

TRAVAIL PERSONNEL
Processus Stochastiques en Physique
PHYS-F446

Extinctions dans un modèle de prédation cyclique
de type ” pierre papier ciseaux”

Cédric SCHOONEN

2 juin 2020

Table des matières

1	Introduction	2
2	Dynamique macroscopique	2
3	Dynamiques micro et mésoscopiques	3
4	Développement de Kramers-Moyal de l'équation maîtresse	6
5	Réduction à un processus radial	7
6	Problème de première sortie d'un intervalle	10
7	Calcul numérique du temps moyen d'extinction	13
8	Simulation du système	16

1 Introduction

Dans ce travail, nous nous intéressons à un modèle de prédation de type "pierre papier ciseaux". Dans ce modèle, trois espèces A, B, C cohabitent et forment un réseau de prédation cyclique. Nous pouvons représenter les interactions du modèles par les réactions



où le paramètre k est la fréquence des interactions entre deux individus. Le nombre total d'individus $N = A + B + C$ est conservé dans cette dynamique. Nous avons ici symbolisé le nombre d'individus de chaque espèce par le même symbole A, B ou C employé pour désigner l'espèce.

Le sujet que nous allons développer porte sur les extinctions qui se produisent dans ce modèle lorsque le nombre d'individus est fini. Dans la limite macroscopique, la présence d'une grandeur conservée fait que l'extinction d'une espèce est impossible. Cependant, l'évolution stochastique d'un nombre fini d'individu mène systématiquement à une extinction, après un temps moyen linéaire en le nombre d'individus.

Nous allons commencer par exposer les détails de la dynamique du système à différents niveaux de description. Ensuite, nous allons chercher à calculer le temps moyen d'extinction dans ce modèle. Pour cela, nous allons d'abord réduire le processus stochastique à une variable en utilisant une méthode de moyennage, en suivant la méthode employée dans [1]. Ensuite, nous allons utiliser le formalisme des équations de Fokker-Planck pour calculer le temps d'extinction comme un temps de première sortie d'une région de l'espace des phases. Pour supporter les résultats obtenus, nous les comparerons avec des simulations que nous détaillerons à la fin de ce travail.

2 Dynamique macroscopique

Dans la limite macroscopique, i.e. $N \rightarrow \infty$, le système obéit aux équations dynamiques

$$\begin{aligned} \dot{a} &= ka(b - c), \\ \dot{b} &= kb(c - a), \\ \dot{c} &= kc(a - b), \end{aligned} \tag{2}$$

où nous avons noté en lettre minuscule la fraction d'individus de chaque espèce, i.e. $a = A/N$. La conservation du nombre d'individus montre que l'espace des phases

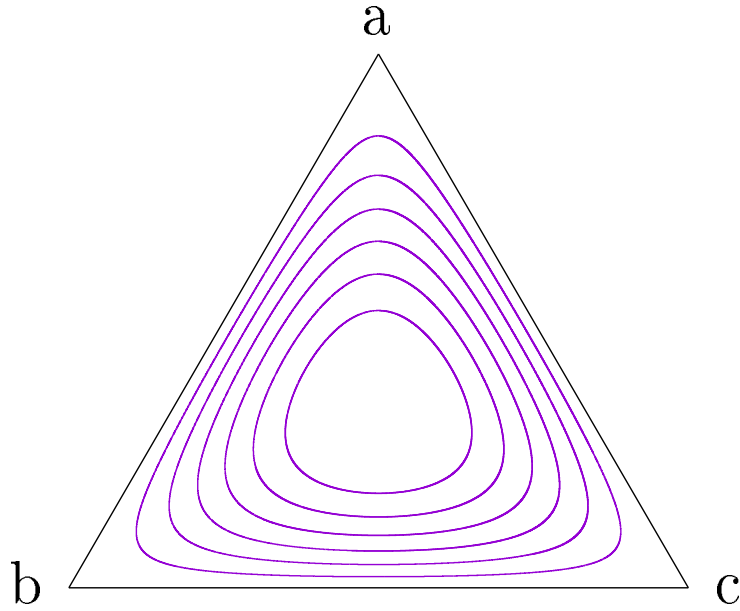


FIGURE 1 – Trajectoires macroscopiques dans l'espace des phases du système.

est contenu dans le plan : $a + b + c = 1$. Les trajectoires engendrées par les équations 2 sont représentées sur la figure 1.

