxiliados por Matlab; seguiu-se ainda apresentar a teoria de controlo ótimo com alguns problemas conjecturados a ele, motivadas da necessidade de minimizar os índices de infecção e melhorar o grau de recuperação dos indivíduos afectados pela doença.

Portanto, o estudo permitiu inferir que entre os métodos aqui apresentados, o de Euler é um

bom candidato aos cálculos de aproximações para o *PVI*, face a simplicidade operacional. Mas, na prática pouco tem sido usado, pois, os seus resultados só são razoáveis para valores de h suficientemente pequenos.

Conclui-se ainda que o estado de situação endémica está condicionado aos parâmetros β e γ , conforme valores de R_0 , é suficiente exigir que $\beta < \gamma$ para evitar uma epidemia.

1.1 Objectivos

1.1.1 Objectivo Geral

Apresentar alguns métodos numéricos utilizados para a resolução de Equações Diferenciais Ordinárias de primeira ordem.

1.1.2 Objectivos específicos

- Resolver numericamente um problema de valor inicial para o modelo *SIR*;
- Comparar os resultados obtidos entre os métodos na parte numérica;
- Analisar os resultados do modelo *SIR* em casos diferentes da dinâmica do estado endémico;
- Minimizar os índices de propagação da infecção utilizando controlo ótimo.

1.2 Estrutura do trabalho

Este trabalho encontra-se estruturado da seguinte forma:

- Capítulo I- Introdução
Nesta parte do trabalho configura-se os preliminares da dissertação, bem como os objectivos.
- Capítulo II- Modelo epidémico
 - Descrição do modelo *SIR*
 - Ponto de Equilíbrio
- Capítulo III- Aproximação numérica da solução exata do problema de valor inicial
 - Aproximação pelo método de Euler
 - Aproximação pelo método de Runge-Kutta
 - Aproximação pelo método de passo múltiplo (Preditor-Corrector)
 - Aplicação do método Preditor-Corrector ao modelo *SIR*

- Comparação dos métodos
- Capítulo IV- Teoria de controlo ótimo
 - Breve considerações sobre teoria do controlo ótimo
 - Função valor
 - Princípio de programação dinâmica de Bellman para funções contínuas
 - Descrição do problema de controlo ótimo
 - Apresentação do problema controlado com vacinação e tratamento
 - Apresentação do problema controlado apenas com vacinação
 - Apresentação do problema controlado só com tratamento
- Considerações finais
- Bibliografia

Capítulo 2

Modelos epidémicos

A aplicação de métodos matemáticos para estudo da propagação de doenças é um trabalho que vem desde 1760 com Daniel Bernoulli quando este apresentou métodos matemáticos para o estudo da varicela,[3].

Desde então, muitos matemáticos e não só, Físicos e Engenheiros também desenvolveram modelos que servem hoje de instrumentos indispensáveis a outras áreas do conhecimento. Entre elas, Física, Química, Engenharia e Biologia.

Estes modelos, são em muitos casos uma representação simplificada do fenómeno sem perder a sua essência, fornecem resultados e técnicas necessárias para o estudo de fenómenos que ocorrem relacionados com a área em estudo, como é o caso dos modelos epidémicos.

As designações dos modelos são formadas pelas iniciais dos nomes dados aos compartimentos que o compõem. Estes compartimentos variam segundo as características da população que nos casos mais simples dividem-se em,[6],

- Susceptíveis(S): Nesta fase o indivíduo está exposto à epidemia e pode ser infectado;
- Infectados (I): Fase pela qual o indivíduo infectado propaga a doença aos Susceptíveis mediante contactos;
- Recuperados (R): Fase em que os indivíduos deixam a fase dos infectados e encontram-se imunes contra certas doenças infecciosas como Sarampo e Meningite, cuja incidência é grandemente diagnosticada na infância.

Pois, existem vários modelos epidémicos formados por **EDOs**. Para citar, SIR , SIS , $SIRS$, $SEIR$, etc. Vamos aqui estudar o modelo SIR que passamos a descrever na secção seguinte. Estas abordagens podem ainda dividir-se em dois grupos:

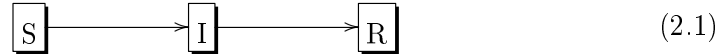
- **Estocásticos:** Trata de estudar infecções que se propagam aleatoriamente por certos elementos pertencentes a um grupo restrito de indivíduos (grupo numerável). Esta contempla distribuições de probabilidade com índice potencialmente patológico em determinados períodos de tempo.
- **Determinista:** Aplica-se a grandes aglomerações populacionais onde se considera a distribuição dos indivíduos do grupo em subgrupos de diferentes estágios da doença, por isso, muitas vezes é também chamado de modelo compartimentado.

Chama-se atenção a este último porque o tipo de modelo que vamos aqui estudar enquadra-se neste grupo.

Como já se referiu, há muitos fenómenos nas áreas citadas que são modelados por equações diferenciais ou sistemas de equações diferenciais (ordinárias ou parciais). No entanto, para muitos desses modelos não é possível obter a solução exata, pelo que é necessário encontrar uma solução aproximada utilizando métodos numéricos.

2.1 Descrição do Modelo SIR

É um modelo compartimentado proposto por Kermack e McKendrick em 1927, quando os autores tornaram público um de seus trabalhos conjunto intitulado "*A contribution to the mathematical theory of Epidemics*", assumindo que uma população endêmica pode ser dividida em três compartimentos (Susceptíveis $S(t)$ - infectados $I(t)$ - Recuperados $R(t)$), [2].



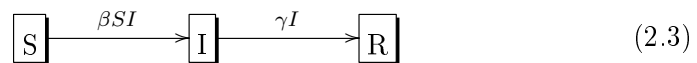
Os autores deste modelo consideram uma população com um número fixo de elementos, isto é, (não há mortalidade provocada pela doença, nem nascimento, nem migração, etc.). Pois, o ciclo do estágio Susceptível-Infectado e de Recuperação dos indivíduos é permanente durante a vida, [6],

$$N = S(t) + I(t) + R(t), \quad \forall t \in [t_0, t_f]. \quad (2.2)$$

A presença de um indivíduo infectado no seio da população expressa-se por (βN) , pelo que, ocorre novas infecções quando houver contacto entre uma pessoa infectada com uma pessoa no estado susceptível representada pela fracção $\frac{S}{N}$. Assim, o aparecimento de novas infecções que vão surgindo no seio da população por unidade de tempo é dada por $\beta N(\frac{S}{N}) = \beta S$, [8].

Conforme o contacto que os indivíduos vão tendo uns com os outros, por [7] temos;

1. Um indivíduo susceptível à doença deixa o grupo dos susceptíveis após contacto com um infectado e passa para o grupo dos infectados. A expressão matemática que a representa é $\beta N(\frac{S}{N})I = \beta SI$ para uma constante β positiva;
2. De igual modo os indivíduos infectados podem entrar para a classe dos recuperados, isso, aconteça à taxa γI , para alguma constante γ positiva. Isto é,



Deste modo, o modelo epidémico *SIR* padrão é formado pelo seguinte sistema de equações diferenciais,

$$\begin{cases} S' &= -\beta SI \\ I' &= \beta SI - \gamma I, \\ R' &= \gamma I \end{cases} \quad (2.4)$$

onde β é a taxa de contacto entre os indivíduos susceptíveis e os infectados que determina o valor médio de novas infecções que vão surgindo na população e γ representa a taxa de recuperação dos infectados como referida anteriormente, com S, I e R funções que dependem do tempo, que, satisfazem a condição inicial,

$$\begin{cases} S(t_0) = S_0 \\ I(t_0) = I_0, \\ R(t_0) = R_0 \end{cases} \quad (2.5)$$

para,

$$N_0 = S(t_0) + I(t_0) + R(t_0) . \quad (2.6)$$

Considerando que vamos trabalhar com percentagem de indivíduos, a relação (2.6) passa a,

$$S_0 + I_0 + R_0 = 1. \quad (2.7)$$

2.1.1 Estado de equilíbrio do modelo SIR

Pelo que já abordámos sobre o estágio endémico interessa-nos agora, saber do ponto de vista epidemiológico que circunstâncias são dadas por pontos de equilíbrio estáveis ou instáveis, pois, motiva-nos a pensar se:

- Em que ponto há presença da doença no seio da população?
- Quanto tempo pode durar uma situação endémica?
- Que estados podem ser considerados críticos e epidémicos?

Neste contexto há-de se fazer algumas análises sobre o modelo, havendo necessidade de criar algumas hipóteses que aceitaremos como válidas.

- Começamos por discutir a duração média da infecção, este, é um caso particular e especial a ser estudada a partir da segunda equação do sistema (2.4).

Suponhamos não haver novas infecções então, a segunda equação do sistema (2.4) traduz-se numa equação linear de primeira ordem da forma,

$$I' = -\gamma I, \quad (2.8)$$

pelas condições iniciais em (2.5), obtém-se

$$I(t) = I_0 e^{-\gamma t}. \quad (2.9)$$

Consideremos o número de indivíduos infectados que se recuperam no tempo dado por,

$$(t, t + \Delta t) = |dI|, \quad (2.10)$$

por outro lado, temos

$$|dI| = \left| \frac{dI}{dt} dt \right|. \quad (2.11)$$

Então, o número de indivíduos infectados com duração de infecção na faixa $(t, t + \Delta t)$, é dada por

$$I(t) = I_0 e^{-\gamma t} \Rightarrow I'(t) = -I_0 \gamma e^{-\gamma t}. \quad (2.12)$$

Portanto, a função de ponderação que fornece a média do tempo que um indivíduo infectado permanece com infecção é dado por,

$$\tau = \frac{\int_0^\infty |dI|}{\int_0^\infty \left| \frac{dI}{dt} dt \right|}, \quad (2.13)$$

onde

$$\tau = \frac{\int_0^\infty I_0 e^{-\gamma t} dt}{\int_0^\infty I_0 \gamma e^{-\gamma t} dt} = \frac{1}{\gamma}. \quad (2.14)$$

- Para sabermos em que ponto há ou não presença da doença, para o modelo *SIR*, a condição de equilíbrio é feita diretamente da segunda equação do sistema (2.4). Pois, de acordo com [3].

– Ponto de equilíbrio estável é o ponto livre de doença, isto é, ponto em que $I' = 0$ pois, a expressão (2.4) satisfaz,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{---} \\ (\beta S^* - \gamma) I^* = 0 \\ \text{---} \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{---} \\ I^* = 0 \quad \vee \quad S^* = \frac{\gamma}{\beta} \\ \text{---} \end{array} \right. \quad (2.15)$$

- Nestas condições, para dado β e γ há um número crítico de indivíduos susceptíveis para uma epidemia ocorrer, sendo que S^* diminuiu para o valor $\frac{\gamma}{\beta}$.

– Se $\frac{dI}{dt} < 0$, da (2.4), obtém-se

$$\beta S^* < \gamma, \quad (2.16)$$

multiplicando por $\frac{1}{\gamma}$, obtém-se,

$$\frac{\beta S^*}{\gamma} < 1,$$

donde $\frac{\beta}{\gamma}$ é o número de reprodução que determina o valor médio de infecções produzidas por um indivíduo infectado.

– Análogo, se $\frac{dI}{dt} > 0$, tem-se $\frac{\beta S^*}{\gamma} > 1$.

Se S_0 é o número inicial de susceptíveis, então, a condição para uma epidemia é,

$$R_0 S_0 > 1, \quad (2.17)$$

donde,

$$R_0 = \frac{\beta}{\gamma}. \quad (2.18)$$

Logo, reafirmar-se que:

- * $R_0 = 1$, significa que um certo número de pessoas infectadas está a infectar o mesmo número de indivíduos;
- * $R_0 > 1$, o número de infectados cresce substancialmente, o evento se qualifique por epidémico;
- * $R_0 < 1$ o surto desaparece.

Durante a propagação da doença, a dado momento a infecção atingirá um número máximo de infecção designado por pico da epidemia.

Capítulo 3

Aproximação numérica da solução exata do problema de valor inicial

Neste capítulo são apresentados alguns métodos numéricos de passo simples e múltiplo, como se referiu no início. São eles, método de Euler e de Runge-Kutta (da classe de passo simples por trabalharem só com um ponto da malha) e o método Preditor-Corrector (pertencentes a classe de passo múltiplo porque trabalham com mais de um ponto da malha). Vamos utilizar estes métodos para obter uma solução aproximada para o problema de valor inicial que de agora em diante passaremos a designar por (PVI).

Os métodos aqui apresentados, quer de passo simples, quer de passo múltiplo, são de segunda ordem com excepção do método de Euler que é de primeira ordem.

3.1 Aproximação pelo Método de Euler

Euler (1707-1783), apresentou um método numérico de passo simples fácil de compreender e operacionalizar mas bastante razoável, também conhecido por método das isóclinas. Deu início a este estudo Newton, seguindo por Leibniz e então concluído por Euler, [5].

O método consiste em substituir o processo de integração e derivadas de funções por operações aritméticas simples, para tal, basta conhecer as condições iniciais fornecida pelo problema, ver [10].

3.1.1 Discretização do Método de Euler

Em primeiro lugar, vamos aproximar a derivada de $\psi(t)$ pela razão incremental,

$$\frac{d\psi}{dt} \approx \frac{\psi(t+h) - \psi(t)}{h}, \quad (3.1)$$

pelo que, $\psi'(t)$ fica aproximada. Portanto, da (3.1) e (1.1), concluir-se,

$$\begin{cases} \psi_{i+1} &= \psi_i + hf(t_i, \psi(t_i)) \\ \psi(t_0) &= \psi_0. \end{cases} \quad (3.2)$$

A expressão (3.2), na forma escrita designa-se por fórmula de Euler para aproximar o PVI, onde os t_i são determinados por (1.2) e h por (1.3), com $0 \leq i < n$. Para,

$$t_0 < t_1 < \dots < t_{n-1} < t_n. \quad (3.3)$$

3.1.2 Discretização do modelo SIR pelo método de Euler

Uma vez que não é possível obter a solução exata do problema apresentado em (2.4) e (2.5), vamos obter uma solução numérica utilizando o método de Euler deduzido na secção anterior.

Seguindo os mesmos procedimentos descritos na secção (3.1) para obter a equação (3.2), (fórmula de Euler a uma só equação), vamos igualmente determinar da (2.4) e (2.5), o sistema discretizado do modelo *SIR* para o método de Euler a que designaremos por sistema recursivo de Euler. Pois,

$$\begin{bmatrix} S \\ I \\ R \end{bmatrix}^{(i+1)} = \begin{bmatrix} S \\ I \\ R \end{bmatrix}^{(i)} + hf \left(t_i, \begin{bmatrix} S \\ I \\ R \end{bmatrix}^{(i)} \right) \quad (3.4)$$

ou seja,

$$\begin{bmatrix} S \\ I \\ R \end{bmatrix}^{(i+1)} = \begin{bmatrix} S \\ I \\ R \end{bmatrix}^{(i)} + h \left(\begin{bmatrix} -\beta SI \\ \beta SI - \gamma I \\ \gamma I \end{bmatrix}^{(i)} \right), \quad (3.5)$$

os t_i são determinados pela (1.2), h em (1.3) e $0 \leq i < n$ como já se referiu.

3.1.3 Simulação numérica

No que segue, apresenta-se a simulação numérica do modelo *SIR* obtida pelo método de Euler em duas situações, diferenciadas uma de outra apenas pelo parâmetro (γ) que as caracterizam por caso de surto epidémico ($R_0 > 1$) e caso de surto extinto ($R_0 < 1$) respectivamente.

Os casos aqui apresentados decorrem da interpretação a uma situação citada por, [1], que por nós reformulada e adotadas em duas situações concretas do quotidiano, como segue.

Problema 1. *Suponhamos que um determinado número de indivíduos, cerca de 0.01 por cento destes sofre com uma doença infecciosa ($I(t_0) = 0.01$), e 0.99 por cento estão sujeitos ao contágio ($S(t_0) = 0.99$) (conforme contactos que vão tendo uns com os outros), sendo que o número de indivíduos recuperados no instante inicial da infecção é nula ($R(t_0) = 0$). Vamos ainda considerar um coeficiente de transmissão $\beta = 1.5$ e, as constantes de recuperação $\gamma = 0.001$ e $\gamma = 1$ respectivamente. O tempo de observação é de 25 dias.*

As figuras (3.1) e (3.2), representam a dinâmica da infecção no seio da população indicada no problema (1), pelo método de Euler, como se referiu. Com tamanho de passo $h = 0.25$. Na figura (3.1), considera-se $\gamma = 0.001$. Nota-se que a propagação ocorre rapidamente e atinge o seu máximo de infecção em aproximadamente 7 dias, pelo que, todos os indivíduos do grupo foram infectados. Pois, o processo de recuperação é muito lento que no final dos 25 dias de observação apenas cerca de 0.02 por cento dos infectados se recupera.

Na figura (3.2), com $\gamma = 1$, observa-se que em aproximadamente 6 dias a propagação da doença atinge o seu máximo de infecção. Após este período há um decréscimo da

infecção, pois, no fim dos 25 dias o surto aparenta ter desaparecido mas, a maioria dos indivíduos em (0.60) por cento termina tendo a doença pelo que, foi recuperado, restando ainda um percentual de 0.39 da população em estado susceptível.

