

# Estudos Numéricos em um Modelo SIR Fracionário

Noemi Zeraick Monteiro<sup>1</sup>, Sandro Rodrigues Mazorche<sup>2</sup>  
DM/UFJF, Juiz de Fora, MG

**Resumo.** Em continuidade a [1], apresentamos dificuldades e resultados em um modelo epidemiológico SIR com a derivada de Caputo à esquerda, tendo foco nos exemplos numéricos. Em seguida, geramos análises numéricas que permitem um entendimento mais aprofundado do modelo e do efeito individual das ordens e parâmetros. Também chamamos a atenção para o problema de ajustar apenas a curva  $I$  no estudo de dados reais. Como fruto destes trabalhos, é esperado que estejam cada vez mais claros os cuidados necessários à utilização de modelos fracionários compartimentais.

**Palavras-chave.** Modelo SIR, Derivada de Caputo, Análise Numérica.

## 1 Introdução

O Cálculo de Ordem Arbitrária, comumente chamado Cálculo Fracionário ou Fracional, tem demonstrado grande utilidade na modelagem matemática. Além de sua relação com distribuições de cauda pesada, como a de Mittag-Leffler, a não localidade dos operadores mais utilizados permite considerar de forma explícita a dependência de estágios anteriores, relacionada ao “efeito memória”. Geralmente, os modelos são obtidos substituindo derivadas inteiras pelas de ordem arbitrária. Modelos compartimentais, em particular, têm sido amplamente estudados com a derivada fracionária de Caputo. Um exemplo muito conhecido é o modelo epidemiológico SIR:

$${}^C D_{0+}^\alpha S(t) = \mu N - \beta S(t)I(t)/N - \mu S(t), \quad (1)$$

$${}^C D_{0+}^\alpha I(t) = \beta S(t)I(t)/N - \gamma I(t) - \mu I(t), \quad (2)$$

$${}^C D_{0+}^\alpha R(t) = \gamma I(t) - \mu R(t). \quad (3)$$

Em [1], ilustramos algumas dificuldades com essa prática. Em particular, ordens distintas nos compartimentos levam ao desequilíbrio da massa (oscilação inexplicável da população). Com as ordens iguais em todos os compartimentos, a população  $N$  se mantém constante [1], porém não conseguimos uma construção física que permita trocar as ordens das derivadas clássicas, ainda que as unidades sejam corrigidas. O comportamento do modelo é modificado essencialmente. Por exemplo, o sinal da derivada fracionária deixa de valer como indicativo de comportamento monótono. Consequentemente, temos também trabalhado com um modelo construtivo no qual as derivadas fracionárias decorrem de leis potenciais especiais nas funções de infectividade e remoção ([2], [3]).

Porém, aqui, o objetivo é um entendimento mais aprofundado de modelos correlatos a (1)-(3) e do efeito individual das ordens e parâmetros. Como dito, não conseguimos justificar por completo a utilização desse tipo de modelagem. Todavia, o entendimento de seu comportamento por meio de estudos analíticos e numéricos ilustra suas potencialidades e limitações, clarificando essa utilização.

<sup>1</sup>nzmonteiro@ice.ufjf.br

<sup>2</sup>sandro.mazorche@ufjf.edu.br

## 2 Resultados preliminares

Neste trabalho, consideramos os parâmetros de (1)-(3) escolhidos de maneira que as unidades estejam balanceadas, como elevados a  $\alpha$  ou multiplicados por constantes de tempo. É importante lembrar que, nesse caso, não possuem o significado físico do modelo SIR original. Para facilitar a notação e as generalizações, eles são escritos simplesmente como  $\gamma, \beta$  e  $\mu$ . Se  $\alpha = 1$ , os parâmetros indicam, respectivamente, a taxa de remoção, a infectividade e a dinâmica vital.