La dynamique macroscopique possède deux invariants, ce qui la rend intégrable exactement. Le premier est trivial et est donné par la loi de conservation $a + b + c = 1$. Le second est le produit $\rho = abc$, en effet

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} &= \dot{a}bc + a\dot{b}c + ab\dot{c}, \\ &= ka(b - c) + kb(c - a) + kc(a - b), \\ &= 0. \end{aligned} \tag{3}$$

3 Dynamiques micro et mésoscopiques

La dynamique microscopique est un processus de Markov pour lequel un état du système $\{A, B, C\}$ subit les transitions

$$\begin{aligned} \{A, B, C\} &\longrightarrow \{A + 1, B - 1, C\} && \text{fréquence} = k AB, \\ \{A, B, C\} &\longrightarrow \{A, B + 1, C - 1\} && \text{fréquence} = k BC, \\ \{A, B, C\} &\longrightarrow \{A - 1, B, C + 1\} && \text{fréquence} = k CA. \end{aligned} \tag{4}$$

L'équation maîtresse associée est

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P_t(A, B, C) = & k(A-1)(B+1) P_t(A-1, B+1, C) - kAB P_t(A, B, C) \\ & + k(B-1)(C+1) P_t(A, B-1, C+1) - kBC P_t(A, B, C) \\ & + k(C-1)(A+1) P_t(A+1, B, C-1) - kCA P_t(A, B, C). \end{aligned} \quad (5)$$

Au contraire de la dynamique macroscopique déterministe, l'évolution microscopique ne préserve pas l'invariant $\rho = abc = ABC/N^3$. Le caractère aléatoire des trajectoires microscopiques mène finalement à l'extinction d'une des trois espèces, qui est irréversible.

En développant l'équation maîtresse en puissances de $\epsilon = 1/N$, on déduit l'équation de Fokker-Planck

$$\partial_t \Psi_t = -\partial_i(\mu_i \Psi_t) + \partial_i \partial_j (D_{ij} \Psi_t), \quad (6)$$

où $\Psi_t(a, b, c)$ est la densité de probabilité pour les fractions a, b, c ,

$$\Psi_t(a, b, c) = N^3 P_t(A, B, C) = \epsilon^{-3} P_t(a/\epsilon, b/\epsilon, c/\epsilon). \quad (7)$$

Cette équation décrit la dynamique du système à une échelle intermédiaire, que l'on pourrait qualifier de "mésoscopique". L'équation de Fokker-Planck s'obtient dans la limite de grand N , mais nous gardons encore des puissances de $1/N$ dans le terme de diffusion. Cette description garde donc le caractère aléatoire des trajectoires microscopiques. Ce niveau de description est approprié pour étudier des phénomènes d'origine stochastique, comme l'extinction d'une des espèces du modèle, en ayant la possibilité d'employer les outils de calcul différentiel, qui s'appliquent à une description en variables continues.

Il est important de souligner que les échelles de temps apparaissant dans l'équation maîtresse et dans l'équation de Fokker-Planck ne sont pas les mêmes. Pour formuler l'équation de Fokker-Planck ainsi, il est nécessaire d'absorber les paramètres k et N dans la variable temporelle (voir section 4, eq 19).

Les quantités μ_i et D_{ij} sont respectivement le vecteur de dérive et la matrice de diffusion. Le vecteur de dérive est donné par

$$\boldsymbol{\mu}^T = [a(b-c) \quad b(c-a) \quad c(a-b)] \quad (8)$$

et la matrice de diffusion est

$$\mathbf{D} = \frac{\epsilon}{2} \begin{bmatrix} a(b+c) & -ab & -ac \\ -ab & b(c+a) & -bc \\ -ac & -bc & c(a+b) \end{bmatrix}. \quad (9)$$

L'équation différentielle stochastique associée est, selon la convention de Itô,

$$d\mathbf{r}_t = \boldsymbol{\mu}(\mathbf{r}_t) dt + \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}_t) d\mathbf{W}_t, \quad (10)$$

où $\mathbf{r}_t = (a, b, c)$, $\mathbf{D} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}^T$, et \mathbf{W}_t est un processus de Wien de moyenne nulle et de variance unité.

À partir de l'équation de Fokker-Planck (eq 6), nous pouvons calculer l'évolution de la moyenne de l'invariant déterministe $\rho = abc \geq 0$. On constate que celui-ci ne peut que décroître, menant inéluctablement les trajectoires sur les bords de l'espace des phase, où $\rho = 0$. En effet,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle\rho\rangle &= \frac{d}{dt} \int abc \Psi_t(a, b, c) da db dc \\ &= \int abc \partial_t \Psi_t(a, b, c) da db dc \\ &= - \int abc \partial_i (\mu_i \Psi_t) da db dc + \int abc \partial_i \partial_j (D_{ij} \Psi_t) da db dc \\ &= \int \partial_i (abc) \mu_i \Psi_t da db dc + \int \partial_i \partial_j (abc) D_{ij} \Psi_t da db dc, \end{aligned} \quad (11)$$

la dernière ligne s'obtenant en intégrant par parties. La première intégrale correspond à l'évolution déterministe, qui doit s'annuler pour retrouver l'invariance de ρ . On vérifie bien que

$$\partial_i (abc) \mu_i = bc a(b - c) + ac b(c - a) + ab c(a - b) = 0. \quad (12)$$