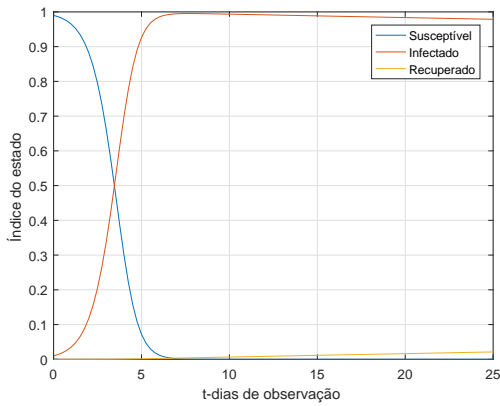


Figura 3.1: Caso de surto epidêmico, $R_0 > 1$ pelo método de Euler

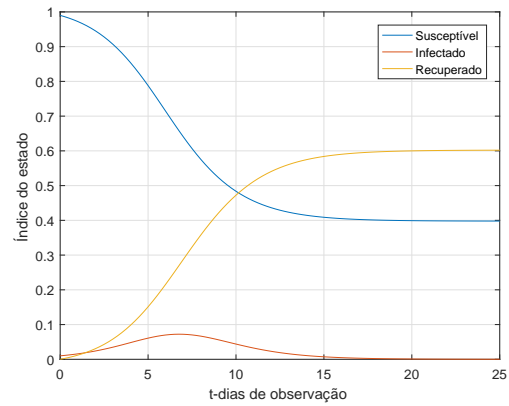


Figura 3.2: Caso de surto extinto, $R_0 < 1$ pelo método de Euler

Um caso particular a estas situações endêmica poderá ser considerado $\gamma = 0$, ver (3.3). Com isso, o sistema (2.4) é formado por apenas duas equações excluindo a hipótese de recuperação dos indivíduos infectados o que não faz sentido para aplicação deste modelo.

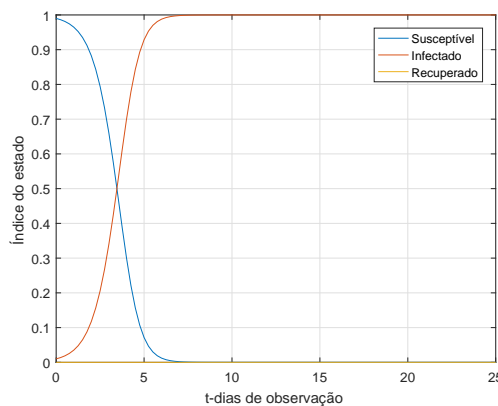


Figura 3.3: Surto epidêmico, $\gamma = 0$ pelo método de Euler

Vamos agora, tomar aproximações com este método para valores de h iguais a 0.1; 0.025 e 0.005, e analisar a precisão dos resultados com ele obtidos.

As tabelas (3.1) e (3.2), mostram um resumo dos dados obtidos para cada valor de h acima referenciado, satisfazendo as condições do problema (1).

Conforme o problema em análise, a tabela (3.1), reiteram o caso em que a taxa de recuperação dos indivíduos infectados pela doença é quase nula, ou seja, $\gamma = 0.001$. Evidentemente, nessa situação a infecção chega a atingir grande maioria da população ou se não mesmo todos os indivíduos do grupo.

A aplicação deste método mostra que a precisão por ele obtida com h grande não é razoável. No caso em que $\gamma = 0.001$, os resultados mostram que a infecção se propaga rapidamente

| h=0.1 | | | | | |
|---------|--------|-------------|-------------|-------------|----------------------------|
| i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $S(t_i) + I(t_i) + R(t_i)$ |
| 36 | 3.5 | 0.397590606 | 0.601816675 | 0.000592718 | 0.999999999 |
| 78 | 7.7 | 0.000795634 | 0.994765086 | 0.004439279 | 0.999999999 |
| 114 | 11.3 | 0.000002384 | 0.991981114 | 0.008016503 | 1.000000001 |
| 251 | 25.0 | 0.000000000 | 0.978485324 | 0.021514676 | 1.000000000 |
| h=0.025 | | | | | |
| i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $S(t_i) + I(t_i) + R(t_i)$ |
| 141 | 3.5 | 0.355969232 | 0.643353682 | 0.000677086 | 1.000000000 |
| 309 | 7.7 | 0.000929547 | 0.994498165 | 0.004572288 | 1.000000000 |
| 453 | 11.3 | 0.000003925 | 0.991847263 | 0.008148811 | 0.999999999 |
| 1001 | 25.0 | 0.000000000 | 0.978355319 | 0.021644681 | 1.000000000 |
| h=0.005 | | | | | |
| i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $S(t_i) + I(t_i) + R(t_i)$ |
| 701 | 3.5 | 0.345277294 | 0.654021487 | 0.000701219 | 1.000000000 |
| 1541 | 7.7 | 0.000963947 | 0.994427939 | 0.004608113 | 0.999999999 |
| 2261 | 11.3 | 0.000004421 | 0.991811130 | 0.008184449 | 1.000000000 |
| 5001 | 25.000 | 0.000000000 | 0.978320301 | 0.021679699 | 1.000000000 |

Tabela 3.1: Caso de propagação epidémica com $R_0 > 1$, pelo método de Euler

pelo que, atingiu o seu pico em tão pouco tempo. Porém, quando tornamos o h suficientemente pequeno os resultados por ele obtido são melhores, mais isto, torna o processo lento o que produz um aumento do esforço computacional.

A tabela (3.2), trata de apresentar o resumo da simulação numérica do problema em análise considerando agora ($\gamma = 1$).

| h=0.1 | | | | | |
|---------|--------|-------------|-------------|-------------|----------------------------|
| i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $S(t_i) + I(t_i) + R(t_i)$ |
| 36 | 3.5 | 0.877221179 | 0.042310240 | 0.080468582 | 1.000000001 |
| 78 | 7.7 | 0.591645182 | 0.066570580 | 0.341784237 | 0.999999999 |
| 114 | 11.3 | 0.454804773 | 0.028726112 | 0.516469114 | 0.999999999 |
| 251 | 25.0 | 0.403212567 | 0.000140452 | 0.596646981 | 1.000000000 |
| h=0.025 | | | | | |
| i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $S(t_i) + I(t_i) + R(t_i)$ |
| 141 | 3.5 | 0.874700365 | 0.042793095 | 0.082506540 | 1.000000000 |
| 309 | 7.7 | 0.590828467 | 0.065405080 | 0.343766453 | 1.000000000 |
| 453 | 11.3 | 0.457595735 | 0.028437491 | 0.513966774 | 1.000000000 |
| 1001 | 25.0 | 0.405779692 | 0.000158737 | 0.594061571 | 1.000000000 |
| h=0.005 | | | | | |
| i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $S(t_i) + I(t_i) + R(t_i)$ |
| 701 | 3.5 | 0.874018367 | 0.042921207 | 0.083060425 | 0.999999999 |
| 1541 | 7.7 | 0.590639073 | 0.065098276 | 0.344262651 | 1.000000000 |
| 2261 | 11.3 | 0.458334336 | 0.028363621 | 0.513302044 | 1.000000001 |
| 5001 | 25.000 | 0.406455328 | 0.000163819 | 0.593380853 | 1.000000000 |

Tabela 3.2: Caso de surto endémico com $R_0 < 1$, pelo método de Euler

Conforme a tabela (3.2), a propagação ocorre, mas não chega a atingir picos alarmantes, dado que alguns elementos do grupo afectados pela doença se vão recuperando.

Tal como na tabela (3.1), na tabela (3.2), é também notável que os resultados não são razoáveis para valores de h grande. Todavia, mostra que o nível de propagação da infecção ocorre com menos intensidade para valores de h suficientemente pequeno, deste modo mostra ainda que o grau de recuperação dos indivíduos infectados pela doença é também razoável tendo em conta o valor de γ .

3.2 Aproximação pelo Método de Runge-Kutta

A precisão para o PVI obtido pelo método de Euler é melhorado por Karl Heun (1859-1929). Este, baseando-se nas experiências de Euler desenvolveu um novo método com objectivo de produzir melhores resultados. Assim, o método por Heun apresentado é também conhecido por método de Euler aperfeiçoado.

Anos depois, Martin Wilhelm Kutta (1867-1944) apresentou uma nova abordagem do método de Heun. Este, só ficou concluído cinco anos mais tarde por Carl Runge (1856-1927) que desenvolveu o modelo que ficou conhecido por generalização das regras de integração, ou simplesmente, método numérico de Runge-Kutta de n -ésima ordem, ver [5].

3.2.1 Discretização do método de Runge-Kutta

A família de métodos de Runge-Kutta, podem ser deduzidos a partir da série de Taylor sem a necessidade de se calcular as derivadas da função envolvida no problema. Porém, foram concebidos com objectivos de produzirem resultados com a mesma precisão que os da série de Taylor.

Vamos aqui deduzir o método de segunda ordem que será utilizado no decurso deste trabalho sendo que, as restantes ordens podem ser vistas em [4] e [10].

Seja,

$$\psi_{i+1} = \psi_i + h\phi(t_i, \psi(t_i)), \quad (3.6)$$

a função recursiva do problema de valor inicial em (1.1), para o método de RK, vamos supor que,

$$\phi(t_i, \psi(t_i)) = a_1k_1 + a_2k_2, \quad (3.7)$$

onde,

$$\begin{cases} k_1 = f(t_i, \psi_i) \\ k_2 = f(t_i + h, \psi_i + hk_1). \end{cases} \quad (3.8)$$

A constante k_1 representa o valor da função no instante (t_i, y_i) e k_2 é a aproximação obtida pelo método de Euler. Assim sendo, é razoável escrever a expressão (3.7), na forma,

$$\phi(t_i, \psi(t_i)) = [a_1f(t_i, \psi_i) + a_2f(t_i + h, \psi_i + hk_1)]. \quad (3.9)$$

A ideia é escrever a equação (3.9), como uma função em série de Taylor onde temos de determinar as respectivas derivadas em ordem aos argumentos de f quando t avança no tempo.

Relembrando a série de Taylor truncada na segunda ordem,

$$\psi(t_{i+1}) = \psi(t_i) + h [\psi'(t_i) + \frac{h}{2}\psi''(t_i)] + \frac{h^3}{3!}\psi'''(\xi_i). \quad (3.10)$$

Para algum, $t_i < \xi_i < t_{i+1}$. Para h pequeno, a expressão $\frac{h^3}{3!}\psi'''(\xi_i)$ tende para zero. Então,

$$\psi(t_{i+1}) = \psi(t_i) + h [\psi'(t_i) + \frac{h}{2}\psi''(t_i)]. \quad (3.11)$$

Pela expressão (1.1), obtém-se,

$$\begin{cases} \psi'(t_i) = f(t_i, \psi_i) \\ \psi''(t_i) = f'(t_i, \psi_i) \end{cases}, \quad (3.12)$$

donde,

$$f'(t_i, \psi_i) = f_t(t_i, \psi_i) + f_\psi(t_i, \psi_i)f(t_i, \psi_i).$$

Então, define-se o método de Taylor de segunda ordem pela fórmula,

$$\psi_{i+1} = \psi_i + h \left\{ f(t_i, \psi_i) + \frac{h}{2} [f_t(t_i, \psi_i) + f_\psi(t_i, \psi_i)f(t_i, \psi_i)] \right\}. \quad (3.13)$$

Para chegar à fórmula desejada (*RK*), é necessário que as equações (3.9) e (3.11), satisfaçam a igualdade seguinte,

$$h(a_1k_1 + a_2k_2) = h [\psi'(t_i) + \frac{h}{2}\psi''(t_i)]. \quad (3.14)$$

Análogo a expressão (3.12),

$$\begin{cases} k_1 = \psi'(t_i) = f(t_i, \psi_i) \\ k_2 = \psi''(t_i) = f'(t_i + hb, \psi_i + hck_1) \end{cases}. \quad (3.15)$$

A expressão (3.15), deve satisfazer a equação (3.9). Para tal, pensa-se em ϕ como uma função em série de Taylor. Suponha que ϕ é uma função de classe C^2 em relação a h . Donde,

$$\phi(t_i, \psi_i, h) = \phi(t_i, \psi_i, 0) + h\phi'(t_i, \psi_i, 0) + \frac{h^2}{2}\phi''(t_i, \psi_i, \xi_i), \quad \xi_i \in [0, h] \quad (3.16)$$

onde,

$$\begin{cases} \phi(t_i, \psi_i, h) = a_1f(t_i, \psi_i) + a_2f(t_i + h, \psi_i + hk_i) \\ \phi'(t_i, \psi_i, h) = [a_1f(t_i, \psi_i) + a_2f(t_i + bh, \psi_i + chk_i)]' \end{cases}. \quad (3.17)$$

Vamos ainda considerar que $h = 0$, o que permite-nos reescrever o sistema em (3.17), na forma,

$$\begin{cases} \phi(t_i, \psi_i, 0) = (a_1 + a_2) f(t_i, \psi_i) \\ \phi'(t_i, \psi_i, 0) = a_2bf_t(t_i, \psi_i) + a_2cf_\psi(t_i, \psi_i)f(t_i, \psi_i) \end{cases}. \quad (3.18)$$

Substituindo a expressão (3.18) em (3.16), obtém-se,

$$\phi(t_i, \psi_i) = (a_1 + a_2) f(t_i, \psi_i) + h [a_2 b f_t(t_i, \psi_i) + a_2 c f_\psi(t_i, \psi_i) f(t_i, \psi_i)]. \quad (3.19)$$

Agora, substituindo a expressão (3.19) em (3.6), obtém-se,

$$\psi_{i+1} = \psi_i + h \{(a_1 + a_2) f(t_i, \psi_i) + h [a_2 b f_t(t_i, \psi_i) + a_2 c f_\psi(t_i, \psi_i) f(t_i, \psi_i)]\}. \quad (3.20)$$

Portanto, pelas equações (3.13) e (3.20), forma-se o sistema de equações linearmente dependentes desenvolvidas da série de Taylor,

$$\begin{cases} \psi_{i+1} = \psi_i + h \left\{ f(t_i, \psi_i) + \frac{h}{2} [f_t(t_i, \psi_i) + f_\psi(t_i, \psi_i) f(t_i, \psi_i)] \right\} \\ \psi_{i+1} = \psi_i + h \left\{ (a_1 + a_2) f(t_i, \psi_i) + h [a_2 b f_t(t_i, \psi_i) + a_2 c f_\psi(t_i, \psi_i) f(t_i, \psi_i)] \right\}. \end{cases} \quad (3.21)$$

Do sistema de equações em (3.21), obtém-se um sistema de equações não linear nas incógnitas a_1, a_2, b e c dado por,

$$\begin{cases} (a_1 + a_2) = 1 \\ a_2 b = \frac{1}{2} \\ a_2 c = \frac{1}{2} \end{cases}. \quad (3.22)$$

Para $b = c = 1, a_1 = a_2 = \frac{1}{2}$. Resultante em,

$$\psi_{i+1} = \psi_i + \frac{h}{2} [k_1 + k_2]. \quad (3.23)$$

A equação (3.23), assim definida é a fórmula de Heun na qual os k_1 e k_2 são determinados pela expressão (3.8). Outras formas deste método podem ser tidas para diferentes valores de a_1, a_2, b e c , basta resolver o sistema de equações (3.22).

3.2.2 Discretização do modelo SIR pelo método de Runge-Kutta

Tal como na aplicação do método de Euler, vamos obter uma aproximação para a solução do *PVI* dado pelas expressões (2.4) e (2.5) respectivamente, utilizando o método de *RK*. Aplicando os procedimentos descritos na secção (3.2) para obter a expressão (3.23), vamos igualmente escrever o sistema (2.4) e (2.5) como um sistema recursivo do modelo *SIR* discretizado.

$$\begin{bmatrix} S \\ I \\ R \end{bmatrix}^{(i+1)} \approx \begin{bmatrix} S \\ I \\ R \end{bmatrix}^{(i)} + \frac{h}{2} \left\{ f \left(t_i, \begin{bmatrix} S \\ I \\ R \end{bmatrix}^{(i)} \right) + f \left(t_i + h, \begin{bmatrix} S \\ I \\ R \end{bmatrix}^{(i)} + h k_i \right) \right\}, \quad (3.24)$$

ou seja,

$$\begin{bmatrix} S \\ I \\ R \end{bmatrix}^{(i+1)} \approx \begin{bmatrix} S \\ I \\ R \end{bmatrix}^{(i)} + \frac{h}{2} \left\{ \begin{bmatrix} -\beta SI \\ \beta SI - \gamma I \\ \gamma I \end{bmatrix}^{(i)} + \left(\begin{bmatrix} S \\ I \\ R \end{bmatrix}^{(i)} + h \begin{bmatrix} -\beta SI \\ \beta SI - \gamma I \\ \gamma I \end{bmatrix}^{(i)} \right) \right\} \quad (3.25)$$

os t_i são calculado em (1.2) e h em (1.3), para $0 \leq i < n$.

3.2.3 Simulação numérica

À semelhança ao que se fez com o método de Euler vamos igualmente apresentar a simulação numérica do problema (1), pelo método de RK com tamanho de passo $h = 0.25$, tal como ilustram as figuras (3.4) e (3.5).

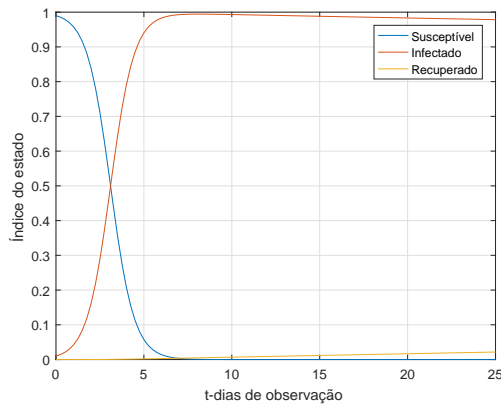


Figura 3.4: Caso de surto epidémico, $R_0 > 1$ pelo método de RK

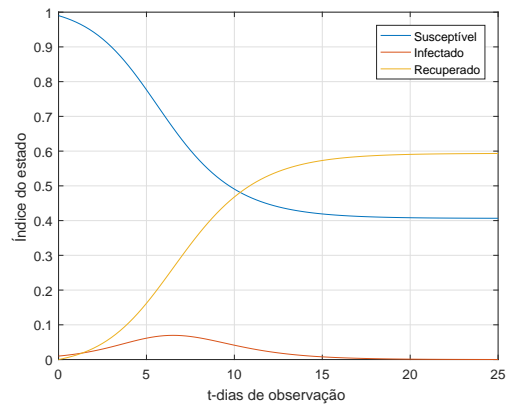


Figura 3.5: Caso de surto extinto, $R_0 < 1$ pelo método de RK

Com este método a precisão dos resultados obtidos pela sua utilização são relativamente melhores se os compararmos com os obtidos anteriormente pelo método de Euler. Pois, no caso em que $\gamma = 1$, mostra que o número de indivíduos susceptíveis diminui mais lentamente.