O número básico de reprodução é o número médio de infecções secundárias que ocorrem quando um infeccioso é introduzido em uma população completamente suscetível. Na ausência de definições precisas para os parâmetros, não construímos o  $\mathfrak{R}_0$  com esse embasamento teórico, mas sim como um valor que determina a viabilidade do equilíbrio endêmico e a mudança de estabilidade do equilíbrio livre de doença, como costuma ocorrer nos modelos clássicos [4]. Para o sistema (1)-(3), definimos  $\mathfrak{R}_0 = \beta/(\gamma + \mu)$ . Se  $\mu > 0$ , apresentamos os seguintes Teoremas:

**Teorema 2.1.** *O equilíbrio livre de doença  $EF = (N, 0, 0)$  é o único equilíbrio viável do sistema (1)-(3) e é globalmente assintoticamente estável se  $\mathfrak{R}_0 < 1$ .*

**Teorema 2.2.** *O equilíbrio endêmico  $EE = \left( \frac{(\gamma + \mu)N}{\beta}, \frac{\mu N}{\gamma + \mu} - \frac{\mu N}{\beta}, \frac{\gamma N}{\gamma + \mu} - \frac{\gamma N}{\beta} \right)$  é viável se  $\mathfrak{R}_0 > 1$  e é globalmente assintoticamente estável se  $I_0 > 0$ .*

A estabilidade local pode ser analisada através dos resultados de Matignon [5]. Já para a estabilidade global, alguns autores utilizam a generalização da teoria de Lyapunov. Uma das ferramentas para tanto é o Lema de Barbalat. Contudo, como pode ser verificado em [6], existem contraexemplos que demonstram a falibilidade do Lema para  $0 < \alpha < 1$ . Mas, se os resultados de [7] forem combinados com os resultados de estabilidade local, obtemos os Teoremas apresentados.

Se  $\mu = 0$ , todos os pontos do conjunto  $\{(S, 0, R), S, R \geq 0, S + R = N\}$  são equilíbrios do sistema (1)-(3). É possível demonstrar o seguinte resultado:

**Teorema 2.3.** *Para o sistema (1)-(3) com  $\mu = 0$ , temos  $\liminf_{t \rightarrow \infty} I(t) = 0$ .*

Nesse caso, o que obtemos nas simulações é uma mudança na região de estabilidade dos equilíbrios. Em uma grande porção do plano  $(S, I)$ , notamos que  $\lim_{t \rightarrow \infty} S(t) = \gamma N/\beta$ , ou seja, o equilíbrio endêmico é tal como no Teorema 2.2, com  $\mu = 0$ .

**Observação 2.1.** *Para o caso inteiro sem dinâmica vital, o equilíbrio  $(S, I, R)_\infty$  é calculado através da equação separável obtida ao trabalharmos com  $dS/dR$  [3]. Essa passagem não pode ser realizada para ordens não inteiras.*

## 3 Exemplos

Ainda no viés de pensar “o que se perde, o que se ganha e o que se transforma” [1], exibimos, nesta Seção, exemplos que revelam importantes diferenças entre os modelos clássico e fracionário.

### 3.1 Sem dinâmica vital

A Figura 1 ilustra o plano  $(S, I)$ , onde é possível observar diversas características que não persistem ao mudarmos a ordem da derivada, como a monotonicidade, a região de estabilidade do equilíbrio  $(S, I, R)_\infty$ , em preto, e a condição do ponto de pico. O problema da não monotonicidade não é resolvido ao balancearmos as unidades dos parâmetros inicialmente considerados: sendo as ordens iguais, essas correções apenas os transformam numericamente em outras constantes.

Notamos que os pontos de pico, em azul, não seguem mais a relação  ${}^C D_{0+}^\alpha I = 0$ , variando conforme  $\alpha$ . A trajetória externa equivale ao modelo tradicional e o ponto vermelho indica  $(S, I) = (\gamma N/\beta, 0)$ . Entretanto, como vemos na Figura 2, o equilíbrio não é globalmente estável.

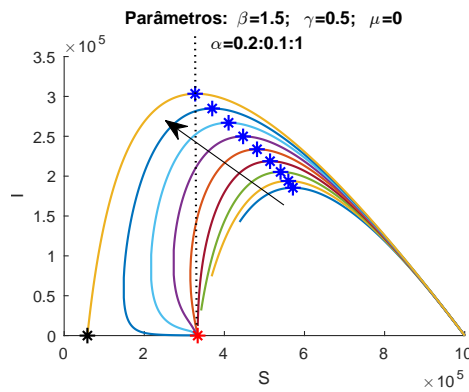


Figura 1: Trajetórias para  $I(0) = 1$ .