La deuxième intégrale correspond à l'évolution stochastique, pour laquelle

$$\partial_i \partial_j (abc) D_{ij} = c(-ab) + b(-ac) + c(-ab) + a(-bc) + b(-ac) + a(-bc) = -6abc. \quad (13)$$

Ainsi,

$$\frac{d}{dt}\langle\rho\rangle = -6 \int abc \Psi_t da db dc = -6\langle\rho\rangle < 0. \quad (14)$$

4 Développement de Kramers-Moyal de l'équation maîtresse

On commence par exprimer l'équation maîtresse (eq 5) avec les variables "mésoscopiques" Ψ_t, a, b, c et $\epsilon = 1/N$. On obtient

$$\begin{aligned} \epsilon^3 \partial_t \Psi_t(a, b, c) = & k \left(\frac{a}{\epsilon} - 1 \right) \left(\frac{b}{\epsilon} + 1 \right) \epsilon^3 \Psi_t(a - \epsilon, b + \epsilon, c) \\ & - k \frac{a}{\epsilon} \frac{b}{\epsilon} \epsilon^3 \Psi_t(a, b, c) + p.c. , \end{aligned} \quad (15)$$

où nous avons symbolisé par *p.c.* les termes issus de permutations cycliques par rapport à a, b, c dans les termes déjà notés. Cette équation peut être réarrangée en

$$\frac{\epsilon^2}{k} \partial_t \Psi_t(a, b, c) = (a - \epsilon)(b + \epsilon) \Psi_t(a - \epsilon, b + \epsilon, c) - ab \Psi_t(a, b, c) + p.c. . \quad (16)$$

On développe ensuite en puissance de ϵ , en ne gardant que les termes d'ordre inférieur ou égal à deux. On commence par développer le produit $(a - \epsilon)(b + \epsilon)$,

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon^2}{k} \partial_t \Psi_t(a, b, c) = & ab \Psi_t(a - \epsilon, b + \epsilon, c) + (a - b)\epsilon \Psi_t(a - \epsilon, b + \epsilon, c) \\ & - \epsilon^2 \Psi_t(a - \epsilon, b + \epsilon, c) - ab \Psi_t(a, b, c) + p.c. \end{aligned} \quad (17)$$

Ensuite, on développe les densités de probabilité en série de Taylor,

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon^2}{k} \partial_t \Psi_t(a, b, c) = & \cancel{ab \Psi_t(a, b, c)} - ab \epsilon \partial_a \Psi_t(a, b, c) + ab \epsilon \partial_b \Psi_t(a, b, c) \\ & + \frac{\epsilon^2}{2} \partial_a^2 \Psi_t(a, b, c) + \frac{\epsilon^2}{2} \partial_b^2 \Psi_t(a, b, c) + \epsilon^2 \partial_a \partial_b \Psi_t(a, b, c) \\ & + \cancel{(a - b)\epsilon \Psi_t(a, b, c)} - (a - b) \epsilon^2 \partial_a \Psi_t(a, b, c) \\ & + (a - b) \epsilon^2 \partial_b \Psi_t(a, b, c) - \epsilon^2 \Psi_t(a, b, c) - \cancel{ab \Psi_t(a, b, c)} \\ & + p.c. \end{aligned} \quad (18)$$

Remarquons que le terme coloré en brun s'annule avec ses homologues issus des permutations cycliques en a, b, c .

La dernière étape consiste à redéfinir l'échelle de temps en absorbant ϵ et k dans t , de sorte que

$$\frac{k}{\epsilon} t \rightarrow t. \quad (19)$$

Nous obtenons ainsi

$$\begin{aligned}
\partial_t \Psi_t(a, b, c) &= ab \partial_a \Psi_t(a, b, c) + ab \partial_b \Psi_t(a, b, c) \\
&+ \frac{\epsilon}{2} \partial_a^2 \Psi_t(a, b, c) + \frac{\epsilon}{2} \partial_b^2 \Psi_t(a, b, c) + \epsilon \partial_a \partial_b \Psi_t(a, b, c) \\
&- (a - b) \epsilon \partial_a \Psi_t(a, b, c) + (a - b) \epsilon \partial_b \Psi_t(a, b, c) \\
&- \epsilon \Psi_t(a, b, c) + p.c.
\end{aligned} \tag{20}$$