Vamos igualmente considerar para h , valores muito pequenos, conforme (3.3) e (3.4).

| h=0.1 | | | | | |
|---------|--------|-------------|-------------|-------------|----------------------------|
| i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $S(t_i) + I(t_i) + R(t_i)$ |
| 36 | 3.5 | 0.345186920 | 0.654110188 | 0.000702892 | 1.000000000 |
| 78 | 7.7 | 0.001005087 | 0.994384888 | 0.004610024 | 0.999999999 |
| 114 | 11.3 | 0.000004809 | 0.991808873 | 0.008186317 | 0.999999999 |
| 251 | 25.0 | 0.000000000 | 0.978318492 | 0.021681508 | 1.000000000 |
| h=0.025 | | | | | |
| i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $S(t_i) + I(t_i) + R(t_i)$ |
| 141 | 3.5 | 0.342805960 | 0.656486983 | 0.000707058 | 1.000000001 |
| 309 | 7.7 | 0.000974406 | 0.994408973 | 0.004616621 | 1.000000000 |
| 453 | 11.3 | 0.000004566 | 0.991802523 | 0.008192911 | 1.000000000 |
| 1001 | 25.0 | 0.000000000 | 0.978311988 | 0.021688012 | 1.000000000 |
| h=0.005 | | | | | |
| i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $S(t_i) + I(t_i) + R(t_i)$ |
| 701 | 3.5 | 0.342642731 | 0.656649923 | 0.000707346 | 1.000000000 |
| 1541 | 7.7 | 0.000972528 | 0.994410397 | 0.004617075 | 1.000000000 |
| 2261 | 11.3 | 0.000004552 | 0.991802084 | 0.008193364 | 1.000000000 |
| 5001 | 25.000 | 0.000000000 | 0.978311541 | 0.021688459 | 1.000000000 |

Tabela 3.3: Caso de propagação epidémica com $R_0 > 1$. pelo método de RK

| h=0.1 | | | | | |
|---------|--------|-------------|-------------|-------------|----------------------------|
| i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $S(t_i) + I(t_i) + R(t_i)$ |
| 36 | 3.500 | 0.873888344 | 0.042943231 | 0.083168426 | 1.000000001 |
| 78 | 7.700 | 0.590615564 | 0.065020546 | 0.344363890 | 1.000000000 |
| 114 | 11.300 | 0.458535143 | 0.028347150 | 0.513117707 | 1.000000000 |
| 251 | 25.000 | 0.406633063 | 0.000165355 | 0.593201582 | 1.000000000 |
| h=0.025 | | | | | |
| i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $S(t_i) + I(t_i) + R(t_i)$ |
| 141 | 3.5 | 0.873849865 | 0.042952545 | 0.083197590 | 1.000000000 |
| 309 | 7.7 | 0.590594987 | 0.065021775 | 0.344383238 | 1.000000000 |
| 453 | 11.3 | 0.458519685 | 0.028345472 | 0.513134842 | 0.999999999 |
| 1001 | 25.0 | 0.406624259 | 0.000165119 | 0.593210622 | 1.000000000 |
| h=0.005 | | | | | |
| i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $S(t_i) + I(t_i) + R(t_i)$ |
| 701 | 3.5 | 0.873847347 | 0.042953157 | 0.083199496 | 1.000000000 |
| 1541 | 7.7 | 0.590593601 | 0.065021849 | 0.344384550 | 1.000000000 |
| 2261 | 11.3 | 0.458518656 | 0.028345354 | 0.513135990 | 1.000000000 |
| 5001 | 25.0 | 0.406623683 | 0.000165104 | 0.593211214 | 1.000000001 |

Tabela 3.4: Caso de propagação endêmica com $R_0 < 1$ pelo método de RK

3.3 Aproximação pelo Método de passo múltiplo

Em 1883, John Couch Adams (1819-1892), astrónomo britânico colocou o seu nome na história da matemática ao apresentar um modelo que resolve a equação (integração numérica) do Britânico Francis Bashforth (1819-1912) com formação em Matemática aplicada à área de balística. O método ficou conhecido por método de Adams-Bashforth, cuja precisão razoável foi corrigida em 1925 pelo matemático Americano Forest Ray Moulton que denominou o método por ele apresentado de Adams-Moulton.

Como se referiu no início, a ideia destes métodos é de trabalharem com mais de um ponto dentro do intervalo o que pressupõe aproximar a função do problema por um polinómio interpolador. Os métodos distinguem-se um do outro pelos intervalos que definem o polinómio interpolador, como demonstrados em [11].

O par de equações formado por esses dois métodos é designado por processo Predictor-Corrector, pois, o método de Adams-Bashforth também designado por explícito, prediz um valor que é corrigido pelo método de Adams-Moulton ou implícito, ver [11] [9].

No que segue, vamos apresentar a dedução dos métodos explícito e implícito de segunda ordem que serão usados mais adiante. As restantes ordens podem ser vistas nas referências acima mencionadas e em outras sobre métodos numéricos descrita ao longo do trabalho.

3.3.1 Discretização do método de passo múltiplo

Seja $f(t, \psi(t))$ uma função continuamente diferenciável no intervalo $[t_i, t_{i+1}]$, então, aplicando o teorema fundamental de cálculo à equação (1.1), obtém-se,

$$\psi(t_{i+1}) - \psi(t_i) = \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, \psi(t)) dt. \quad (3.26)$$

O valor da função integral no membro direito em (3.26) é obtido por uma fórmula de quadratura numérica onde polinómio interpolador $P_m(t)$ é de grau m pelo que,

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, \psi(t)) dt = \int_{t_i}^{t_{i+1}} P_m(t) dt = h \sum_{j=0}^m \gamma_j f_{i-j}. \quad (3.27)$$

Por transitividade, da (3.27) e (3.26), pode-se escrever a função recursiva para o método de passo múltiplo como,

$$\psi_{i+1} = \psi_i + h \left(\sum_{j=0}^m \gamma_j f_{i-j} \right). \quad (3.28)$$

A equação (3.28) designa-se por fórmula generalizada para o método passo múltiplo onde $f_{i-j} = f(t_{i-j}, \psi_{i-j})$ (funções de interpolação), e γ_i constantes a determinar pela expressão,

$$\gamma_j = \frac{1}{h} \int_{t_i}^{t_{i+1}} L_{i-j}(t) dt, \quad (3.29)$$

com $L_{i-j}(t)$ polinómio de Lagrange, onde,

$$\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^m \frac{t - t_i}{t_{i-j} - t_i}. \quad (3.30)$$

Portanto, reescrevendo a equação (3.29),

$$\gamma_j = \frac{1}{h} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \left(\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^m \frac{t - t_i}{t_{i-j} - t_i} \right) dt. \quad (3.31)$$

3.3.2 Discretização do método explícito

A aproximação pelo método explícito obtém-se quando interpolamos a função do problema dado nos distintos nós da malha, desde t_i, \dots, t_{i-m} com $j \leq i = 0, 1, \dots, m$, onde temos de calcular o valor da $f(t_i, \psi_i); f(t_{i-1}, \psi_{i-1}), \dots, f(t_{i-m}, \psi_{i-m})$ por um método de passo simples, ver [11].

Neste trabalho utilizar-se-á o método de Runge-Kutta de segunda ordem para determinar o valor das f necessárias para o método de passo múltiplo da mesma ordem pelo que, passamos a demonstrar.

Seja $P_1(t)$ um polinómio de Lagrange de grau 1, então tendo em conta (3.28) a fórmula recursiva do método de passo múltiplo explícito de segunda ordem é,

$$\psi_{i+1} = \psi_i + h [\gamma_1 f(t_i, \psi_i) + \gamma_0 f(t_{i-1}, \psi_{i-1})], \quad (3.32)$$

onde as funções de interpolação do intervalo $[t_i, t_{i+1}]$ são $f(t_i, \psi_i), f(t_{i-1}, \psi_{i-1})$ e as constantes γ_0 e γ_1 dadas por,

$$\gamma_0 = \frac{1}{h} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{t - t_i}{t_{i-1} - t_i} dt, \quad (3.33)$$

$$\gamma_1 = \frac{1}{h} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{t - t_{i-1}}{t_i - t_{i-1}} dt. \quad (3.34)$$

Calculando os integrais, no denominador da função integral em (3.33) e (3.34), sabe-se que,

$$\begin{cases} t_{i-1} - t_i &= -h \\ t_i - t_{i-1} &= h \end{cases}, \quad (3.35)$$

donde

$$\gamma_0 = - \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{t - t_i}{h^2} dt, \quad (3.36)$$

$$\gamma_1 = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{t - t_{i-1}}{h^2} dt. \quad (3.37)$$

Por hipótese, mantendo t_i fixo é possível fazer uma mudança de variável na função integral. Pois,

$$\begin{cases} t - t_i &= -hs \\ t - t_{i-1} &= h(s + 1) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} dt &= -hds \\ dt &= hds \end{cases}. \quad (3.38)$$

Portanto, substituindo a expressão da (3.38) nas equações (3.36) e (3.37), conclui-se que,

$$\begin{aligned} \gamma_0 &= - \int_0^1 s ds = -\frac{1}{2} \\ \gamma_1 &= \int_0^1 (s + 1) ds = \frac{3}{2}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Logo,

$$\psi_{i+1} = \psi_i + \frac{h}{2} [3f(t_i, \psi_i) - f(t_{i-1}, \psi_{i-1})]. \quad (3.40)$$

A equação (3.40) é designada método de passo múltiplo explícito de segunda ordem obtido pelo polinómio interpolador de grau 1.

3.3.3 Discretização do método implícito

A ideia do método implícito dessa classe de passo múltiplo é de estender o polinómio interpolador desde t_{i-m} até t_{i+1} , onde temos de determinar os valores da função $f(t_{i-m}, \psi_{i-m})$, $f(t_{i-m+1}, \psi_{i-m+1}), \dots, f(t_i, \psi_i), f(t_{i+1}, \psi_{i+1})$.

Análogo ao método explícito, vamos deduzir a fórmula para o método implícito de segunda ordem. Tendo em conta a expressão (3.28), para P_1 polinómio interpolador de grau 1, tem-se

$$\psi_{i+1} = \psi_i + h [\gamma_1 f(t_{i+1}, \psi_{i+1}) + \gamma_0 f(t_i, \psi_i)]. \quad (3.41)$$

Os valores da f ao longo dos nós t_i até t_{i+1} são dados por $f(t_i, \psi_i)$ e $f(t_{i+1}, \psi_{i+1})$ e as constantes γ_0, γ_1 por,

$$\begin{aligned} \gamma_0 &= \frac{1}{h} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{t - t_i}{t_{i+1} - t_i} dt = \frac{1}{2}, \\ \gamma_1 &= \frac{1}{h} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{t - t_{i+1}}{t_i - t_{i+1}} dt = \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Porém, a (3.41) é tida como,

$$\psi_{i+1} = \psi_i + \frac{h}{2} [f(t_{i+1}, \psi_{i+1}) + f(t_i, \psi_i)]. \quad (3.43)$$

3.3.4 Descrição do método Predictor-Corrector

Como já se referiu no início, ao utilizar o par de equações formado pelos métodos explícito e implícito designamos o processo por Predictor-Corrector onde o método explícito prediz um valor que por sua vez é corrigido pelo método implícito.

3.3.4.1 Algoritmo do método Predictor-Corrector

1. Calculam-se as estimativas iniciais com um método de passo simples de mesma ordem ao método de passo múltiplo (no caso Runge-Kutta), cujo valores ψ_{i+1} , servem para determinar os valores da $f(t_i, \psi_i)$, $i = 0, 1, \dots$, a serem utilizados no método de passo múltiplo explícito;
2. Com $f(t_i, \psi_i)$ conhecida no passo anterior, determina-se a precisão com o método explícito, cujo valor $\psi_{i+1}^{(0)}$ é dado por predictor;
3. Conhecendo $\psi_{i+1}^{(0)}$, calcula-se a $f(t_{i+1}, \psi_{i+1}^{(0)})$ com a qual, corrige-se a precisão obtida pelo método explícito utilizando o método implícito dado por, $\psi_{i+1}^{(1)}$;
4. Repetindo este processo permite-nos escrever a expressão generalizada do método Predictor-Corrector de segunda ordem,

$$\begin{cases} \psi_{i+1}^{(k)} &= \psi_i + \frac{h}{2} [3f(t_i, \psi_i) - f(t_{i-1}, \psi_{i-1})] \\ \psi_{i+1}^{(k+1)} &= \psi_i + \frac{h}{2} [f(t_{i+1}, \psi_{i+1}^{(k)}) + f(t_i, \psi_i)], \quad k = 0, 1, \dots \end{cases} \quad (3.44)$$

Vamos utilizar esse algoritmo à equação (2.4) para descrever o sistema discretizado do modelo *SIR* para o processo Predictor-Corrector.

3.4 Aplicação do método Preditor-Corrector ao modelo SIR

Pelo algoritmo (3.3.4.1) e da (2.4), obtém-se assim um sistema recursivo do modelo SIR para o processo Preditor-Corrector dado por,

$$\left\{ \begin{array}{l} \begin{array}{l} \left[\begin{array}{c} S \\ I \\ R \end{array} \right]_{(i+1)}^{(0)} \\ \\ \left[\begin{array}{c} S \\ I \\ R \end{array} \right]_{(i+1)}^{(1)} \end{array} = \begin{array}{l} \left[\begin{array}{c} S \\ I \\ R \end{array} \right]_{(i)} + \frac{h}{2} \left\{ 3f_i \left(t, \left[\begin{array}{c} S \\ I \\ R \end{array} \right] \right) - f_{i-1} \left(t, \left[\begin{array}{c} S \\ I \\ R \end{array} \right] \right) \right\} \\ \\ \left[\begin{array}{c} S \\ I \\ R \end{array} \right]_{(i)} + \frac{h}{2} \left\{ f \left(t_{i+1}, \left[\begin{array}{c} S \\ I \\ R \end{array} \right]_{i+1}^{(0)} \right) + f \left(t_i, \left[\begin{array}{c} S \\ I \\ R \end{array} \right]_i \right) \right\} \end{array} \right. \quad (3.45)$$

onde os valores da f são determinados tendo em conta (3.25), como foi dito.

3.4.1 Simulação numérica

Conforme o problema (1), as figuras (3.6) e (3.7), mostram os resultados numéricos obtidos pelo método PC com $h = 0.25$.

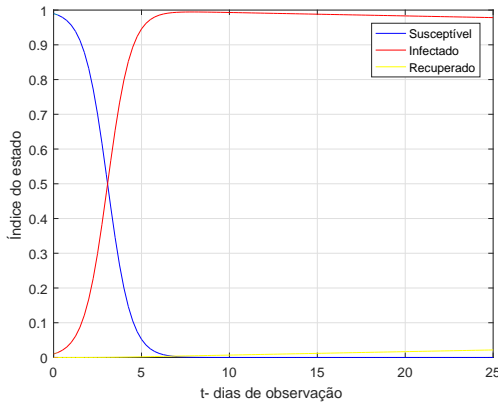


Figura 3.6: Caso de surto epidémico $R_0 > 1$ pelo método de PC

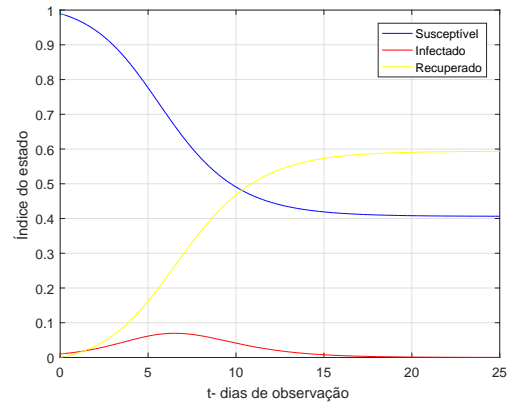


Figura 3.7: Caso de surto extinto $R_0 < 1$ pelo método de PC

Análogo ao que vimos nos dois métodos anteriores vamos também tornar h mais pequeno, para com esse método ver o que acontece com os resultados, ver as tabelas (3.5) e (3.6).

| h=0.1 | | | | | |
|---------|-------|-------------|-------------|-------------|----------------------------|
| n | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $S(t_i) + I(t_i) + R(t_i)$ |
| 36 | 3.5 | 0.342941167 | 0.656352002 | 0.000706831 | 1.000000000 |
| 78 | 7.7 | 0.000971538 | 0.994412182 | 0.004616280 | 1.000000000 |
| 114 | 11.3 | 0.000004534 | 0.991802893 | 0.008192572 | 0.999999999 |
| 251 | 25.0 | 0.000000000 | 0.978312321 | 0.021687679 | 1.000000000 |
| h=0.025 | | | | | |
| n | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $S(t_i) + I(t_i) + R(t_i)$ |
| 141 | 3.5 | 0.342641045 | 0.656651607 | 0.000707349 | 1.000000001 |
| 309 | 7.7 | 0.000972442 | 0.994410479 | 0.004617080 | 1.000000001 |
| 453 | 11.3 | 0.000004551 | 0.991802080 | 0.008193369 | 1.000000000 |
| 1001 | 25.0 | 0.000000000 | 0.978311536 | 0.021688464 | 1.000000000 |
| h=0.005 | | | | | |
| n | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $S(t_i) + I(t_i) + R(t_i)$ |
| 701 | 3.5 | 0.342635844 | 0.656656798 | 0.000707358 | 1.000000000 |
| 1541 | 7.7 | 0.000972450 | 0.994410456 | 0.004617094 | 1.000000000 |
| 2261 | 11.3 | 0.000004551 | 0.991802066 | 0.008193383 | 1.000000000 |
| 5001 | 25.0 | 0.000000000 | 0.978311522 | 0.021688478 | 1.000000000 |

Tabela 3.5: Caso de propagação epidémica com $R_0 > 1$. pelo método PC

| h=0.1 | | | | | |
|---------|-------|-------------|-------------|-------------|----------------------------|
| i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $S(t_i) + I(t_i) + R(t_i)$ |
| 36 | 3.5 | 0.873849429 | 0.042952591 | 0.083197979 | 0.999999999 |
| 78 | 7.7 | 0.590595629 | 0.065021957 | 0.344382414 | 1.000000000 |
| 114 | 11.3 | 0.458519939 | 0.028345776 | 0.513134285 | 1.000000000 |
| 251 | 25.0 | 0.406623962 | 0.000165102 | 0.593210936 | 1.000000000 |
| h=0.025 | | | | | |
| i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $S(t_i) + I(t_i) + R(t_i)$ |
| 141 | 3.5 | 0.873847276 | 0.042953173 | 0.083199550 | 0.999999999 |
| 309 | 7.7 | 0.590593577 | 0.065021854 | 0.344384569 | 1.000000000 |
| 453 | 11.3 | 0.458518634 | 0.028345356 | 0.513136010 | 1.000000000 |
| 1001 | 25.0 | 0.406623663 | 0.000165103 | 0.593211234 | 1.000000000 |
| h=0.005 | | | | | |
| i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $S(t_i) + I(t_i) + R(t_i)$ |
| 701 | 3.5 | 0.873847241 | 0.042953183 | 0.083199576 | 1.000000000 |
| 1541 | 7.7 | 0.590593543 | 0.065021852 | 0.344384605 | 1.000000000 |
| 2261 | 11.3 | 0.458518613 | 0.028345349 | 0.513136038 | 1.000000000 |
| 5001 | 25.0 | 0.406623658 | 0.000165103 | 0.593211239 | 1.000000000 |

Tabela 3.6: Caso de propagação endémica com $R_0 < 1$. pelo método PC

3.5 Comparação dos Métodos

Nesta secção, é apresentada uma análise comparativa dos resultados obtidos pelos métodos numéricos aqui referenciados para determinados valores de h (0.1, 0.025 e 0.005), quanto t atinge determinados pontos na malha, como ilustra as tabelas (3.7) e (3.8). O critério utilizado para a comparação dos resultados entre os métodos é $S(t_i) + I(t_i) + R(t_i) = 1, \forall t \in [t_0, t_f]$.