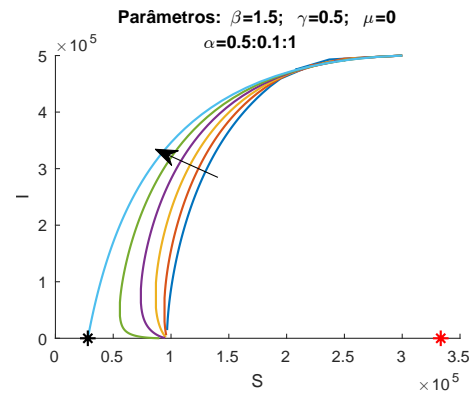


Figura 2: C.I.  $(0.3, 0.5, 0.2)N$ .

### 3.2 Com dinâmica vital

A Figura 3 considera a dinâmica vital. Nessa condição, o equilíbrio endêmico é o mesmo do caso inteiro, como visto no Teorema 2.2; porém, o ponto de pico muda. A Figura 4 exibe um zoom da região próxima ao equilíbrio endêmico, onde podemos notar uma diferença essencial entre os comportamentos do caso clássico e do caso fracionário: No caso inteiro, a órbita realiza uma aproximação assintótica em forma de espiral infinita, em direção ao ponto de equilíbrio, sendo este o centro da espiral. Já no caso fracionário, não temos a órbita clássica para sistemas autônomos, mas sim um número finito de oscilações e a possibilidade de autointersecções, realizando uma aproximação assintótica em forma de espiral cujo centro se desloca do ponto de equilíbrio, passando então a um decaimento sem oscilação em direção a ele. Essa transição entre oscilações infinitas e oscilações finitas com decaimento é comum na passagem de modelos clássicos a fracionários. Por exemplo, para  $1 < \alpha < 2$ , a função de Mittag-Leffler  $E_\alpha(-t^\alpha)$  exibe um número ímpar de zeros e um decaimento, enquanto, para  $\alpha = 2$ ,  $E_2(-t^2) = \cos(t)$  exibe um número infinito de zeros [8].

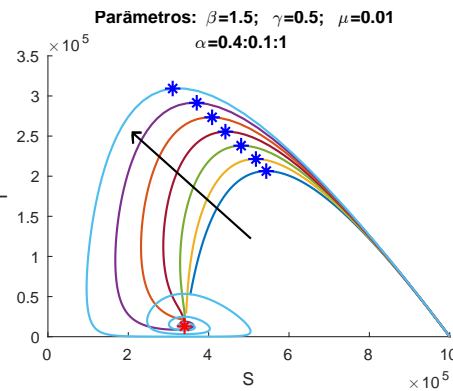


Figura 3: Trajetórias com din. vital.

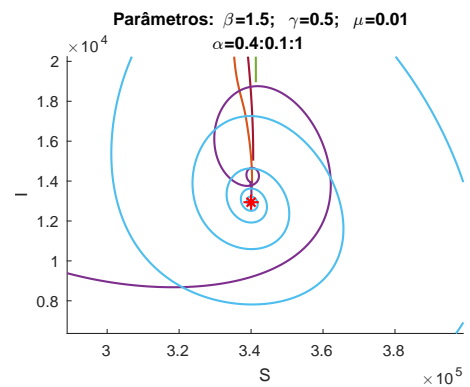


Figura 4: Zoom  $EE$ .

A presença da dinâmica vital permite oscilações mesmo no caso inteiro. Porém, tendo em vista a Seção anterior, as oscilações presentes no caso fracionário não são provenientes apenas da dinâmica vital, mas também do fato de o sinal da derivada não indicar o comportamento monótono. Ressaltamos que, se  $\mathfrak{R}_0 < 1$ , o equilíbrio livre de doença é assintoticamente estável, como visto no Teorema 2.1.

### 3.3 Não localidade

Embora o modelo SIR de ordem inteira possua a propriedade da invariância de soluções por translação no tempo, isso não ocorre aqui. Como exemplo, consideramos novamente  $N = 1000000$  e condições iniciais  $S(0) = N - 1$ ,  $I(0) = 1$  e  $R(0) = 0$ . A solução numérica fornece  $S(30) = 209310$ ,  $I(30) = 24375$  e  $R(30) = 766315$ . Tomando, agora, esta condição inicial, reiniciamos o modelo.