Pour voir que ce développement mène à l'équation de Fokker-Planck (eq 6), il est plus facile de partir de cette dernière équation et développer les expressions de μ_i et D_{ij} . Cela donne

$$\begin{aligned}
\partial_t \Psi_t &= -\partial_i \mu_i \Psi_t - \mu_i \partial_i \Psi_t + \partial_i \partial_j D_{ij} \Psi_t + 2\partial_i D_{ij} \partial_j \Psi_t + D_{ij} \partial_i \partial_j \Psi_t \\
&= -\cancel{(b+c)\Psi_t} - \cancel{p.c.} - a(b-c) \partial_a \Psi_t - \cancel{p.c.} + \frac{\epsilon}{2} [0 - \Psi_t - \Psi_t] + p.c. \\
&+ \epsilon [(b+c) \partial_a \Psi_t - b \partial_b \Psi_t - c \partial_c \Psi_t] + p.c. \\
&+ \frac{\epsilon}{2} [a(b+c) \partial_a^2 \Psi_t - ab \partial_a \partial_b \Psi_t - ac \partial_a \partial_c \Psi_t] + p.c.
\end{aligned} \tag{21}$$

La correspondance entre les termes violets, vert et bleus des équations 19 et 21 est assez facile à voir, en tenant compte des permutations cycliques. Pour les termes cyan, il faut employer la relation de conservation $a + b + c = 1$. Par exemple, les termes en $\partial_a \Psi_t$ dans l'équation 21 peuvent être écrits comme

$$\epsilon (b + c) \partial_a \Psi_t - 2\epsilon a \partial_a \Psi_t = \epsilon (b - a) \partial_a \Psi_t + \epsilon (c - a) \partial_a \Psi_t. \tag{22}$$

5 Réduction à un processus radial

L'évolution dictée par l'équation de Fokker-Planck montre que la dérive le long du vecteur μ se produit sur des temps beaucoup plus courts que le phénomène de diffusion. Le rapport entre les deux échelles est donné par le facteur $\epsilon = 1/N$ dans la matrice de diffusion (eq 9), qui montre que la diffusion est de moins en moins importante dans la limite $N \rightarrow \infty$. Cette différence d'échelle implique qu'une densité de probabilité piquée autour d'un point de l'espace des phases va évoluer le long d'une orbite déterministe beaucoup plus vite qu'elle ne va s'étaler sur les orbites voisines.

Une conséquence importante est que nous pouvons approximer l'évolution de l'invariant ρ comme un processus stochastique unidimensionnel. Cette simplification nous intéresse tout particulièrement car les outils que nous allons utiliser pour traiter les extinctions dans le système s'appliquent beaucoup plus simplement aux processus unidimensionnels.

On commence par exprimer les accroissements $d\rho$ en termes de $d\mathbf{r}$,

$$d\rho = \rho(\mathbf{r} + d\mathbf{r}) - \rho(\mathbf{r}) = \partial_i \rho dr_i + \frac{1}{2} \partial_i \partial_j \rho dr_i dr_j. \quad (23)$$

Ensuite, nous substituons l'équation différentielle stochastique pour \mathbf{r} (eq 10),

$$d\rho = \mu_i \partial_i \rho dt + \sigma_{ij} \partial_i \rho dW_j + \frac{1}{2} \partial_i \partial_j \rho \sigma_{ik} \sigma_{jl} dW_k dW_l. \quad (24)$$

La relation 12 montre que le premier terme s'annule. Nous transformons le dernier terme en utilisant les relations $dW_k dW_l = \delta_{kl} dt$ et $\frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\sigma}^T = \mathbf{D}$ pour obtenir

$$d\rho = \partial_i \partial_j \rho D_{ij} dt + \sigma_{ij} \partial_i \rho dW_j. \quad (25)$$

Le premier terme est un terme de dérive pour l'évolution de ρ , mais provient de la diffusion dans l'évolution des variables a, b, c . Il s'évalue à

$$\begin{aligned} \partial_i \partial_j \rho D_{ij} &= \frac{\epsilon}{2} [a(b+c) \partial_a^2(\overline{abc}) + (-ab) \partial_a \partial_b(abc) + (-ac) \partial_a \partial_c(abc) \\ &\quad + (-ab) \partial_b \partial_a(abc) + b(c+a) \partial_b^2(\overline{abc}) + (-bc) \partial_b \partial_c(abc) \\ &\quad + (-ac) \partial_c \partial_a(abc) + (-bc) \partial_c \partial_b(abc) + c(a+b) \partial_c^2(\overline{abc})] \\ &= \frac{\epsilon}{2} [-6abc] = -3\epsilon \rho = -\frac{3}{N} \rho. \end{aligned} \quad (26)$$