A tabela (3.7), trata de ilustrar o caso de propagação epidémica para $\gamma = 0.001$ e a tabela

(3.8), o caso em que $\gamma = 1$.

| h=0.1 | | | | | | |
|---------|------|--------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| Métodos | i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $N(t_i)$ |
| Euler | 36 | 3.5 | 0.397590606 | 0.601816675 | 0.000592718 | 0.999999999 |
| | 114 | 11.3 | 0.000002384 | 0.991981114 | 0.008016503 | 1.000000001 |
| | 251 | 25.0 | 0.000000000 | 0.978485324 | 0.021514676 | 1.000000000 |
| | i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $N(t_i)$ |
| RK | 36 | 3.5 | 0.345186920 | 0.654110188 | 0.000702892 | 1.000000000 |
| | 114 | 11.3 | 0.000004809 | 0.991808873 | 0.008186317 | 0.999999999 |
| | 251 | 25.0 | 0.000000000 | 0.978318492 | 0.021681508 | 1.000000000 |
| | i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $N(t_i)$ |
| PC | 36 | 3.5 | 0.342941167 | 0.656352002 | 0.000706831 | 1.000000000 |
| | 114 | 11.3 | 0.000004534 | 0.991802893 | 0.008192572 | 0.999999999 |
| | 251 | 25.0 | 0.000000000 | 0.978312321 | 0.021687679 | 1.000000000 |
| h=0.025 | | | | | | |
| Métodos | i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $N(t_i)$ |
| Euler | 141 | 3.5 | 0.355969232 | 0.643353682 | 0.000677086 | 1.000000000 |
| | 453 | 11.3 | 0.000003925 | 0.991847263 | 0.008148811 | 0.999999999 |
| | 1001 | 25.0 | 0.000000000 | 0.978355319 | 0.021644681 | 1.000000000 |
| | n | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $N(t_i)$ |
| RK | 141 | 3.5 | 0.342805960 | 0.656486983 | 0.000707058 | 1.000000001 |
| | 453 | 11.3 | 0.000004566 | 0.991802523 | 0.008192911 | 1.000000000 |
| | 1001 | 25.0 | 0.000000000 | 0.978311988 | 0.021688012 | 1.000000000 |
| | i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $N(t_i)$ |
| PC | 141 | 3.5 | 0.342641045 | 0.656651607 | 0.000707349 | 1.000000001 |
| | 453 | 11.3 | 0.000004551 | 0.991802080 | 0.008193369 | 1.000000000 |
| | 1001 | 25.0 | 0.000000000 | 0.978311536 | 0.021688464 | 1.000000000 |
| h=0.005 | | | | | | |
| Métodos | i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $N(t_i)$ |
| Euler | 701 | 3.5 | 0.345277294 | 0.654021487 | 0.000701219 | 1.000000000 |
| | 2261 | 11.3 | 0.000004421 | 0.991811130 | 0.008184449 | 1.000000000 |
| | 5001 | 25.0 | 0.000000000 | 0.978320301 | 0.021679699 | 1.000000000 |
| | i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $N(t_i)$ |
| RK | 701 | 3.5 | 0.342642731 | 0.656649923 | 0.000707346 | 1.000000000 |
| | 2261 | 11.3 | 0.000004552 | 0.991802084 | 0.008193364 | 1.000000000 |
| | 5001 | 25.000 | 0.000000000 | 0.978311541 | 0.021688459 | 1.000000000 |
| | i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $N(t_i)$ |
| PC | 701 | 3.5 | 0.342635844 | 0.656656798 | 0.000707358 | 1.000000000 |
| | 2261 | 11.3 | 0.000004551 | 0.991802066 | 0.008193383 | 1.000000000 |
| | 5001 | 25.0 | 0.000000000 | 0.978311522 | 0.021688478 | 1.000000000 |

Tabela 3.7: Comparação dos métodos caso em que $R_0 > 1$

Conforme a tabela (3.7), e na ordem em que aparecem os métodos, a precisão por estes obtida mostra-se pouco razoável na medida em que h for de tamanho maior. O método de Euler perde para com o *RK* e este por sua vez perde para com o *PC*. Porém, na medida em que tornamos h muito pequeno, os resultados por Euler obtidos tendem a assemelhar-se com os resultados obtidos por outros dois métodos.

Apesar de se verificar também algumas limitações com os métodos *RK* e *PC*, em grande

parte ambos apresentam resultados melhores que o de Euler e em muitos casos concordam com os resultados um do outro, verificando-se apenas variações mínimas.

| h=0.1 | | | | | | |
|---------|------|--------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| Métodos | i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $N(t_i)$ |
| Euler | 36 | 3.5 | 0.877221179 | 0.042310240 | 0.080468582 | 1.000000001 |
| | 114 | 11.3 | 0.454804773 | 0.028726112 | 0.516469114 | 0.999999999 |
| | 251 | 25.0 | 0.403212567 | 0.000140452 | 0.596646981 | 1.000000000 |
| | i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $N(t_i)$ |
| RK | 36 | 3.500 | 0.873888344 | 0.042943231 | 0.083168426 | 1.000000001 |
| | 114 | 11.300 | 0.458535143 | 0.028347150 | 0.513117707 | 1.000000000 |
| | 251 | 25.000 | 0.406633063 | 0.000165355 | 0.593201582 | 1.000000000 |
| | i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $N(t_i)$ |
| PC | 36 | 3.5 | 0.873849429 | 0.042952591 | 0.083197979 | 0.999999999 |
| | 114 | 11.3 | 0.458519939 | 0.028345776 | 0.513134285 | 1.000000000 |
| | 251 | 25.0 | 0.406623962 | 0.000165102 | 0.593210936 | 1.000000000 |
| h=0.025 | | | | | | |
| Métodos | i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $N(t_i)$ |
| Euler | 141 | 3.5 | 0.874700365 | 0.042793095 | 0.082506540 | 1.000000000 |
| | 453 | 11.3 | 0.457595735 | 0.028437491 | 0.513966774 | 1.000000000 |
| | 1001 | 25.0 | 0.405779692 | 0.000158737 | 0.594061571 | 1.000000000 |
| | i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $N(t_i)$ |
| RK | 141 | 3.5 | 0.873849865 | 0.042952545 | 0.083197590 | 1.000000000 |
| | 453 | 11.3 | 0.458519685 | 0.028345472 | 0.513134842 | 0.999999999 |
| | 1001 | 25.0 | 0.406624259 | 0.000165119 | 0.593210622 | 1.000000000 |
| | i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $N(t_i)$ |
| PC | 141 | 3.5 | 0.873847276 | 0.042953173 | 0.083199550 | 0.999999999 |
| | 453 | 11.3 | 0.458518634 | 0.028345356 | 0.513136010 | 1.000000000 |
| | 1001 | 25.0 | 0.406623663 | 0.000165103 | 0.593211234 | 1.000000000 |
| h=0.005 | | | | | | |
| Métodos | i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $N(t_i)$ |
| Euler | 701 | 3.5 | 0.874018367 | 0.042921207 | 0.083060425 | 0.999999999 |
| | 2261 | 11.3 | 0.458334336 | 0.028363621 | 0.513302044 | 1.000000001 |
| | 5001 | 25.000 | 0.406455328 | 0.000163819 | 0.593380853 | 1.000000000 |
| | i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $N(t_i)$ |
| RK | 701 | 3.5 | 0.873847347 | 0.042953157 | 0.083199496 | 1.000000000 |
| | 2261 | 11.3 | 0.458518656 | 0.028345354 | 0.513135990 | 1.000000000 |
| | 5001 | 25.0 | 0.406623683 | 0.000165104 | 0.593211214 | 1.000000001 |
| | i | t_i | $S(t_i)$ | $I(t_i)$ | $R(t_i)$ | $N(t_i)$ |
| PC | 701 | 3.5 | 0.873847241 | 0.042953183 | 0.083199576 | 1.000000000 |
| | 2261 | 11.3 | 0.458518613 | 0.028345349 | 0.513136038 | 1.000000000 |
| | 5001 | 25.0 | 0.406623658 | 0.000165103 | 0.593211239 | 1.000000000 |

Tabela 3.8: Comparação dos métodos caso em que $R_0 < 1$

Na tabela (3.8), é também notável as limitações e melhorias dos métodos quando se varia h .

Todavia, dados valores para (β) e (γ) , os métodos numéricos mostram que quanto maior for a propagação da infecção menor será o número restante de indivíduos susceptíveis no tempo final.

3.5.1 Principais vantagens dos métodos

Vamos aqui enumerar algumas das principais vantagens que se podem obter quando utilizamos os referidos métodos numéricos para aproximar o *PVI* a sua solução exata.

1. Vantagens do método de Euler

- É auto-iniciante, pois, o processo é iniciado utilizando apenas as restrições do problema (condições iniciais).
- Cada passo depende única e simplesmente do passo anterior.

2. Vantagens do método de Runge-Kutta

- É auto-iniciante, não depende do auxílio de outros métodos;
- A precisão pretendida para o problema obtém-se com um passo h relativamente maior comparando com o método de Euler.

3. Vantagens do método de Adams Preditor-Corrector

- O número de vezes que a função $f(t, S, I, R)$ é avaliada a cada iteração é pequeno. Determina-se uma vez na fórmula explícita e $n + 1$ na fórmula implícita.
- Não precisa de um número grande de iterações para se obter a precisão pretendida.

3.5.2 Principais Desvantagens dos métodos

Análogo a secção (3.5.1), enumera-se aqui algumas desvantagens quando utilizados os métodos numéricos aqui apresentados.

1. Desvantagens do método de Euler

- A precisão razoável dos resultados (tanto quanto se queira), obtém-se com grande número de iterações, o que pressupõe h consideravelmente menor.

2. Desvantagem do método de Runge-Kutta

- Com tamanho de passo h consideravelmente menor limita-se o erro de discretização, mas, causa um aumento do erro de arredondamento.

3. Desvantagens do método de Adams Preditor-Corrector

- Precisa de informações acrescida para começar o processo. No caso, a aproximação iniciada pelo método de Runge-Kutta;
- Necessita de várias etapas para obter a precisão requerida (estimativa inicial por um método de passo simples, determinação do valor preditor e por fim corrector).

Capítulo 4

Teoria do Controlo Ótimo

No presente capítulo, são apresentadas breves considerações sobre teoria de controlo ótimo, suas origens e contribuições dos diversos autores. É também apresentado o problema de controlo ótimo; fórmula de diferença regressiva com a qual se obtém os valores das funções do co-estado. São ainda apresentados alguns problemas de controlo ótimo com vacinação e tratamento, só com vacinação e só com tratamento. Todos estes problemas são resolvidos pelos métodos de Euler e Runge-Kutta para ilustrar o processo que otimiza os índices dos estados.

4.1 Breve introdução à teoria de controlo ótimo

A teoria de controlo ótimo tem um histórico longínquo intrinsecamente ligada ao cálculo de variações, ambas nascem no século XVII, desenvolvem-se nos séculos XVIII e XIX, tendo atingido o seu auge no século XX. Desde a sua criação é aplicada para solucionar problemas físicos, matemáticos, económicos e sociais.

A motivação surge em Junho de 1696, após Johann Bernoulli (1667-1748), propor à comunidade matemática o chamado problema de *Braquistócrona* (tal como é conhecido do grego brachystos-mínimo, chronos-tempo), o mesmo pretendia determinar o caminho que uma certa partícula percorre em tempo mínimo entre dois pontos no plano vertical. Bernoulli, convencia-se que a solução para o problema não era uma reta mas, uma curva familiar aos géometras, [13] [14].

Na altura do desafio, J. Bernoulli não hesitou em enviar o problema ao matemático Leibniz (1646-1716). Conforme a história, a 9 de Junho de 1696 ele terá lhe enviado uma carta em privado tendo como resposta detalhes completos sobre a solução do problema ainda no mesmo mês 6 dias depois. A solução de J. Bernoulli para o problema só é publicada em Maio 1697 altura em que uma solução anónima para o mesmo problema tinha sido feita por I. Newton (1643-1727), publicado por Charles Montague, como conta [18].

O cálculo das variações começou, quando Jean Louis Lagrange (1736-1813) estudava problemas de *Braquistócrona*, considerado um dos problemas fundamentais da área. Lagrange viu suas ideias brilhantes funcionarem em conexão entre minimizar funcionais e encontrar extremos de funções. Problemas estes que já tinham sido tratados por Euler em 1728 e as tornou públicas em 1744 quando da divulgação do seu livro de referência "Método para descobrir linhas curvas que gozam da propriedade de máximo ou de mínimo".

Entre 1754 e 1756, em carta para Euler, Lagrange mostrou como ele podia eliminar os seus métodos geométricos do processo. Após analisadas estas ideias Euler convenceu-se com os truques de Lagrange, abandonou os seus antigos métodos e batizou toda esta teoria pelo nome que agora utilizamos, cálculo das variações em honra ao método variacional de

Lagrange, [13].

Como se não bastasse, Euler também examinou se as suas condições fundamentais se manteriam intactas com uma mudança geral de coordenadas. Ele, mostrou ainda a primeira condição necessária para mínimo, agora chamada condição necessária ou simplesmente equação de Euler-Lagrange, veja [17]. Alguns matemáticos preferem as datas 1728 ou 1744 para o nascimento da teoria do cálculo das variações em vez de 1697 (data em que foi publicada a solução para o problema de Braquistócrona).

Alguns dos primeiros (e relevantes) trabalhos nestas duas áreas incluem as obras de outros grandes matemáticos, como K. Weierstrass, que estabeleceu uma condição necessária para a existência de extremidade de problemas variacionais. Ele também ajudou a elaborar as condições que dão o nome de Weierstrass-Erdmann, condições suficientes para se obter um extremo ao longo de um determinado extremo e permite encontrar uma curva de minimização ou seja área de uma determinada integral, veja [12]; A. Legendre apresentou a condição de Legendre que garante uma condição para a segunda variação ser não negativa e a denominada condição Legendre-Clebsch, [16].

A teoria de controlo ótimo tal como é hoje utilizada desenvolveu-se no século XX, tal como se referiu no início. Esta evolução é devida à trabalhos notáveis de Bolza, em cálculo de variações (veja [17]); de R. Bellman, com a formulação da programação dinâmica, veja [20] e de L. S. Pontryagin e seus orientandos (estudantes do doutoramento) V.G. Boltyanskii, R.V. Gamkrelidze e E. F. Mishchenko com a formulação do princípio de máximo (PMP) em 1956 também designado pelo princípio de mínimo de Pontryagin, veja [19].

Este princípio é usado na teoria de controlo ótimo para encontrar o melhor controlo possível para tirar um sistema dinâmico de um estado para outro e indicar uma condição necessária que deve manter uma trajetória ideal.

4.2 Descrição do problema básico de controlo ótimo

Vamos enunciar alguns elementos e conceitos importantes na construção do problema de controlo ótimo sem nos termos de preocupar com as respectivas demonstrações rigorosas, ou se não mesmo, optar por não demonstrar alguns desses para não perdemos o foco principal. Portanto, conforme, [15] o problema de otimização pressupõe:

- Construir o Hamiltoniano \mathcal{H} , a partir do qual vamos obter um sistema de **EDOs** para as equações de co-estado e a condição de otimalidade do problema.
- Com as condições de contorno obtida, estabelece-se a relação entre os controlos $u_i(t)$ e as funções de co-estado, $p_i(t)$.
- Usando esta última relação no sistema formado pelas equações da dinâmica do estado e de co-estado obtém-se um problema de valores na fronteira para as funções $x(t)$ e $p_i(t)$. Resolvendo este sistema, obtém-se a solução ideal $x^*(t)$ e o controlo ótimo $u^*(t)$.

4.2.1 Função objectivo

Seja $x(t) = [x_1(t), \dots, x_n(t)]^T$ vector que representa as variáveis de estado do sistema dinâmico, $u(t) = [u_1(t), \dots, u_n(t)]^T$ o controlo ótimo para o sistema. Então, a equação que determina a taxa de evolução da variável de estado é dada por,

$$\begin{cases} x'(t) &= f(x(t), u(t)), \\ x(t_0) &= x_0, \quad u(t) \in \mathcal{U}_{ad}, \quad t \in [t_0, t_f] \end{cases} \quad (4.1)$$

onde

- $f(x, u) = [f_1(x, u), \dots, f_n(x, u)]^T$ é uma função conhecida,
- \mathcal{U}_{ad} é o conjunto de todos os controlos admissíveis do sistema no intervalo de tempo inicial t_0 e tempo final t_f .