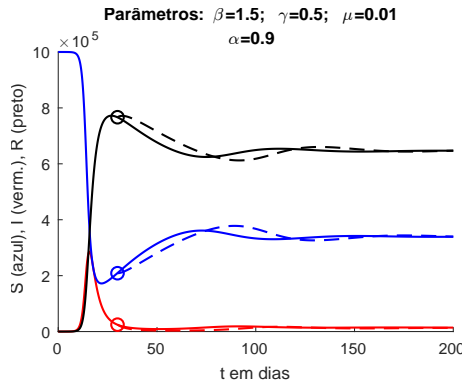


Figura 5: Mudança de solução.

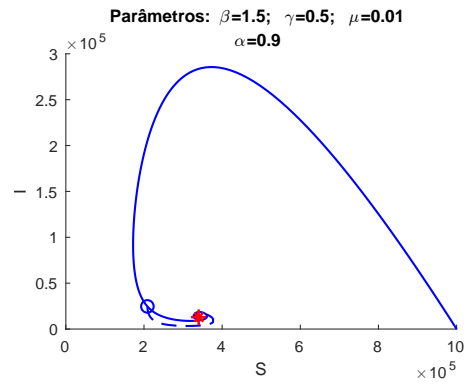


Figura 6: Mudança na trajetória.

A Figura 5 ilustra a mudança da solução, onde o tracejado corresponde à solução a partir do tempo  $t = 30$ . Na Figura 6, temos as trajetórias equivalentes. Uma observação interessante é a de que, embora as soluções se modifiquem, o ponto de equilíbrio permanece o mesmo [7].

## 4 Análise de parâmetros

Finalizados os principais exemplos, realizamos uma análise de parâmetros. Primeiro, estudamos o efeito da variação de  $\alpha$ . Observamos que, quanto maior  $\alpha$ , isto é, quanto menor a dependência dos estágios anteriores, maior e mais rápido é o pico da epidemia. Os suscetíveis diminuem mais rápido conforme  $\alpha$  cresce, assim como os removidos aumentam mais rapidamente. É importante notar que diminuir o  $\alpha$  aumenta o efeito de cauda pesada na distribuição dos infecciosos.

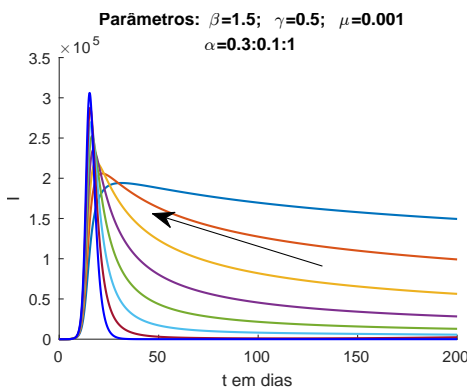


Figura 7: Efeito de  $\alpha$  em  $I$ .

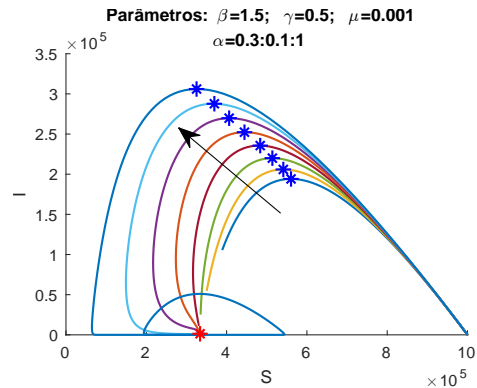


Figura 8: Efeito de  $\alpha$  -  $(S, I)$ .

A Figura 8 ilustra o equilíbrio dado no Teorema 2.2 para diferentes ordens. Assim, as trajetórias compartilham o mesmo equilíbrio, sendo a trajetória para  $\alpha = 1$  a mais externa. Observamos

também que a “velocidade” da trajetória diminui conforme  $\alpha$ , ou seja, as trajetórias para  $\alpha$  pequeno demoram mais a se aproximar do ponto de equilíbrio. Os pontos azuis ressaltam o pico do compartimento  $I$  para cada trajetória.