Le deuxième terme cache une dépendance en N à l'intérieur de σ_{ij} . Pour se rapprocher de la convention employée dans [1], nous utilisons les matrices \mathbf{C} et \mathbf{B} , indépendantes de N , telles que $\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \mathbf{C}$ et $\mathbf{D} = \frac{1}{2N} \mathbf{B}$, et $\mathbf{B} = \mathbf{C} \mathbf{C}^T$, pour réécrire notre équation différentielle stochastique sous la forme

$$d\rho = -\frac{3}{N} \rho dt + \frac{1}{\sqrt{N}} C_{ij} \partial_i \rho dW_j. \quad (27)$$

À ce stade, notre équation pour $d\rho$ contient encore des références à la dynamique dans l'espace des phases a, b, c de part la dimension du bruit dW_j et à travers C_{ij} qui dépend encore explicitement de a, b, c . Frey et al. éliminent ces problèmes en moyennant le terme de diffusion sur les trajectoires du système déterministe [1]. Ils invoquent un théorème de Khasminskii [2] pour obtenir un processus unidimensionnel

$$d\rho = -\frac{3}{N} \rho dt + \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\bar{D}(\rho)} dW \quad (28)$$

avec un coefficient de diffusion effectif obtenu en moyennant un coefficient de diffusion

$D(a, b, c)$, local sur la trajectoire, sur une période complète de l'orbite,

$$\bar{D}(\rho) = \frac{1}{T(\rho)} \int_0^{T(\rho)} D(a, b, c) dt. \quad (29)$$

Ils fournissent la formule

$$D(a, b, c) = (\mathbf{C}\nabla\rho)^T(\mathbf{C}\nabla\rho) = (\nabla\rho)^T\mathbf{B}(\nabla\rho), \quad (30)$$

ce qui nous permet d'évaluer $D(a, b, c)$,

$$\begin{aligned} D(a, b, c) &= \partial_a(abc) a(b+c) \partial_a(abc) + \partial_a(abc) (-ab) \partial_b(abc) \\ &\quad + \partial_a(abc) (-ac) \partial_c(abc) + p.c. \\ &= a(b+c) b^2 c^2 - a^2 b^2 c^2 - a^2 b^2 c^2 + p.c. \\ &= (abc)^2 \left(\frac{b+c}{a} - 2 \right) + p.c. \\ &= \rho^2 \left(\frac{1-a}{a} - 2 \right) + p.c. \\ &= \rho^2 \left(\frac{1}{a} - 3 \right) + p.c. \\ &= \rho^2 \left(-9 + \frac{1}{a} + \frac{1}{b} + \frac{1}{c} \right) \end{aligned} \quad (31)$$

Justifications de l'étape de moyennage stochastique

Dans l'article de Frey et al. [1], peu d'explications sont fournies concernant l'étape de moyennage. Il m'a été difficile de trouver des références dans la littérature détaillant cette procédure. J'identifie deux points qui ne sont pas clairs. Le premier est le passage d'un processus de Wien tridimensionnel à un processus unidimensionnel. Le second est l'étape de moyennage elle-même, c'est à dire la formule 29. Pourquoi la moyenne se fait sur la grandeur D et pas une autre, par exemple sa racine ?

Concernant le premier point, il semble possible de réduire la dimension du processus de Wien dW_j en remarquant que la matrice \mathbf{C} est définie à une multiplication près \mathbf{CS} , à condition que la matrice \mathbf{S} soit orthogonale. Ceci est dû au fait que cette transformation ne modifie pas la matrice de diffusion

$$\mathbf{B}' = (\mathbf{CS})(\mathbf{CS})^T = \mathbf{C} \mathbf{S} \mathbf{S}^T \mathbf{C}^T = \mathbf{C} \mathbf{C}^T = \mathbf{B}. \quad (32)$$

Cette propriété traduit le fait que le terme de diffusion de l'équation différentielle stochastique peut être construite avec un bruit dW_j donné dans une base quelconque, sans changer la nature du processus qui en résulte. La conséquence qui nous intéresse est que l'on peut toujours transformer \mathbf{C} en une matrice triangulaire (cf. décomposition

QR). Dans une base pour laquelle l'un des axes est aligné avec le gradient de ρ , nous avons $\partial_2 \rho = \partial_3 \rho = 0$ et ainsi

$$C_{ij} \partial_i \rho dW_j = C_{1j} \partial_1 \rho dW_j + \cancel{C_{2j} \partial_2 \rho dW_j} + \cancel{C_{3j} \partial_3 \rho dW_j} = C_{1j} \partial_1 \rho dW_j \quad (33)$$