O controlo $u \in \mathcal{U}_{ad}$ deve ser escolhido para todos os $t \in [t_0, t_f]$ para otimizar o custo funcional \mathcal{J} , definido por,

$$\mathcal{J}(x, u) = \Phi(x(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} \mathbb{L}(x(t), u(t)) dt. \quad (4.2)$$

Na (4.2), \mathbb{L} é o Lagrangiano e $\Phi(x(t_f), t_f)$ é o custo no tempo final, conforme [16].

4.2.2 Função valor

Vamos ainda definir a função valor $\mathcal{V}(t, x(t))$ para o problema de otimização. Por hipótese, vamos assumir que $u \in \mathcal{U}_{ad}$ é um controlo ótimo do sistema dinâmico.

Seja $\mathcal{V}(t, x(t)) : [t_0, t_f] \times \mathbb{R}^n \Rightarrow \mathbb{R}$, uma função cujo valor é designado por valor de otimalidade funcional da função objectivo em (4.2). Então,

$$\mathcal{V}(t, x(t)) = \mathcal{J}(t, x(t), u(t)), \quad (4.3)$$

pelo que, goza de algumas propriedades importantes, ver [14].

- As funções do sistema f e \mathbb{L} são Lipschitz,
- Dado um $t \in [t_0, t_f]$ e $u \in \mathcal{U}_{ad}$, as funções $f(t, x(t), u(t))$ e $\mathbb{L}(t, x(t), u(t))$ são diferenciáveis e as derivadas parciais de f_x, \mathbb{L}_x são contínuas em $[t_0, t_f] \times \mathbb{R}^n \times \mathcal{U}_{ad}$,
- \mathcal{U}_{ad} é fechado.

4.2.3 Princípio de programação dinâmica de Bellman (PPD)

Consideremos os problemas (4.1) e (4.2) sujeitos às condições da função valor acima definidas então, são válidas as seguintes afirmações,

1. A função $\mathcal{V}(t, x(t))$ é diferenciável em $(t, x) \in [t_0, t_f] \times \mathbb{R}^n, \forall u \in \mathcal{U}_{ad}$, isto motiva a formulação da equação principal da programação dinâmica;

2. Seja $u \in \mathcal{U}_{ad}[t_0, T)$ um controlo ótimo para o sistema, suponhamos que a condição do primeiro item é satisfeita então, tem-se ótimo minimizante.

O *PPD* de Bellman estabelece assim às condições necessárias para o sistema dinâmico numa vizinhança entre dois pontos ao longo do trajecto. Pois, altera a função $\mathcal{V}(t, x(t))$ para $\mathcal{V}(t+h, x(t+h))$ pelo acréscimo infinitesimal h .

Pelo princípio de otimização a função assim definida é composta por duas composições

- Primeira em \mathcal{J} devido a passagem de t para $t+h$ dada pela função integral $\mathbb{L}(x(t), u(t))$ e
- Segunda pela função valor $\mathcal{V}(t+h, x(t+h))$ no momento h .

Portanto, a (4.2) passa por,

$$\mathcal{V}(t, x) \leq \mathcal{V}(t+h, x(t+h)) + \int_t^{t+h} \mathbb{L}(x(t), u(t)) dt. \quad (4.4)$$

Do primeiro item do teorema reescreve-se (4.4) em (4.5),

$$\frac{\mathcal{V}(t+h, x(t+h)) - \mathcal{V}(t, x)}{h} \geq -\frac{1}{h} \int_t^{t+h} \mathbb{L}(x(t), u(t)) dt. \quad (4.5)$$

pelo que, tomando limite quando $h \rightarrow 0$ motiva-nos a construção da equação principal da programação dinâmica,

$$\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial t} + \left\langle \frac{\partial \mathcal{V}}{\partial x}, f(x(t), u(t)) \right\rangle + \mathbb{L}(x(t), u(t)) \geq 0. \quad (4.6)$$

Do ponto (2), do princípio de programação dinâmica de Bellman, obtém-se,

$$\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial t} + \min_{u \in \mathcal{U}_{ad}} \left\{ \left\langle \frac{\partial \mathcal{V}}{\partial x}, f(x(t), u(t)) \right\rangle + \mathbb{L}(x(t), u(t)) \right\} = 0. \quad (4.7)$$

As restrições da dinâmica do sistema podem ser anexadas ao Lagrangiano \mathbb{L} , introduzindo Lagrange variando no tempo com vetor multiplicador $P(t) = \mathcal{V}_x$, onde $P(t) = [p_1(t), \dots, p_n(t)]^T$, cujos elementos são chamados de co-estados do sistema. Isso motiva a construção do Hamiltoniano \mathcal{H} definido para todo $t \in [0, t_f]$.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(p(t), x(t), u(t), t) &= \langle P(t), f(x(t), u(t)) \rangle + \mathbb{L}(x(t), u(t)), \\ &= \sum_{i=1}^n p_i(t) \times f_i(x(t), u(t)) + \mathbb{L}(x(t), u(t)). \end{aligned} \quad (4.8)$$

A equação (4.8) é designada equação de Hamilton-Jacobi-Bellman que deve satisfazer as condições dadas a seguir,

$$\mathcal{H}(P(t), x^*(t), u^*(t), t) + \mathcal{V}_t(x(t), t) \leq \mathcal{H}(P(t), x(t), u(t), t) + \mathcal{V}_t(x(t), t). \quad (4.9)$$

- u^* é designado controlo ótimo para o sistema dinâmico,
- x^* é a trajetória dos estados,
- $P(t)$ é designado por vetor multiplicador correspondente de Lagrange.

O princípio de otimalidade de Pontryagin afirma que $P(t)$ deve minimizar o hamiltoniano \mathcal{H} tal que,

$$\mathcal{H}(P(t), x^*(t), u^*(t), t) + \mathcal{V}_t(x(t), t) = 0. \quad (4.10)$$

Para todo $t \in [t_0, t_f]$ e para todas as entradas de controlo admissíveis $u \in \mathcal{U}_{ad}$ as equações de co-estados satisfazem as equações de movimento para $P(t)$.

Suponha que na (4.10), as funções \mathcal{H} e \mathcal{V} são continuamente diferenciáveis a respeito dos seus argumentos. Então,

$$\mathcal{H}_x(P(t), x^*(t), u^*(t), t) + \mathcal{V}_{tx}(x(t), t) = 0, \quad (4.11)$$

ou seja,

$$\mathbb{L}_x + \mathbb{L}_u u^*_x + \mathcal{V}^*_{xx}f + \mathcal{V}_x f^*_x + \mathcal{V}_x f^*_u u^*_x + \mathcal{V}_{tx} = 0, \quad (4.12)$$

onde,

$$\mathcal{V}_{tx} + V^*_{xx}f = -(u^*_x (V_x f^*_u + \mathbb{L}_u) + V_x f^*_x + \mathbb{L}_x). \quad (4.13)$$

Suponhamos que $\mathcal{V}(x(t), t)$ é de classe C^2 , vamos obter as derivadas a respeito dos seus argumentos, onde

$$\frac{d}{dt}\mathcal{V}_x = \mathcal{V}^*_{xx}f + \mathcal{V}_{tx} = \dot{P}(t). \quad (4.14)$$

Por transitividade, substituindo o membro esquerdo da (4.13) por (4.14), obtém-se

$$P'(t) = -(u^*_x (V_x f^*_u + \mathbb{L}_u) + V_x f^*_x + \mathbb{L}_x). \quad (4.15)$$

Mas uma vez, remete-nos à definição de Hamilton (4.8), o que permite formar um sistema de equações diferenciais para as:

- Equações do co-estado

$$P'(t) = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} \Leftrightarrow p'_i(t) = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_i}, \quad 1 \leq i \leq n. \quad (4.16)$$

- Condições de otimalidade

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u} = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u_i} = 0, \quad 1 \leq i \leq n. \quad (4.17)$$

e a

- Condição de transversalidade,

$$P(t_f) = \Phi_x(x(t_f)) \Leftrightarrow p_i(t_f) = \Phi_{x_i}(x(t_f)), \quad 1 \leq i \leq n. \quad (4.18)$$

As expressões (4.16) - (4.18) são as condições necessárias para obter o controlo ótimo, ver [16] [14].

Considerando que os $p_i(t_f)$ são funções que dependem do tempo, vamos a seguir demonstrar o processo que determina sua solução.

4.3 Fórmula de diferenças regressivas ou Euler regressivo

Sejam $p_i(t)$ uma classe de funções em C^1 definida no intervalo $[t_0, t_f] \subseteq R$ que é interpolada pelo polinómio $P_m(t)$ de grau $\leq m$ nos distintos nós do intervalo.

Suponha que $m = j$ e $t = t_j$, neste caso temos de substituir $p_i(t)$ por $P_j(t)$ nos nós t_0, t_1, \dots, t_j para $t_j = t_0 + jh$, $j = 1, 2, \dots, m$ e a derivada de $p'_i(t_f)$ pelo valor de $P'_m(t_f)$, para mais detalhes ver, [10] [9].

Portanto,

$$P_j(t) = p_i(t_j) + (t - t_j)p_i[t_j, t_{j-1}] + (t - t_j) \dots (t - t_1)p_i[t_j, \dots, t_0], \quad (4.19)$$

onde a derivada do polinómio interpolador no ponto $t = t_j$ é dado por,

$$P'_j(t_j) = p_i[t_j, t_{j-1}] + \dots + (t_j - t_{j-1})p_i[t_j, \dots, t_0], \quad (4.20)$$

então, concluí-se que,

$$p'_i(t_j) \approx P'_j(t_j) = p_i[t_j, \dots, t_0]. \quad (4.21)$$

Para o nosso problema em concreto vamos tomar $n = 1$, o que pressupõe aproximar a função $p_i(t)$ por um polinómio de grau,

$$P_1(t) = p_i(t_j) + p_i[t_j, t_0](t - t_j). \quad (4.22)$$

Tomando a derivada da expressão (4.22) no ponto $t = t_j$, obtém-se,

$$p'_i(t_j) \approx P'_1(t_j) = p_i[t_j, t_0]. \quad (4.23)$$

Uma vez que os p_i são funções definidas em $[t_0, t_f] \subset R$ e t_0, t_1, \dots, t_f pontos distintos em $[t_0, t_f]$. Vamos definir a diferença dividida dos p_i de ordem j relativamente aos argumentos t_0 e t_j , dada pela fórmula,

$$p_i[t_j, t_0] = \frac{p_i(t_0) - p_i(t_j)}{t_0 - t_j}. \quad (4.24)$$

Pondo $-h = t_0 - t_j \Rightarrow t_0 = t_j - h$, logo, conclui-se que,

$$p_i(t-h) = p_i(t_j) - hp_i[t_j, t_0] \quad (4.25)$$

Por notação, vamos reescrever a equação (4.25) tendo em conta a expressão (4.23). Donde,

$$p_{i_{j-1}} = p_{i_j} - hp'_{i_j}. \quad (4.26)$$

A equação (4.26), assim definida é designada de fórmula de diferença regressiva de primeira ordem, a qual não é mais senão, diferenças divididas de primeira ordem relativamente aos pontos $t-h, t$.

Pois, pela equação (4.26), obtém-se os $p_i(t)$ sendo que as variáveis do estado S, I e R são determinadas conforme os métodos para PVI desenvolvidos no capítulo (3), tendo em atenção os controlos $u_i, i = 1, 2$.

4.4 Apresentação do problema controlado com Vacinação e Tratamento

Para um modelo SIR , pretende-se utilizando como controlo a prevenção dos susceptíveis (Campanhas de mobilização e a vacinação) e o tratamento dos infectados (medicamentos e hospitais), para minimizar o número (percentagem) de indivíduos susceptíveis e infectados da população. Para tal, vamos considerar $u_i = u_i(t)$ com $i = 1, 2$. Funções que representam os controlos (a vacinação e o tratamento) definidos por,

$$\mathcal{U}_{i_{ad}} = \{u_i(t) \in \mathcal{L}^2([t_0, t_f]) : 0 \leq u_i(t) \leq u_{i_{\max}} < 1\}, \quad i = 1, 2. \quad (4.27)$$

Pelo que,

$$\mathcal{L}^2([t_0, t_f]) = \left\{ \int_{t_0}^{t_f} u^2(t) dt, 0 \leq u_i(t) < \infty \right\}. \quad (4.28)$$

Na equação (4.27), a condição $0 \leq u_i(t) \leq u_{i_{\max}} < 1$, indica que não é possível tratar ou efectuar uma prevenção sobre todos os membros da população.

Vamos considerar o sistema de equações diferenciais em (2.4), com $u_1 = u_1(t)$ e $u_2 = u_2(t)$ a representar os controlos que temos à disposição. Assim, o sistema controlado é escrito na forma,

$$\begin{cases} S' &= -\beta SI - u_1 S \\ I' &= \beta SI - \gamma I - u_2 I \\ R' &= \gamma I + u_1 S + u_2 I \end{cases} \quad (4.29)$$

O funcional que queremos minimizar é dado por,

$$\min_{u_1 \in \mathcal{U}_{1_{ad}}, u_2 \in \mathcal{U}_{2_{ad}}} \mathcal{J}(S, I, u_1, u_2) = \int_0^{t_f} (\kappa_0 I + \kappa_1 u_1^2 + \kappa_2 u_2^2) dt, \quad (4.30)$$

com $\kappa_i \in \mathbb{R}^+$, para $i = 0, 1, 2$ onde $\kappa_1 \leq \kappa_2$. Pois, o custo do tratamento é mais caro que o custo da vacinação.

4.4.1 O Hamiltoniano e o problema de valores na fronteira

Para este problema, o Hamiltoniano é dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(S, I, R, u_1, u_2, p_1, p_2, p_3) &= \kappa_0 I + \kappa_1 u_1^2 + \kappa_2 u_2^2 \\ &\quad + p_1(t) [-\beta SI - u_1 S] \\ &\quad + p_2(t) [\beta SI - \gamma I - u_2 I] \\ &\quad + p_3(t) [\gamma I + u_1 S + u_2 I]. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Agora, é necessário determinar as equações para as funções adjuntas, as funções $p_i(t)$ para $i = 1, 2, 3$. Portanto,

$$\begin{aligned} p_1'(t) &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial S} \\ &= p_1(t) [\beta I + u_1] - \beta p_2 I - p_3 u_1; \end{aligned} \quad (4.32)$$

$$\begin{aligned} p_2'(t) &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial I} \\ &= p_2(\gamma - \beta S + u_2) - p_3(\gamma + u_2) + \beta p_1 S - \kappa_0; \end{aligned} \quad (4.33)$$

$$\begin{aligned} p_3'(t) &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial R} \\ &= 0. \end{aligned} \quad (4.34)$$

As condições (de fronteira) para as funções adjuntas, $p_i(t_f)$ são dadas por,

$$p_i(t_f) = 0, \text{ para } i = 1, 2, 3. \quad (4.35)$$

Porém, é necessário resolver o problema de valores na fronteira,

$$\left\{ \begin{array}{l} S' = -\beta SI - u_1 S \\ I' = \beta SI - \gamma I - u_2 I \\ R' = \gamma I + u_1 S + u_2 I \\ p_1' = p_1 [\beta I + u_1] - \beta p_2 I - p_3 u_1 \\ p_2' = p_2 (\gamma - \beta S + u_2) - p_3 (\gamma + u_2) + \beta p_1 S - \kappa_0 \\ p_3' = 0 \end{array} \right. . \quad (4.36)$$

Com as condições de fronteira:

$$S(0) = 0.99, I(0) = 0.01, R(0) = 0, p_1(25) = 0, p_2(25) = 0 \text{ e } p_3(25) = 0. \quad (4.37)$$

Mais, as condições de otimalidade, $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u_1} = 0$ e $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u_2} = 0$ garantem que:

$$u_1(t) = \frac{S(p_1 - p_3)}{2\kappa_1} \text{ e } u_2(t) = \frac{I(p_2 - p_3)}{2\kappa_2}. \quad (4.38)$$

Pois,

$$u_1(t) = \min \left\{ \max \left\{ 0, \frac{S(p_1 - p_3)}{2\kappa_1} \right\}, u_{1\max} \right\}, \quad (4.39)$$

e

$$u_2(t) = \min \left\{ \max \left\{ 0, \frac{I(p_2 - p_3)}{2\kappa_2} \right\}, u_{2\max} \right\}. \quad (4.40)$$

4.4.2 Simulação numérica

Para a solução do problema (1) temos ainda à considerar que $\kappa_0 = 1$, $\kappa_1 = 5$ e $\kappa_2 = 15$ e também $u_{1\max} = 0.75$, $u_{2\max} = 0.1$.

4.4.2.1 Processo utilizado na resolução numérica (método de varredura para frente e para trás)

O processo utilizado na resolução do problema de controlo ótimo consta dos seguintes passos, ver [15],

- 1) Indicar uma aproximação inicial para o valor de $u_i(t)$, $i = 1, 2$. Neste caso, um bom candidato seria $u(t) = \frac{u_{\max}}{2}$ ¹;
- 2) Utilizando as condições iniciais, resolver o "problema" para as funções S , I e R com os valores de u_i , $i = 1, 2$ considerado anteriormente;
- 3) Utilizando a condição de transversalidade, resolver com diferenças regressivas as equações do co-estado dadas por $p_1(t)$, $p_2(t)$ e $p_3(t)$. Deve utilizar os valores de S , I , R e u_i obtidos anteriormente;
- 4) Uma vez que já tem os novos valores para $p_1(t)$, $p_2(t)$ e $p_3(t)$, deve atualizar o valor de u_i de acordo com a(s) fórmula(s) (4.39) e (4.40);
- 5) É necessário verificar a convergência. Se os valores são "suficientemente próximos", o último valor passa a ser o resultado. Caso contrário, voltar ao passo 2.