Em seguida, estudamos o efeito da variação do parâmetro  $\beta$ . Notamos que o aumento de  $\beta$  faz com que o pico ocorra mais cedo e seja maior, porém mais agudo. Todo o modelo fica mais rápido conforme  $\beta$  aumenta, o que faz sentido, pois, no modelo clássico, o parâmetro  $\beta$  se relaciona à infectividade. A Figura 10 ilustra o equilíbrio dado no Teorema 2.2 para diferentes parâmetros  $\beta$ . Como o equilíbrio depende de  $\beta$ , ele muda ao longo das simulações, sendo a trajetória para  $\beta = 2.1$  a mais externa. Ela corresponde ao maior pico.

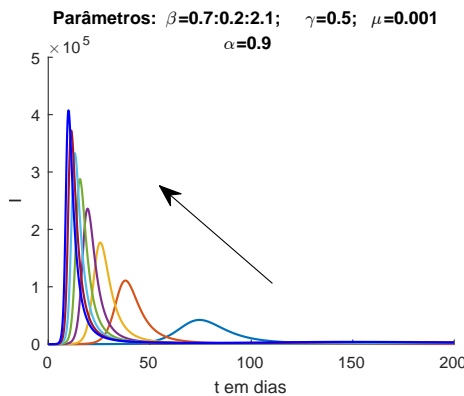


Figura 9: Efeito de  $\beta$  em  $I$ .

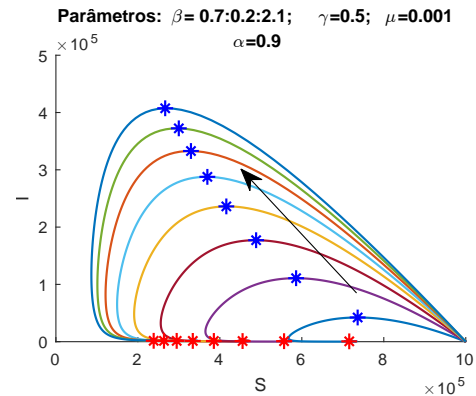


Figura 10: Efeito de  $\beta - (S, I)$ .

Adiante, estudamos a variação do parâmetro  $\gamma$ . O aumento de  $\gamma$  faz com que o pico seja menor e mais lento, assim como diminui a velocidade das ondas dos compartimentos  $S$  e  $R$ . Logo, a epidemia torna-se menos expressiva conforme  $\gamma$  aumenta, o que faz sentido, pois, no modelo clássico, o parâmetro  $\gamma$  se relaciona à remoção. A Figura 12 ilustra o equilíbrio dado no Teorema 2.2 para diferentes parâmetros  $\gamma$ , sendo a trajetória para  $\gamma = 0.8$  correspondente ao menor pico.

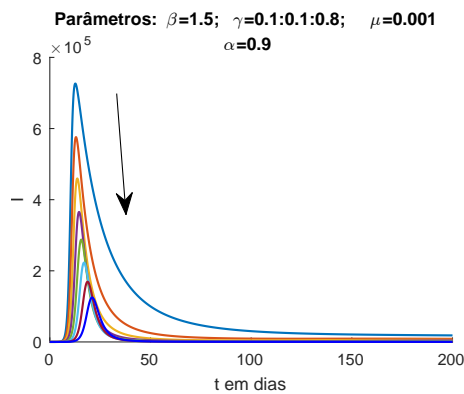


Figura 11: Efeito de  $\gamma$  em  $I$ .

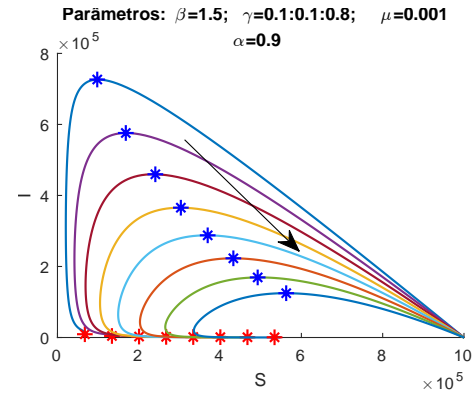


Figura 12: Efeito de  $\gamma - (S, I)$ .

Finalmente, estudamos o efeito da variação do parâmetro  $\mu$ . Notamos que o aumento de  $\mu$  faz com que a cauda direita do compartimento  $I$  se torne mais densa, assim como aumenta a velocidade na qual os compartimentos  $S$  e  $R$  se estabilizam após o pico. A Figura 14 ilustra o equilíbrio dado no Teorema 2.2 para diferentes parâmetros  $\mu$ . As trajetórias são muito próximas até o pico, mas aumentar o  $\mu$ , como vimos, aumenta o número de infecciosos no equilíbrio.