Comme nous pouvons considérer la matrice \mathbf{C} comme étant triangulaire supérieure sans perte de généralité, $C_{12} = C_{13} = 0$ et cela réduit donc la dimension du processus de Wien nécessaire dans l'équation différentielle stochastique,

$$C_{ij} \partial_i \rho dW_j = C_{11} \partial_1 \rho dW_1. \quad (34)$$

Nous pouvons donc réécrire l'équation 27 avec un processus de Wien unidimensionnel,

$$d\rho = -\frac{3}{N} \rho dt + \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{D} \partial_1 \rho dW, \quad (35)$$

en utilisant un coefficient de diffusion $D(a, b, c)$ qui préserve la variance du processus,

$$D(a, b, c) = (\mathbf{C} \nabla \rho)^T (\mathbf{C} \nabla \rho) = (\nabla \rho)^T \mathbf{B} (\nabla \rho). \quad (36)$$

6 Problème de première sortie d'un intervalle

Le problème de calculer le temps moyen d'extinction d'une espèce dans le modèle de prédation cyclique est équivalent à calculer le temps moyen de première sortie de la région $\{a, b, c | a, b, c > 0\}$, où chaque espèce est présente avec une fraction non nulle. Une fois que la diffusion dans le système est réduite à un processus radial, le problème est unidimensionnel et la région à échapper est un simple intervalle, de frontières $\rho = 0$ et $\rho = 1/27$. Pour calculer le temps moyen d'extinction, nous allons nous baser sur ce parallèle entre les deux problèmes et utiliser les techniques d'analyse servant à résoudre le problème de première sortie pour un processus stochastique homogène 1D.

On suppose que le processus 1D est régi par l'équation de Fokker-Planck

$$\partial_t p_t(x) = -\partial_x [A(x) p_t(x)] + \frac{1}{2} \partial_x^2 [B(x) p_t(x)]. \quad (37)$$

Notre intervalle à échapper est $[a, b]$ avec une barrière absorbante en a et répulsive en b . Nous commençons par nous intéresser à la quantité

$$G(x, t) = \int_a^b dy p(y, t | x, 0), \quad (38)$$

qui est la probabilité d'être encore dans l'intervalle au temps t , sachant que l'on démarre en x .

Étant donné que l'équation de Fokker-Planck est homogène en le temps, nous avons que

$$p(y, t|x, 0) = p(y, 0|x, -t) \quad (39)$$

et nous pouvons ainsi formuler l'équation de Fokker-Planck réverse en substituant la probabilité conditionnelle dans l'équation originale,

$$\partial_t p_t(y, t|x, 0) = A(x) \partial_x p_t(y, t|x, 0) + \frac{1}{2} B(x) \partial_x^2 p_t(y, t|x, 0). \quad (40)$$

À la différence de l'équation de Fokker-Planck directe, l'équation réverse voit les dérivées agir directement sur la densité de probabilité. Cela nous permet de formuler une équation différentielle pour une observable, comme $G(x, t)$. En intégrant sur y , l'intégrale passe sous les dérivées en x ,

$$\partial_t \int_a^b dy p(y, t|x, 0) = A(x) \partial_x \int_a^b dy p(y, t|x, 0) + \frac{1}{2} B(x) \partial_x^2 \int_a^b dy p(y, t|x, 0), \quad (41)$$

et nous obtenons une équation différentielle pour $G(x, t)$,

$$\partial_t G(x, t) = A(x) \partial_x G(x, t) + \frac{1}{2} B(x) \partial_x^2 G(x, t). \quad (42)$$

Le temps moyen de première sortie est une fonction de la position de départ dans l'intervalle. Il est donné par

$$T(x) = - \int_0^\infty t \partial_t G(x, t) dt = \int_0^\infty G(x, t) dt. \quad (43)$$