¹De acordo com [15], capítulo 4, o valor $u_i(t) = 0$, $i = 1, 2$ é suficiente.

4.4.3 Discretização do problema controlado com vacinação e tratamento pelo método de Euler

Pelo que foi enunciado nas secções (4.3) e (3), o problema (4.36) pelo método de Euler é dado por,

$$\left\{ \begin{array}{l} S_{i+1} = S_i + h[-\beta S_i I_i - u_{1_i} S_i] \\ I_{i+1} = I_i + h[\beta S_i I_i - \gamma I_i - u_{2_i} I_i] \\ R_{i+1} = R_i + h[\gamma I_i + u_{1_i} S_i + u_{2_i} I_i] \\ p_{1_{j-1}} = p_{1_j} - h\{p_{1_j} [\beta I_j + u_{1_j}] - \beta p_{2_j} I_j - p_{3_j} u_{1_j}\} \\ P_{2_{j-1}} = P_{2_j} - h\{p_{2_j} [\gamma - \beta S_j + u_{2_j}] - p_{2_j} [\gamma + u_{2_j}] + \beta p_{1_j} S_j - \kappa_0\} \\ P_{3_{j-1}} = P_{3_j} \end{array} \right. , \quad (4.41)$$

onde as variáveis do estado S, I e R , são determinadas pela fórmula progressiva de Euler e as variáveis do co-estado p_1, p_2 e p_3 , pela fórmula regressiva de Euler.

Todavia, os controlos u_1 e u_2 são atualizados pelas expressões (4.39) e (4.40) respectivamente.

Com as condições de fronteira:

$$S(0) = 0.99, I(0) = 0.01, R(0) = 0, p_1(25) = 0, p_2(25) = 0 \text{ e } p_3(25) = 0. \quad (4.42)$$

4.4.3.1 Aproximação numérica do problema controlado com vacinação e tratamento pelo método de Euler

Vamos obter uma aproximação para o problema (1), controlado com vacinação (para os susceptíveis) e tratamento (para os infectados), com $h = 0.25$.

As figuras (4.1) e (4.2), representam a dinâmica dos estados, (4.3) e (4.4) os nossos controlos, sendo que (4.5) e (4.6) representam as funções do co-estados.

Na figura (4.1), ilustra-se a dinâmica dos estados quando $\gamma = 0.001$. Com aplicação da vacinação (aos susceptíveis) e tratamento (aos infectados) o grau de situação dos estados antes considerados alarmantes foram minimizados para um estado controlado. Já na figura (4.2), mostra-se o caso em que $\gamma = 1$.

Pelo que se pode observar, nesta situação, com aplicação da vacinação e tratamento em simultâneo o pico da infecção é relativamente menor quando comparado com a figura (3.2).

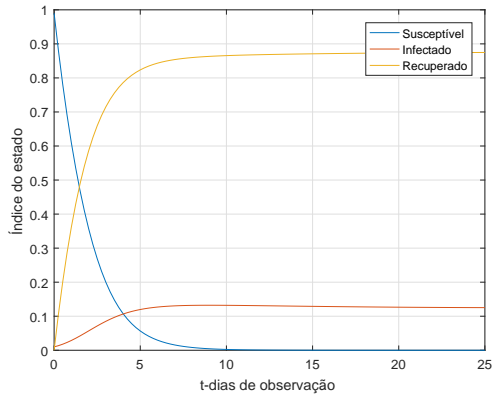


Figura 4.1: Modelo controlado com vacina e tratamento, caso de $R_0 > 1$ pelo Euler

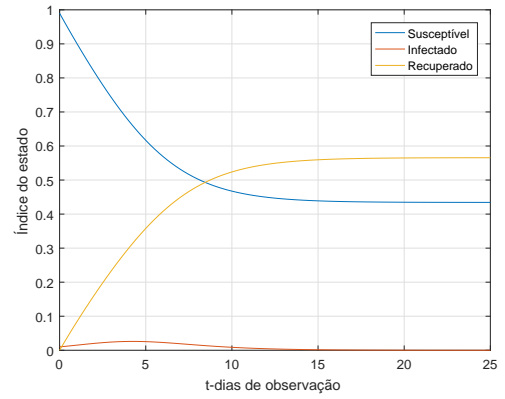


Figura 4.2: Modelo controlado com vacina e tratamento, caso de $R_0 < 1$ pelo Euler

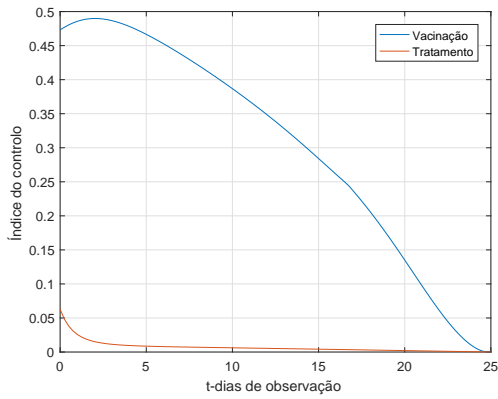


Figura 4.3: Níveis dos controles para o caso em que $R_0 > 1$ utilizando Euler

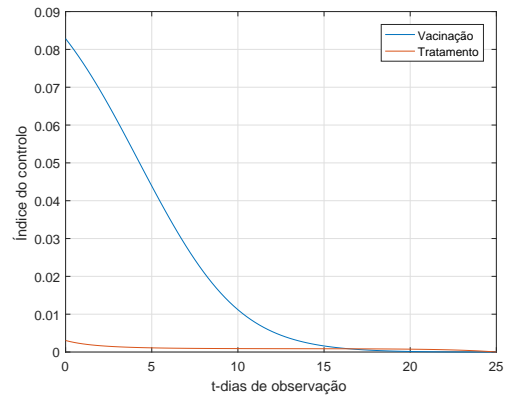


Figura 4.4: Níveis dos controles para o caso em que $R_0 < 1$ utilizando Euler

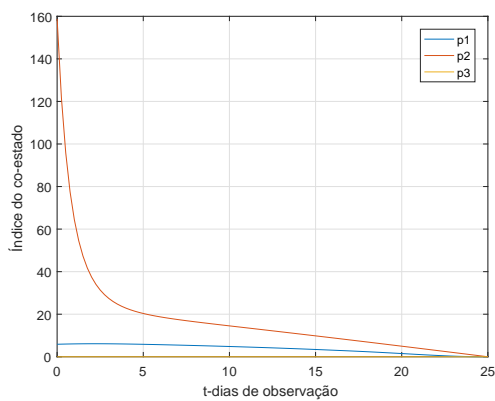


Figura 4.5: Co-estado das funções para caso em que $R_0 > 1$ em vacinação e tratamento utilizando Euler

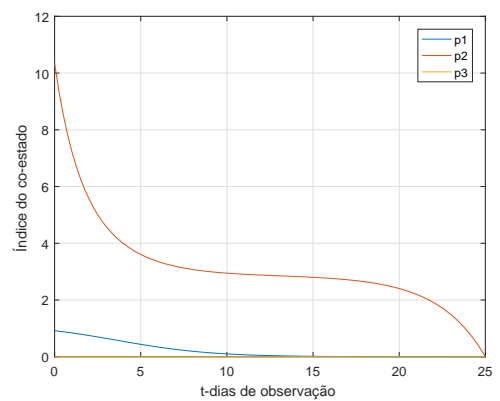


Figura 4.6: Co-estado das funções para caso em que $R_0 < 1$ em vacinação e tratamento utilizando Euler

4.4.4 Discretização do problema controlado com vacinação e tratamento pelo método de Runge-Kutta

Vamos a seguir apresentar a expressão do problema em análise discretizado pelo método de Runge-Kutta.

$$\left\{ \begin{array}{l}
 k_{11} = -S_i (\beta I_i + u_{1_i}) \\
 k_{12} = (\beta S_i - \gamma - u_{2_i}) I_i \\
 k_{13} = [u_{1_i} S_i + I_i (\gamma + u_{2_i})] \\
 k_{21} = \{-[S_i + hk_{11}] [\beta (I_i + hk_{12}) + u_{1_{i+1}}]\} \\
 k_{22} = [\beta (S_i + hk_{11}) - \gamma - u_{2_{i+1}}] [I_i + hk_{12}] \\
 k_{23} = \{u_{1_{i+1}} [S_i + hk_{11}] + (\gamma + u_{2_{i+1}}) [I_i + hk_{12}]\} \\
 S_{i+1} = S_i + \frac{h}{2} [k_{11} + k_{21}] \\
 I_{i+1} = I_i + \frac{h}{2} [k_{12} + k_{22}] \\
 R_{i+1} = R_i + \frac{h}{2} [k_{13} + k_{23}] \\
 k_{11} = p_{1_j} [\beta I_j + u_{1_j}] - \beta p_{2_j} I_j - p_{3_j} u_{1_j} \\
 k_{12} = p_{2_j} [\gamma - \beta S_j + u_{2_j}] - p_{3_j} (\gamma + u_{2_j}) + \beta p_{1_j} S_j - \kappa_0 \\
 k_{13} = 0 \\
 k_{21} = (p_{1_j} - hk_{11}) [\beta I_{j-1} + u_{1_{j-1}}] - [p_{2_j} - hk_{12}] \beta I_{j-1} - [p_{3_j} - k_{13}] u_{1_{j-1}} \\
 k_{22} = [p_{2_j} - hk_{12}] [\gamma - \beta S_{j-1} + u_{2_{j-1}}] - [p_{3_j} - hk_{13}] [\gamma + u_{2_{j-1}}] + [p_{1_j} - hk_{11}] \beta S_{j-1} - \kappa_0 \\
 k_{23} = 0 \\
 p_{1_{j-1}} = p_{1_j} - \frac{h}{2} [k_{11} + k_{12}] \\
 p_{2_{j-1}} = p_{2_j} - \frac{h}{2} [k_{12} + k_{22}] \\
 p_{3_{j-1}} = p_{3_j} - \frac{h}{2} [k_{13} + k_{23}]
 \end{array} \right. \tag{4.43}$$

Com as condições de fronteiras em (4.42), e os u_i são atualizados pelas expressões (4.39) e

(4.40).

4.4.4.1 Aproximação numérica do problema controlado com vacinação e tratamento pelo método de Runge-Kutta

Tal como no método anterior, as figuras a seguir apresentam a simulação do PVF que estamos analisar pelo método de RK.

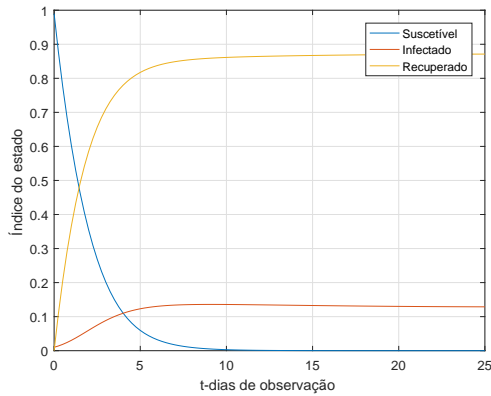


Figura 4.7: Modelo controlado com vacina e tratamento, caso de $R_0 > 1$ utilizando RK

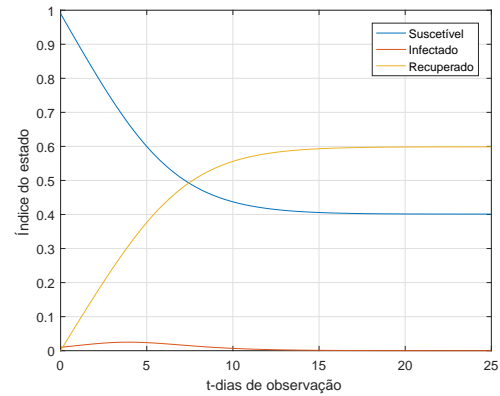


Figura 4.8: Modelo controlado com vacina e tratamento, caso de $R_0 < 1$ utilizando RK

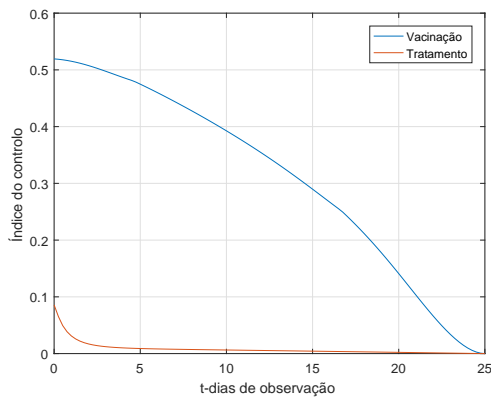


Figura 4.9: Níveis dos controles para o caso em que $R_0 > 1$ utilizando RK

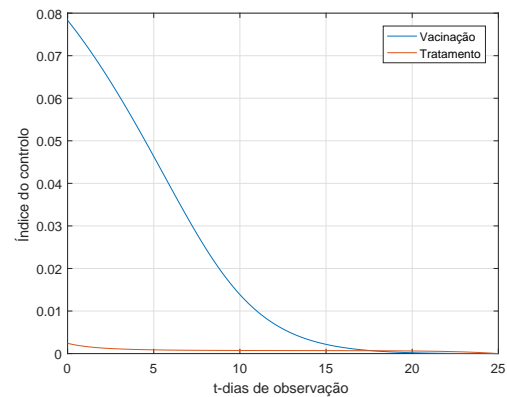


Figura 4.10: Níveis dos controles para o caso em que $R_0 < 1$ utilizando RK

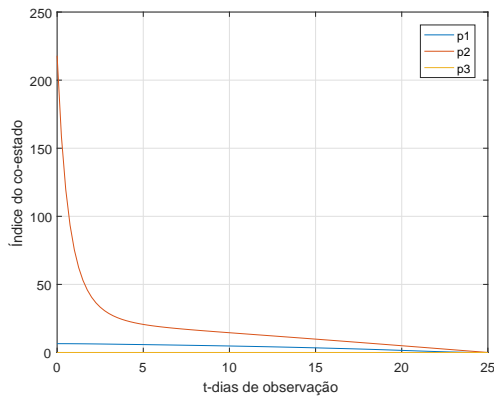


Figura 4.11: Co-estado das funções para caso em que $R_0 > 1$ em vacinação e tratamento utilizando RK

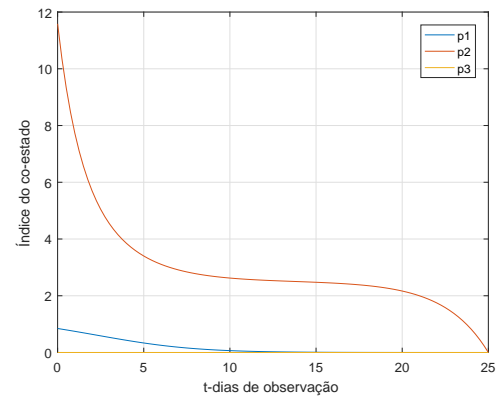


Figura 4.12: Co-estado das funções para caso em que $R_0 < 1$ em vacinação e tratamento utilizando RK

4.5 Apresentação do problema controlado apenas com Vacinação

Para um modelo SIR , pretende-se, utilizando como controlo só a vacinação dos indivíduos susceptíveis à doença, onde $u = u(t)$ representa o controlo que temos à nossa disposição, definido pela expressão,

$$\mathcal{U}_{ad} = \{u(t) \in \mathcal{L}^2([t_0, t_f]) : 0 \leq u(t) \leq u_{\max} < 1\}, \quad i = 1, 2. \quad (4.44)$$

onde,

$$\mathcal{L}^2([t_0, t_f]) = \left\{ \int_{t_0}^{t_f} u^2(t) dt, \quad 0 \leq u(t) < \infty \right\}. \quad (4.45)$$

Porém, na equação (4.44), a condição $0 \leq u(t) \leq u_{\max} < 1$, serve para indica que não é possível tratar todos os membros da população.

O sistema controlado é, então:

$$\begin{cases} S' &= -\beta SI - uS \\ I' &= \beta SI - \gamma I \\ R' &= \gamma I + uS \end{cases}. \quad (4.46)$$

O funcional que queremos minimizar é dado por

$$\min_{u \in \mathcal{U}_{ad}} \mathcal{J}(S, I, u) = \int_0^{t_f} (\kappa_0 I + \kappa_1 u^2) dt, \quad (4.47)$$

onde $\kappa_i \in \mathbb{R}^+$, para $i = 0, 1$.

4.5.1 O Hamiltoniano e o problema de valores na fronteira

Para este problema, o Hamiltoniano é dado por,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(S, I, R, u, p_1, p_2, p_3) &= \kappa_0 I + \kappa_1 u^2 \\ &+ p_1(t) [-\beta SI - uS] \\ &+ p_2(t) [\beta SI - \gamma I] \\ &+ p_3(t) [\gamma I + uS]. \end{aligned} \quad (4.48)$$

Agora, é necessário determinar as equações para as funções adjuntas, as funções $p_i(t)$ para $i = 1, 2, 3$.