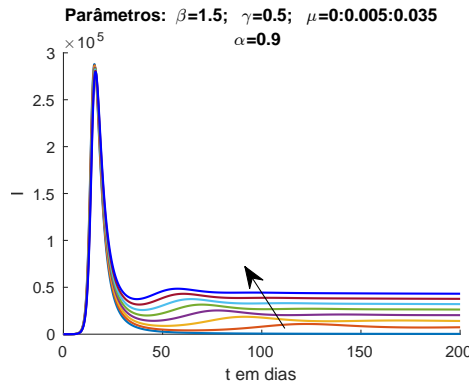


Figura 13: Efeito de  $\mu$  em  $I$ .

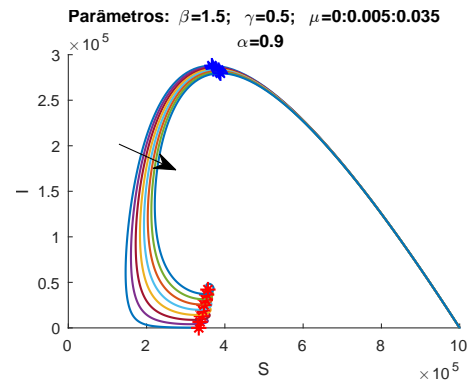


Figura 14: Efeito de  $\mu$  -  $(S, I)$ .

Finalizamos a Seção lembrando o objetivo de um entendimento mais aprofundado do código e das equações, como um objeto matemático. Não conseguimos justificar epidemiologicamente a utilização do modelo (1)-(3); todavia, a análise realizada também auxilia no ajuste de parâmetros.

## 5 Só a curva $I$ importa?

Nesta Seção, chamamos a atenção para o problema de otimizar apenas uma das curvas aos dados reais, em geral a curva  $I$ . Por exemplo, no artigo [9], há a otimização da curva  $I$  de um modelo SIR, sem dinâmica vital, aos dados acumulados de 45 dias da COVID-19 no Paquistão, cuja população total foi considerada  $N = 212200000$ . Pela ausência dos dados dos removidos quando o artigo foi escrito, parecem ter considerado a população exposta estimada como a quantidade inicial de infectados. No modelo do artigo, os parâmetros estão elevados a  $\alpha$ .

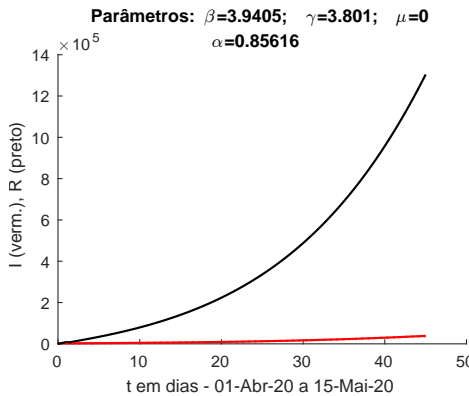


Figura 15: Curvas  $I$  e  $R$ .

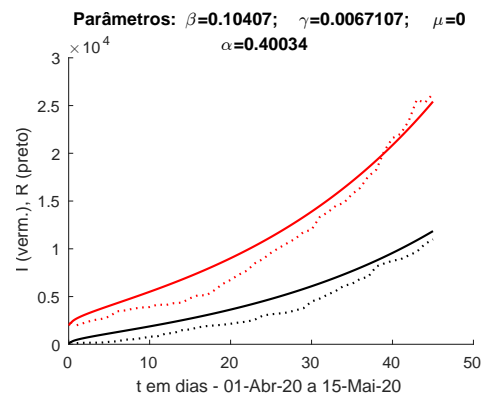


Figura 16: Otimização para ambas as curvas.