En intégrant l'équation pour $G(x, t)$ par rapport au temps,

$$\int_0^\infty A(x) \partial_x G(x, t) dt + \frac{1}{2} \int_0^\infty B(x) \partial_x^2 G(x, t) dt = \int_0^\infty \partial_t G(x, t) dt, \quad (44)$$

$$A(x) \partial_x \int_0^\infty G(x, t) dt + \frac{1}{2} B(x) \partial_x^2 \int_0^\infty G(x, t) dt = G(x, \infty) - G(x, 0), \quad (45)$$

on obtient une équation différentielle pour $T(x)$,

$$A(x) \partial_x T(x) + \frac{1}{2} B(x) \partial_x^2 T(x) = -1. \quad (46)$$

Le membre de droite de l'équation 45 s'évalue à -1 car au temps initial la particule est dans l'intervalle avec probabilité 1 et donc $G(x, 0) = 1$. De même, dans la limite de temps infini, la particule fini tôt ou tard par être absorbée par la barrière a , ainsi

$$G(x, \infty) = 0.$$

Pour résoudre l'équation différentielle 46, il reste à spécifier les conditions aux bords. La barrière a est absorbante, une particule se trouvant en $x = a$ est ainsi immédiatement retirée de l'intervalle $[a, b]$, nous avons donc $G(a, 0) = 0$ comme condition à ce bord. Sur le temps de sortie, cette condition se traduit par $T(a) = 0$. La barrière b est répulsive, cela signifie que le flux net de probabilité est nul en b , et donc $\partial_x G(b, 0) = 0$. Cela se traduit par $\partial_x T(b) = 0$.

La résolution de l'équation différentielle pour $T(x)$ peut se faire par intégration directe. En posant $Y(x) = \partial_x T(x)$, l'équation 46 devient

$$\partial_x Y(x) + \frac{2A(x)}{B(x)} Y(x) = -\frac{2}{B(x)}. \quad (47)$$

La solution ¹ pour $Y(x)$ est

$$Y(x) = \exp \left[- \int_a^x \frac{2A(y)}{B(y)} dy \right] \int_a^x \frac{(-2)}{B(y)} \exp \left[\int_a^y \frac{2A(z)}{B(z)} dz \right] dy + c_0 \exp \left[- \int_a^x \frac{2A(y)}{B(y)} dy \right]. \quad (48)$$

La condition au bord $Y(b) = \partial_x T(b) = 0$ impose que

$$c_0 = \int_a^x \frac{2}{B(y)} \exp \left[\int_a^y \frac{2A(z)}{B(z)} dz \right] dy, \quad (49)$$

et donc

$$Y(x) = \exp \left[- \int_a^x \frac{2A(y)}{B(y)} dy \right] \int_x^b \frac{2}{B(y)} \exp \left[\int_a^y \frac{2A(z)}{B(z)} dz \right] dy. \quad (50)$$

Cette solution donne un temps moyen de première sortie

$$T(x) = \int_a^x Y(y) dy + c_1. \quad (51)$$

Il est facile de voir que la condition au bord a demande que $c_1 = 0$. En introduisant la fonction

$$\psi(x) = \exp \left[\int_a^x \frac{2A(y)}{B(y)} dy \right], \quad (52)$$

1. Pour résoudre une équation différentielle du type $f'(x) + p(x)f(x) = q(x)$, on peut chercher à l'écrire sous la forme directement intégrable $M'(x) = N(x)$. Pour cela, on multiplie les deux côtés de l'équation par $\exp(\int p)$. Le terme de droite s'écrit alors explicitement comme la dérivée d'un produit, $M' = f' \exp(\int p) + f p \exp(\int p)$, avec $M = f \exp(\int p)$. Le terme de gauche est $N = q \exp(\int p)$. Nous pouvons ensuite intégrer directement pour obtenir $M = \int N + c_0$ et donc $f = \exp(-\int p) \int N + c_0 \exp(-\int p)$.

nous pouvons écrire la solution pour $T(x)$ sous la forme plus lisible

$$T(x) = \int_a^x \frac{1}{\psi(y)} \int_y^b \frac{2\psi(z)}{B(z)} dz dy. \quad (53)$$

Nous avons ainsi obtenu la formule donnant le temps de sortie moyen d'un intervalle pour un processus stochastique unidimensionnel. Cette formule nous permet de calculer le temps moyen d'extinction dans notre modèle de prédation cyclique. De l'équation de Fokker-Planck, nous pouvons identifier les coefficients de dérive et de diffusion

$$A(\rho) = -\frac{3}{N}\rho \quad \text{et} \quad B(\rho) = \frac{1}{N}\bar{D}(\rho). \quad (54)$$

Les bornes a et b sont dans ce cas $\rho = 0$ et $\rho = 1/27$, respectivement.

7 Calcul numérique du temps moyen d'extinction

On obtient le temps moyen d'extinction à partir de la formule 53 en calculant les intégrales numériquement. Nous utilisons la méthode des trapèzes pour calculer les intégrales avec une précision quadratique en la discrétisation.