Portanto,

$$\begin{aligned}
p_1'(t) &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial S} \\
&= p_1(t) [bI + u] - bp_2I - p_3u;
\end{aligned} \tag{4.49}$$

$$\begin{aligned}
p_2'(t) &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial I} \\
&= p_2(\gamma - \beta S) - \gamma p_3 + \beta p_1 S - \kappa_0;
\end{aligned} \tag{4.50}$$

$$\begin{aligned}
p_3'(t) &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial R} \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{4.51}$$

As condições (de fronteira) para as funções adjuntas, $p_i(t)$ são dadas por

$$p_i(t_f) = 0, \text{ para } i = 1, 2, 3. \tag{4.52}$$

Porém, é necessário resolver o problema de valores na fronteira,

$$\left\{ \begin{array}{l}
S' = -\beta SI - uS \\
I' = \beta SI - \gamma I \\
R' = \gamma I + uS \\
p_1' = p_1(t) [bI + u] - bp_2I - p_3u \\
p_2' = p_2(\gamma - \beta S) - \gamma p_3 + \beta p_1 S - \kappa_0 \\
p_3' = 0
\end{array} \right. . \tag{4.53}$$

Com as condições de fronteira:

$$S(0) = 0.99, I(0) = 0.01, R(0) = 0, p_1(25) = 0, p_2(25) = 0 \text{ e } p_3(25) = 0. \tag{4.54}$$

Mais, a condição de otimalidade, $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u} = 0$ garante que:

$$u(t) = \frac{S(p_1 - p_3)}{2\kappa_1}. \tag{4.55}$$

Portanto,

$$u(t) = \min \left\{ \max \left\{ 0, \frac{S(p_1 - p_3)}{2\kappa_1} \right\}, u_{\max} \right\}. \tag{4.56}$$

4.5.2 Discretização do problema controlado apenas com vacinação pelo método de Euler

Tal como já se referiu, os $p_i(t)$ são dados pelas diferenças regressivas, pois, (4.53), desenvolvida pelo método de Euler é,

$$\left\{ \begin{array}{l} S_{i+1} = S_i + h[-S_i(\beta I_i + u_{1i})] \\ I_{i+1} = I_i + h[(\beta S_i - \gamma) I_i] \\ R_{i+1} = R_i + h[\gamma I_i + u_i S_i] \\ P_{1_{j-1}} = P_{1_j} - h\{p_1[bI_j + u_j] - bp_2 I_j - p_3 u_j\} \\ P_{2_{j-1}} = P_{2_j} - h\{p_2(\gamma - \beta S_j) - \gamma p_3 + \beta p_1 S_j - \kappa_0\} \\ P_{3_{j-1}} = P_{3_j} \end{array} \right. \quad (4.57)$$

As condições de fronteiras dadas em (4.54), o u é atualizado pela expressão (4.56).

4.5.2.1 Aproximação numérica do problema controlado só com vacinação pelo método de Euler

As figuras (4.13) e (4.14), ilustram a solução simulada do problema (1), controlado com vacinação para o caso em que $\gamma = 0.001$ e $\gamma = 1$; as figuras (4.15) e (4.16), a representarem os controlos e (4.17) e (4.18) as funções do co-estado.

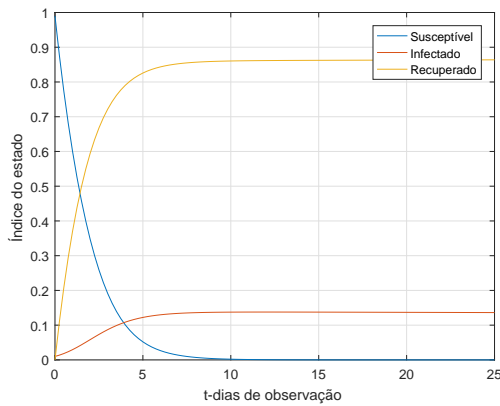


Figura 4.13: Modelo controlado só com vacinação, caso de $R_0 > 1$ pelo método de Euler

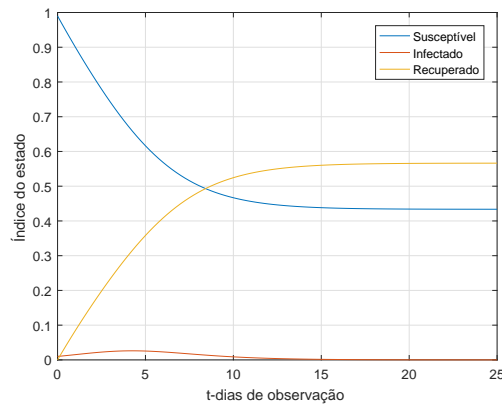


Figura 4.14: Modelo controlado só com vacinação, caso de $R_0 < 1$ pelo método de Euler

Pela figura (4.13), é notável à redução considerável do nível de propagação da infecção, dado que era um caso epidémico. Mas, por se tratar apenas de vacinação como controlo, a doença prevalece no seio da população pelo facto de ter alguns elementos do grupo com a doença e não receberam o tratamento. Pois, a vacinação apenas previne que geram novos

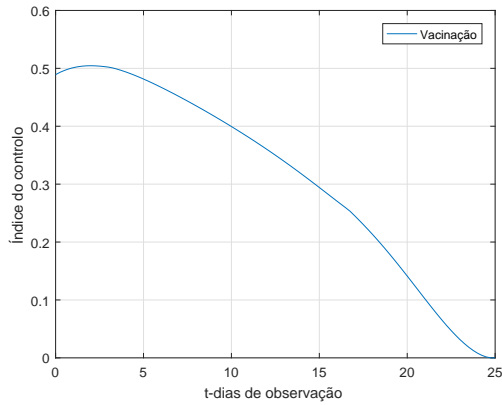


Figura 4.15: Nível de vacinação para o caso de $R_0 > 1$ utilizando Euler

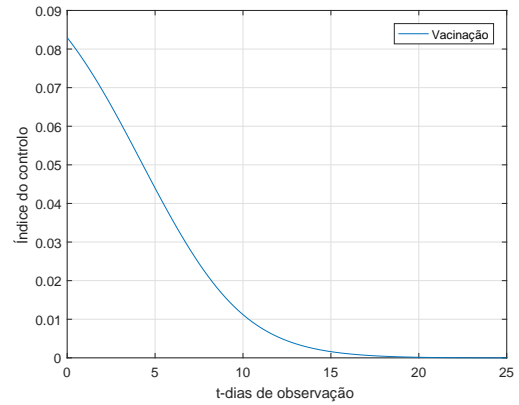


Figura 4.16: Nível de vacinação para o caso de $R_0 < 1$ utilizando Euler

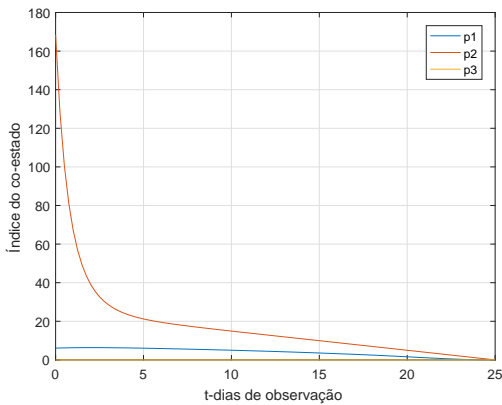


Figura 4.17: Co-estado das funções para caso em que $R_0 > 1$ em vacinação utilizando Euler

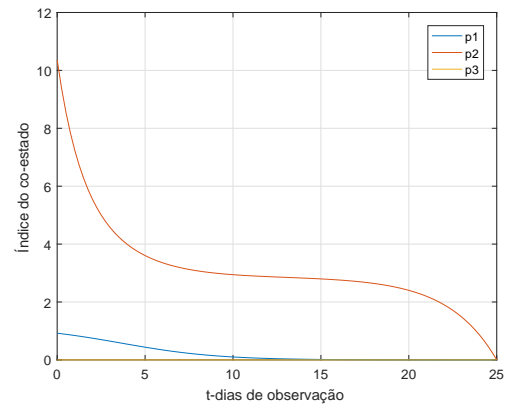


Figura 4.18: Co-estado das funções para caso em que $R_0 < 1$ em vacinação utilizando Euler

casos de infecção.

Na figura (4.14), considerando que já existia um coeficiente de recuperação, com a aplicação do controlo em vacinação, ajuda a diminuir o nível de indivíduos infectados pela doença, comparando com o caso sem o controlo ótimo é também relativamente menor. Pois, a vacinação inibe a propagação da doença e os níveis de recuperação elevam-se cada vez mais.

4.5.3 Discretização do problema controlado só com vacinação pelo método de Runge-Kutta

Análogo ao problema anteriores, a seguir é apresentado o problema (4.53) na fórmula de RK, com as condições de fronteiras dadas pela equação (4.54) e o u atualizado pela equação (4.56).

$$\left\{ \begin{array}{l}
 k_{11} = -S_i (\beta I_i + u_i) \\
 k_{12} = (\beta S_i - \gamma) I_i \\
 k_{13} = [\gamma I_i + u_i S_i] \\
 k_{21} = \{-[S_i + hk_{11}] [\beta (I_i + hk_{12}) + u_{i+1}]\} \\
 k_{22} = [\beta (S_i + hk_{11}) - \gamma] [I_i + hk_{12}] \\
 k_{23} = \{\gamma [I_i + hk_{12}] + u_{i+1} [S_i + hk_{11}]\} \\
 S_{i+1} = S_i + \frac{h}{2} [k_{11} + k_{21}] \\
 I_{i+1} = I_i + \frac{h}{2} [k_{12} + k_{22}] \\
 R_{i+1} = R_i + \frac{h}{2} [k_{13} + k_{23}] \\
 k_{11} = p_{1j} [\beta I_j + u_{1j}] - \beta p_{2j} I_j - p_{3j} u_{1j} \\
 k_{12} = p_{2j} [\gamma - \beta S_j] - \gamma p_{3j} + \beta p_{1j} S_j - \kappa_0 \\
 k_{13} = 0 \\
 k_{21} = (p_{1j} - hk_{11}) [\beta I_{j-1} + u_{j-1}] - [p_{2j} - hk_{12}] \beta I_{j-1} - [p_{3j} - k_{13}] u_{j-1} \\
 k_{22} = [p_{2j} - hk_{12}] [\gamma - \beta S_{j-1}] - \gamma [p_{3j} - hk_{13}] + \beta [p_{1j} - hk_{11}] S_{j-1} - \kappa_0 \\
 k_{23} = 0 \\
 p_{1_{j-1}} = p_{1j} - \frac{h}{2} [k_{11} + k_{12}] \\
 p_{2_{j-1}} = p_{2j} - \frac{h}{2} [k_{12} + k_{22}] \\
 p_{3_{j-1}} = p_{3j} - \frac{h}{2} [k_{13} + k_{23}]
 \end{array} \right. , \tag{4.58}$$

4.5.3.1 Aproximação numérica do problema controlado só com vacinação utilizando método de Runge-Kutta

Simulação numérica do problema (1) controlado só com vacinação, pelo método de RK

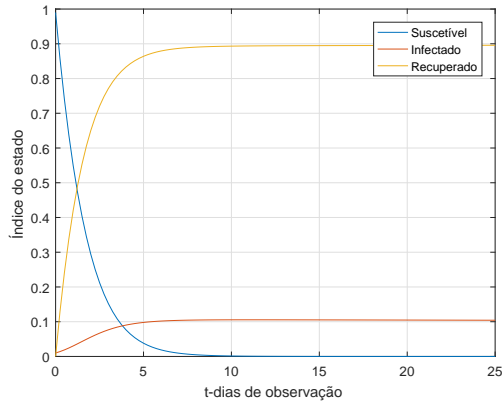


Figura 4.19: Modelo controlado só com vacinação caso de $R_0 > 1$ pelo método de RK

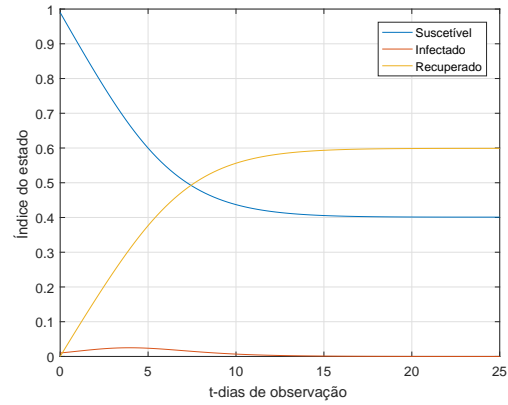


Figura 4.20: Modelo controlado só com vacinação caso de $R_0 < 1$ pelo método de RK

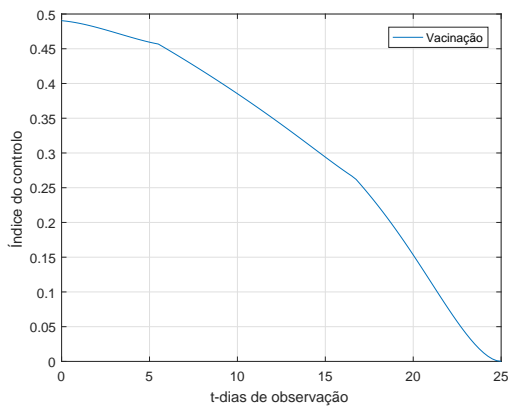


Figura 4.21: Nível de vacinação para o caso de $R_0 > 1$ utilizando RK

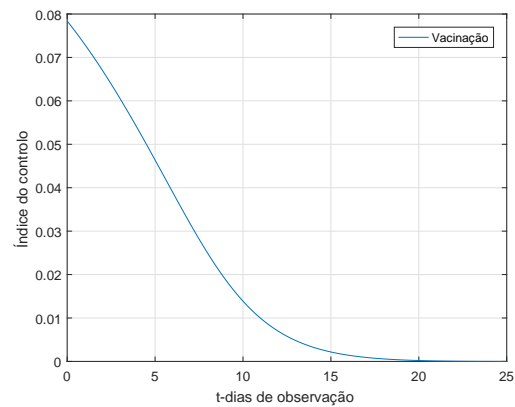


Figura 4.22: Nível de vacinação para o caso de $R_0 < 1$ utilizando RK

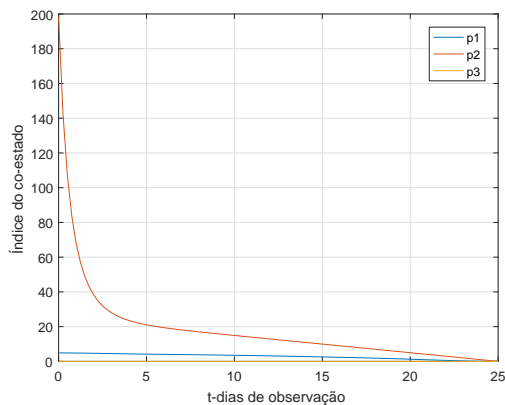


Figura 4.23: Co-estado das funções para caso em que $R_0 > 1$ em vacinação utilizando RK

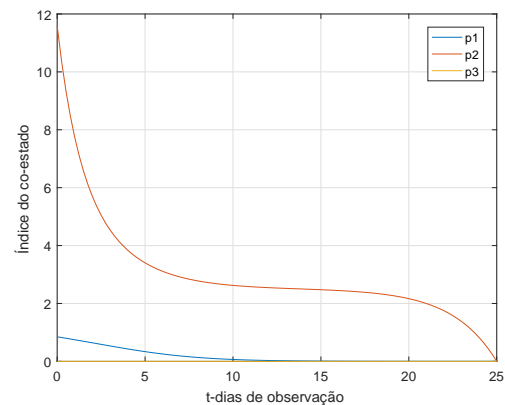


Figura 4.24: Co-estado das funções para caso em que $R_0 < 1$ em vacinação utilizando RK

4.6 Apresentação do problema controlado só com tratamento

Pretende-se, utilizar para o modelo SIR dado pelo sistema de equações diferenciais em (2.4), tratamento dos elementos infectados da população como controlo, em que $u = u(t)$ representa o controlo que temos à nossa disposição, o tratamento. Onde,

$$\mathcal{U}_{ad} = \{u(t) \in \mathcal{L}^2([t_0, t_f]) : 0 \leq u(t) \leq u_{\max} < 1\}, \quad (4.59)$$

pelo que,

$$\mathcal{L}^2([t_0, t_f]) = \left\{ \int_{t_0}^{t_f} u^2(t) dt, 0 \leq u(t) < \infty \right\}. \quad (4.60)$$

Tal como na equação (4.44), na equação (4.59), a condição $0 \leq u_i(t) \leq u_{i\max} < 1$, serve para indicar que não é possível efectuar uma prevenção sobre todos os membros da população.

O sistema controlado é dado por,

$$\begin{cases} S' &= -\beta SI \\ I' &= \beta SI - \gamma I - uI \\ R' &= \gamma I + uI \end{cases} \quad (4.61)$$

O funcional que queremos minimizar é então,

$$\min_{u \in \mathcal{U}_{ad}} \mathcal{J}(I, u) = \int_0^{t_f} (\kappa_0 I + \kappa_1 u^2) dt, \quad (4.62)$$

onde $\kappa_i \in \mathbb{R}^+$, para $i = 0, 1$, com κ_1 a representar o custo do tratamento.

4.6.1 O Hamiltoniano e o problema de valores na fronteira

Para este problema, o Hamiltoniano é dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(S, I, R, u, p_1, p_2, p_3) &= \kappa_0 I + \kappa_2 u^2 \\ &+ p_1(t) [-\beta SI] \\ &+ p_2(t) [\beta SI - \gamma I - uI] \\ &+ p_3(t) [\gamma I + uI]. \end{aligned} \quad (4.63)$$

Portanto, as funções adjuntas, as funções $p_i(t)$ para $i = 1, 2, 3$ são dadas por,

$$\begin{aligned} p_1'(t) &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial S} \\ &= \beta I (p_1 - p_2); \end{aligned} \quad (4.64)$$

$$\begin{aligned} p_2'(t) &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial I} \\ &= p_2 (\gamma - \beta S + u) - p_3 (\gamma + u) + \beta p_1 S - \kappa_0; \end{aligned} \quad (4.65)$$

$$\begin{aligned} p_3'(t) &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial R} \\ &= 0. \end{aligned} \quad (4.66)$$

As condições (de fronteira) para as funções adjuntas, $p_i(t)$ são dadas por

$$p_i(t_f) = 0, \text{ para } i = 1, 2, 3. \quad (4.67)$$

Portanto, o problema de valores na fronteira formado pelas equações do estado e do co-estado é dado pelo seguinte sistema de EDOs,

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{S} = -\beta SI \\ \dot{I} = \beta SI - \gamma I - uI \\ \dot{R} = \gamma I + uS \\ \dot{p}_1 = \beta I (p_1 - p_2) \\ \dot{p}_2 = p_2 (\gamma - \beta S + u) - p_3 (\gamma + u) + \beta p_1 S - \kappa_0 \\ \dot{p}_3 = 0 \end{array} \right. . \quad (4.68)$$

Com as condições de fronteira:

$$S(0) = 0.99, I(0) = 0.01, R(0) = 0, p_1(25) = 0, p_2(25) = 0 \text{ e } p_3(25) = 0. \quad (4.69)$$

Mais, a condição de otimalidade, $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u} = 0$ garante que:

$$u(t) = \frac{I(p_2 - p_3)}{2\kappa_2}. \quad (4.70)$$

Portanto,

$$u(t) = \min \left\{ \max \left\{ 0, \frac{I(p_2 - p_3)}{2\kappa_2} \right\}, u_{\max} \right\}. \quad (4.71)$$

4.6.2 Discretização do problema controlado só com tratamento pelo método de Euler

Vamos a seguir escrever o sistema de EDOs em (4.68), na forma discretizada pelo método de Euler pelo que,

$$\left\{ \begin{array}{l} S_{i+1} = S_i + h [(-\beta S_i I_i)] \\ I_{i+1} = I_i + h [(\beta S_i - \gamma - u_i) I_i] \\ R_{i+1} = R_i + h [\gamma + u_i] I_i \\ p_{1j-1} = p_{1j} - h [\beta I_j (p_1 - p_2)] \\ p_{2j-1} = p_{2j} - h p_{2j} [\gamma - \beta I_j + u_j] - p_{3j} (\gamma + u_j) + \beta p_{1j} S_j - \kappa_0 \\ p_{3j-1} = p_{3j} \end{array} \right. \quad (4.72)$$

Com as condições de fronteira referenciadas em (4.69), todavia o controlo u é atualizado pela expressão (4.71).