Comparando apenas a curva  $I$ , conforme os autores relatam, o modelo se ajusta com grande acurácia se  $\beta = 3.9405, \gamma = 3.801, \alpha = 0.85616$ . Entretanto, como podemos verificar no gráfico da Figura 15, essa otimização implica em um total de  $I(45) + R(45) = 1342884$  pessoas infectadas até 15 de maio, o que supera os casos reportados em mais de 30 vezes. Além disso, o  $\mathfrak{R}_0$ , com valor 1.13, está muito abaixo do indicado. Com efeito, até maio de 2020, o  $\mathfrak{R}_0$  para a COVID-19 era estimado entre 2 e 4 [10]. Hoje, tem-se dados dos removidos neste período, então podemos otimizar as duas curvas, obtendo um resultado bastante diferente, conforme Figura 16. Nesse caso,  $\mathfrak{R}_0 = 3.22$ , o que é esperado.

É importante lembrar uma vez mais que não obtivemos significados epidemiológicos precisos para as ordens e parâmetros de (1)-(3). Ainda, o ajuste fino das curvas é possível apenas para poucos dias, pois o modelo não consegue capturar períodos de contenção e relaxamento de medidas, assim como não captura ondas. Também deve-se levar em consideração que esta Seção não entra na questão de subnotificações, apenas ilustra que o ajuste de uma das curvas não implica no ajuste do modelo completo.

## 6 Considerações Finais

A busca por um modelo SIR fracionário construtivo, com bases epidemiológicas mais claras, nos levou a modelos construídos por Passeios Aleatórios de Tempo Contínuo (PATC), com a utilização de funções de Mittag-Leffler [3]. Porém, sendo o tipo de modelagem mais comum a *ad hoc*, na qual as derivadas de ordem inteira são substituídas por derivadas de ordem arbitrária, geralmente a de Caputo, procuramos aqui um entendimento mais aprofundado do modelo, suas ordens e parâmetros. Assim, em continuação a [1], ampliamos o entendimento do modelo (1)-(3), deixando claros os cuidados necessários à utilização de modelos fracionários compartimentais.

Ainda, ilustramos que o ajuste dos parâmetros tendo em vista apenas a curva  $I$  pode comprometer a aplicação de um modelo compartimental, incluindo o estudado em [3]. O sucesso das otimizações, nesse caso, depende não apenas do modelo escolhido, mas também de um banco de dados que não reporte somente o total de infectados ou acumulados.

## Agradecimentos

Ao programa de Mestrado Acadêmico em Matemática da UFJF e ao programa de Doutorado em Modelagem Computacional da UFJF.

## Referências

- [1] S. R. Mazorche and N. Z. Monteiro, “Modelos epidemiológicos fracionários: o que se perde, o que se ganha, o que se transforma?,” in *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics*, (Online), CNMAC, Setembro 2021.
- [2] C. N. Angstmann, B. I. Henry, and A. V. McGann, “A fractional-order infectivity and recovery SIR model,” *Fractal and Fractional*, vol. 1, no. 1, p. 11, 2017.
- [3] N. Z. Monteiro and S. R. Mazorche, “Fractional derivatives applied to epidemiology,” *Trends in Computational and Applied Mathematics*, pp. 157–177, 2021.
- [4] H. W. Hethcote, “The mathematics of infectious diseases,” *SIAM review*, vol. 42, no. 4, 2000.
- [5] D. Matignon, “Stability results for fractional differential equations with applications to control processing,” in *Computational engineering in systems applications*, vol. 2, (Beijing), Lille, France, 1996.
- [6] J. A. Gallegos, M. A. Duarte-Mermoud, N. Aguila-Camacho, and R. Castro-Linares, “On fractional extensions of Barbalat lemma,” *Systems & Control Letters*, vol. 84, pp. 7–12, 2015.
- [7] J. A. Gallegos and M. A. Duarte-Mermoud, “On the Lyapunov theory for fractional order systems,” *Applied Mathematics and Computation*, vol. 287, pp. 161–170, 2016.
- [8] F. Mainardi, “Fractional relaxation-oscillation and fractional diffusion-wave phenomena,” *Chaos, Solitons & Fractals*, vol. 7, no. 9, pp. 1461–1477, 1996.
- [9] A. S. Alshomrani, M. Z. Ullah, and D. Baleanu, “Caputo SIR model for COVID-19 under optimized fractional order,” *Advances in Difference Equations*, vol. 2021, no. 1, pp. 1–17, 2021.
- [10] W. H. Organization, “What do we know about SARS-CoV-2 and COVID-19? (update-28),” 2020.