4.6.2.1 Aproximação numérica do problema controlado só com tratamento pelo método de Euler

Com $h = 0.25$ segue a solução do problema em análise (1), controlado só com tratamento como se apresentam os resultados nas figuras (4.25) e (4.26).

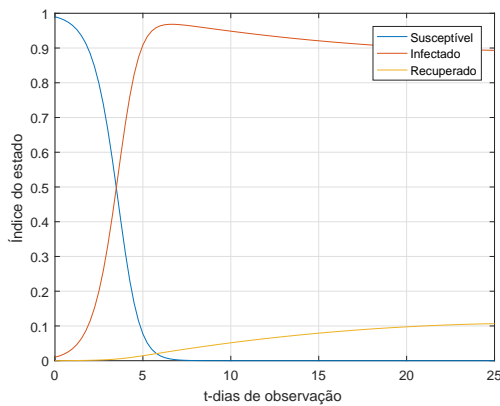


Figura 4.25: Modelo controlado só com tratamento, caso de $R_0 > 1$ pelo método de Euler

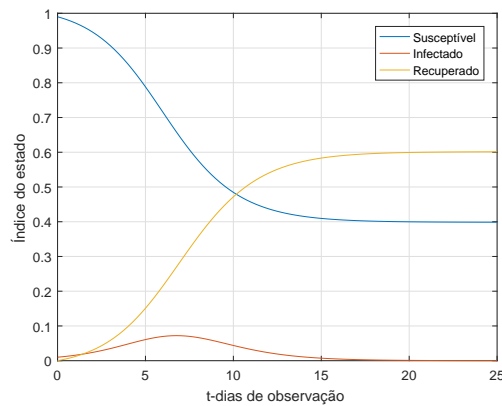


Figura 4.26: Modelo controlado só com tratamento, caso de $R_0 < 1$ pelo método de Euler

A aplicação do controlo só em tratamento os efeitos ficam além do esperado. Pois, considerando apenas as causas a doença vai-se propagar pelos indivíduos não imunes e podem atingir níveis alarmantes.

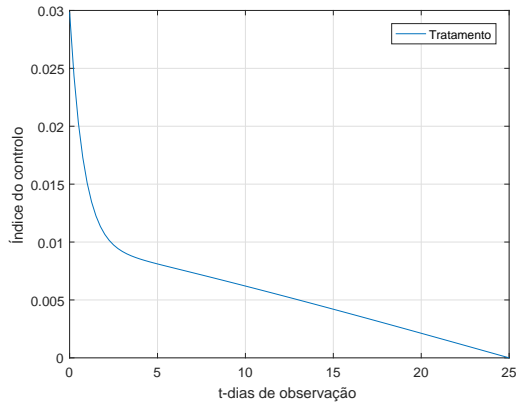


Figura 4.27: Nível de tratamento para o caso de $R_0 > 1$ utilizando Euler

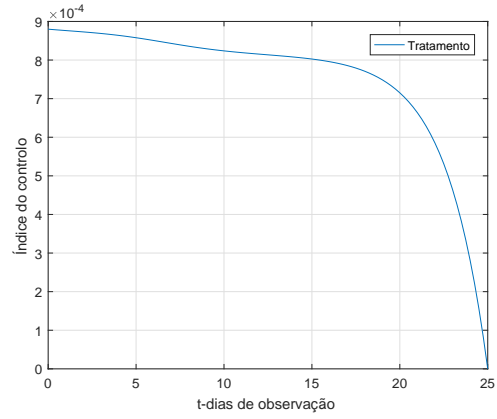


Figura 4.28: Nível de tratamento para o caso de $R_0 < 1$ utilizando Euler

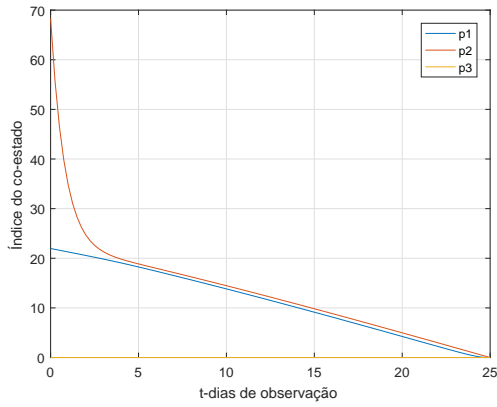


Figura 4.29: Co-estado das funções para caso em que $R_0 > 1$ em tratamento utilizando Euler

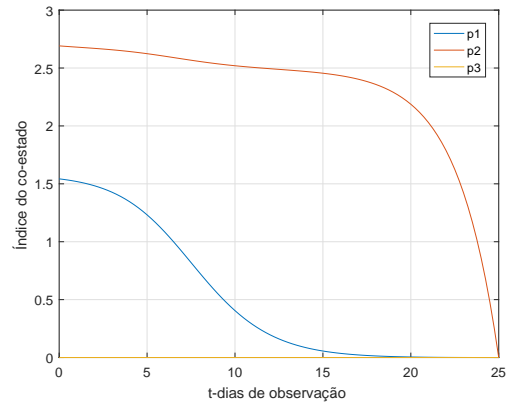


Figura 4.30: Co-estado das funções para caso em que $R_0 < 1$ em tratamento utilizando Euler

4.6.3 Discretização do problema controlado só com tratamento pelo método de RK

Vamos igualmente desenvolver a fórmula de RK para o problema de controlo ótimo só com tratamento.

$$\left\{ \begin{array}{l}
 k_{11} = -\beta S_i I_i \\
 k_{12} = (\beta S_i - \gamma - u_i) I_i \\
 k_{13} = [(\gamma + u_i) I_i] \\
 k_{21} = \{-\beta [S_i + hk_{11}] [(I_i + hk_{12})]\} \\
 k_{22} = [\beta (S_i + hk_{11}) - \gamma - u_{i+1}] [I_i + hk_{12}] \\
 k_{23} = \{(\gamma + u_{i+1}) [I_i + hk_{12}]\} \\
 S_{i+1} = S_i + \frac{h}{2} [k_{11} + k_{21}] \\
 I_{i+1} = I_i + \frac{h}{2} [k_{12} + k_{22}] \\
 R_{i+1} = R_i + \frac{h}{2} [k_{13} + k_{23}] \\
 \\
 k_{11} = \beta I_j [p_1 - p_2] \\
 k_{12} = p_{2j} [\gamma - \beta I_j + u_j] - p_{3j} (\gamma + u_j) + \beta p_{1j} S_j - \kappa_0 \\
 k_{13} = 0 \\
 k_{21} = (p_{1j} - hk_{11}) [\beta I_{j-1} + u_{1j-1}] - [p_{2j} - hk_{12}] \beta I_{j-1} - [p_{3j} - k_{13}] u_{1j-1} \\
 k_{22} = [p_{2j} - hk_{12}] [\gamma - \beta S_{j-1} + u_{2j-1}] - [p_{3j} - hk_{13}] [\gamma + u_{2j-1}] + [p_{1j} - hk_{11}] \beta S_{j-1} - \kappa_0 \\
 k_{23} = 0 \\
 p_{1j-1} = p_{1j} - \frac{h}{2} [k_{11} + k_{12}] \\
 p_{2j-1} = p_{2j} - \frac{h}{2} [k_{12} + k_{22}] \\
 p_{3j-1} = p_{3j} - \frac{h}{2} [k_{13} + k_{23}]
 \end{array} \right. \tag{4.73}$$

Com as condições dadas pela expressão (4.69) e o controlo pela (4.71).

4.6.3.1 Aproximação numérica do problema controlado só com tratamento pelo método de RK

Utilizando só o tratamento como controlo, do problema em análise pelo RK tem-se:

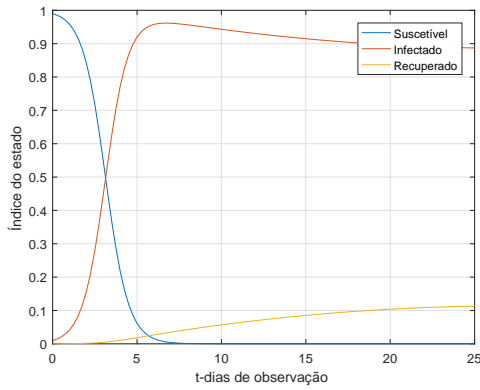


Figura 4.31: Modelo controlado só com tratamento caso de $R_0 > 1$ pelo método de RK

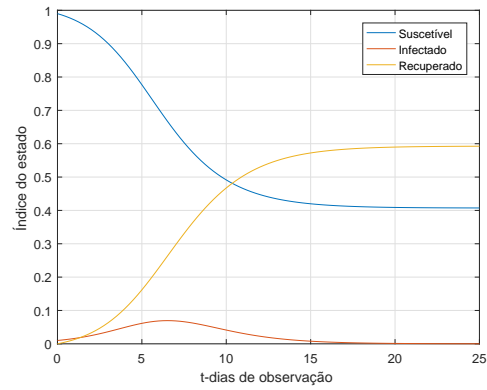


Figura 4.32: Modelo controlado só com tratamento caso de $R_0 < 1$ pelo método de RK

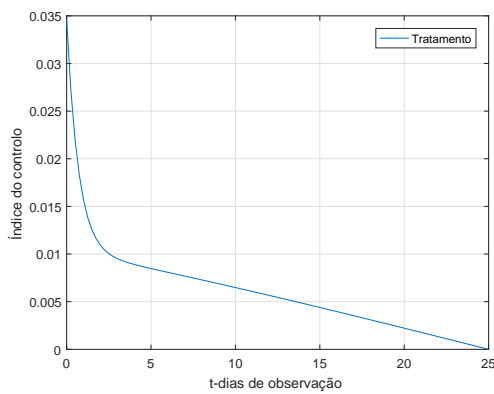


Figura 4.33: Nível de tratamento para o caso de $R_0 > 1$ utilizando RK

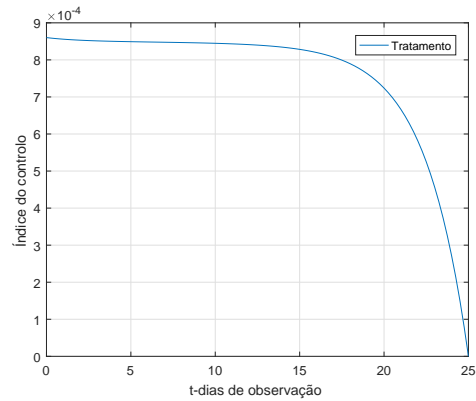


Figura 4.34: Nível de tratamento para o caso de $R_0 < 1$ utilizando RK

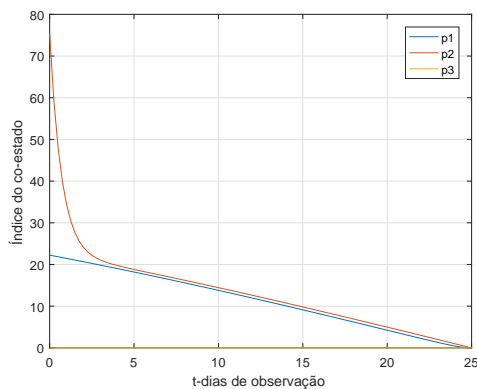


Figura 4.35: Co-estado das funções para caso em que $R_0 > 1$ em tratamento utilizando RK

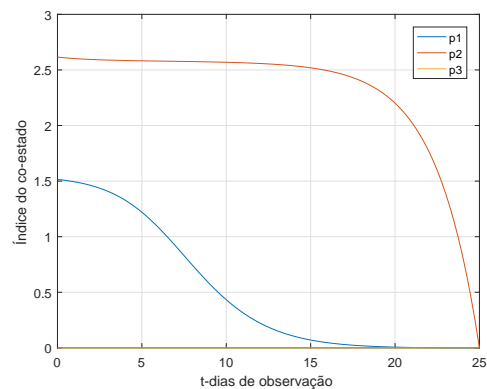


Figura 4.36: Co-estado das funções para caso em que $R_0 < 1$ em tratamento utilizando RK

Considerações finais

Diante do exposto nos capítulos nos capítulos anteriores, podemos inferir:

1. Sobre o modelo

- O nível de propagação da infecção pelos indivíduos e o grau de recuperação dos elementos do grupo já afectados pela doença são determinados pelos parâmetros β e γ , pois, quando maior for o β , maior será o número de novas infecções e vice-versa. Para tal, basta ver o valor de R_0 .

2. Sobre os métodos numéricos

- A precisão dos resultados obtidos por métodos numéricos depende muito do passo h . No caso do método de Euler, os resultados obtidos pela sua utilização são razoáveis só para valores muito pequenos de h . Verificamos que quando comparado com outros métodos os resultados obtidos assemelham-se a estes com valor de h consideravelmente menor, o que provoca um aumento do esforço computacional e torna o processo demasiado lento;

3. Sobre o modelo SIR controlado, conclui-se que:

- Com aplicação da vacinação (prevenção dos indivíduos susceptíveis) e tratamento (dos elementos infectados), obtém-se um melhor controlo da epidemia. Pois, por um lado evitam-se novos casos de infecção e por outro reduz-se o número de indivíduos já afectados pela doença;
- Portanto, se por um lado a prevenção (dos susceptíveis) impede o surgimento de novas infecções, por outro lado, só com o tratamento (dos indivíduos infectados) não é possível impedir a propagação do surto. Dependendo do valor do γ , o evento pode ainda se qualificar por epidémico, conforme valor de R_0 .

Trabalho futuro

O trabalho futuro será a aplicação do método Predictor-Corrector para resolução do sistema *SIR* e alguns problemas de controlo ótimo a ele associados.

Bibliografia

- [1] Ana C. C. Araújo *Modelação Matemática de Epidemias*, Instituto Politécnico de Bragança. 2015. 12
- [2] David J. Hunter, *Fundamentos da Matemática Discreta*, Rio de Janeiro: LTC, tradução de Essentials of Discrete Mathematics, 2011. 6
- [3] Aline M. R. de Barros *Modelos Matemáticos de Equações Diferenciais Ordinárias aplicados à epidemiologia* UFLA/MG. 5, 8
- [4] Francis Scheid, *Análise Numérica*, 2^a edição Lisboa, Portugal: McGraw Hill, tradução de António Cesar de Freitas, 1991. 15
- [5] Boyer, Carl B *História da Matemática*, Merzbach; tradução Eliza F. Gomide. São Paulo, 2003. 11, 15
- [6] Diana I. C. Rocha *Modelos Matemáticos Aplicados à Epidemiologia*, Universidades do Porto, Lisboa, Portugal. 2012. 5, 6
- [7] E. Boyce William e Diprima R. C. *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de valores de Contornos*, Rio de Janeiro: LTC, tradução Valéria de Magalhães Lorio 10^o, ed. Essentials of discrete mathematics, 2015. 6
- [8] Leah Edelstein-Keshet *Mathematical Models in Biology: In applied mathematics*, The SIAM, edition, New York, 1988. 6
- [9] Heitor Pina, *Métodos Numéricos*, McGraw-Hill, 1995. 19, 34
- [10] Maria Raquel Valença, *Análise numérica*, Universidade Aberta, 1996. 11, 15, 34
- [11] Márcia A. Gomes Ruggiero e Vera Lúcia da Rocha Lopes, *Cálculo Numérico: Aspectos teóricos e computacionais*, McGraw-hill, São Paulo, 1988. 19, 20
- [12] Harris Hancock. *Lectures on the calculus of variations (the Weierstrassian theory)*. Cincinnati, Cincinnati University Press, 1904. 30
- [13] Cristiana João Soares da Silva *Abordagem do Cálculo das variações e controlo Ótimo ao problema de Newton de resistência mínima*, Universidade de Aveiro serviços de documentação, 2005. 29, 30
- [14] James Silva *Introdução à teoria de controlo e programação Dinâmica*, 2008. 29, 31, 34
- [15] Suzanne Lenhart & John T. Workman, *Optimal Control applied to Biological Models*, Chapman & Hall /CRC, Mathematical and Computational Biological Systems, 2007. 30, 37
- [16] David G. Hull. *Optimal control theory for applications*. Mechanical Engineering. Springer, 2003. 30, 31, 34

- [17] Oskar Bolza. *Lectures on the calculus of variations*, volume XIV of *The Decennial publications, second series*. The University of Chicago Press, 1904. 30
- [18] H.J. Sussmann and J.C. Willems. 300 years of optimal control: from the brachystochrone to the maximum principle. *Control Systems, IEEE*, 17(3):32–44, 1997. 29
- [19] L.V. Pontryagin, V.G. Boltyanskii, R.V. Gamkrelidze, and E.F. Mishchenko. *The Mathematical Theory of Optimal Processes (Classics of Soviet Mathematics)*. Fizmatgiz, Moscow, Russia (in Russian). Interscience Publishers, New York, New York (in English), 1962. 30
- [20] R. Bellman. The theory of dynamic programming. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 60:503–516, 1954. 30