La quantité $\bar{D}(\rho)$ intervenant dans le coefficient de diffusion est aussi calculée numériquement. On utilise l'expression 29 pour évaluer $\bar{D}(\rho)$ en sommant $D(a, b, c)$ le long des trajectoires déterministes. Les trajectoires sont générées par l'algorithme d'Euler, qui est amplement suffisant pour cette tâche. Nous partons du point de l'orbite où la fraction de l'espèce a est maximale et intégrons les équations de la dynamique sur une demi-période seulement, étant donné la symétrie de $D(a, b, c)$ sous l'échange $b \leftrightarrow c$ (voir eq 31).

Pour calculer le point d'une orbite $\rho = abc$ qui maximise a , il faut remarquer que quand a est maximal nous avons $b = c$. L'état est donc caractérisé par les équations

$$\rho = abc = ab^2 \quad \text{et} \quad 1 = a + b + c = a + 2b. \quad (55)$$

En isolant a on obtient une équation cubique

$$\rho = \frac{1}{4}a(1-a)^2. \quad (56)$$

Bien que les équations polynomiales soient exactement solubles et bien nous pourrions utiliser un algorithme de résolution de polynômes, nous procédons simplement de manière itérative pour chercher la solution de cette équation. En partant de $a = 1$, nous diminuons la valeur de a par pas Δa jusqu'à ce que les deux membres de

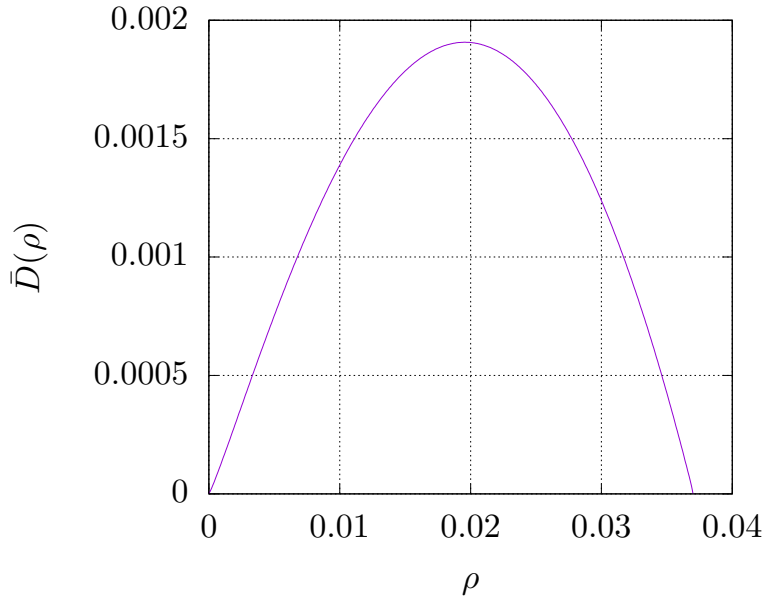


FIGURE 2 – Coefficient de diffusion effectif $\bar{D}(\rho)$ en fonction de ρ .

l'équation s'équilibrent. Lorsque le point d'équilibre est passé, nous rebroussons chemin et augmentons maintenant a par pas deux fois plus petits que précédemment, $\Delta a/2$. Nous répétons cette procédure jusqu'à ce que le pas soit suffisamment petit.

Notons que la procédure complète pour calculer le temps d'extinction moyen requiert quatre intégrations : trois pour résoudre le problème d'échappement (voir équations 53 et 52) et une pour calculer $\bar{D}(\rho)$. Pour accélérer le calcul, nous calculons $\bar{D}(\rho)$ à l'avance en plusieurs points de l'intervalle $[0, 1/27]$. Ensuite, nous calculons $\bar{D}(\rho)$ en interpolant les valeurs que nous avons enregistrées. Nous interpolons avec une parabole en utilisant les trois points les plus proches de la valeur désirée. Le calcul peut ainsi être effectué en quelques minutes.

Au lieu de calculer le temps d'extinction moyen à partir de la valeur exacte de $\bar{D}(\rho)$, nous pouvons également faire une approximation de bruit constant en utilisant un terme de diffusion constant. Le choix $D = 0.001$ fait par Frey et al. [1] donne une assez bonne approximation du résultat exact. La figure 3 montre les courbes obtenues par interpolation et approximation de $\bar{D}(\rho)$ côte à côte. Cette figure reporte également des résultats de simulations du système, dont nous parlons dans la section suivante. L'accord entre les calculs théoriques (interpolation) et les simulations est très bon pour $N = 1000$. Cela montre la qualité de l'approximation de moyennage effectué dans la section 5 pour réduire le processus à une dimension. La figure 4 montre le même graphique pour un plus petit nombre d'individus, $N = 100$, pour lequel l'accord avec les simulations commence à se dégrader. Nous pouvons constater que nous obtenons pratiquement les mêmes valeurs du temps moyen d'extinction divisé par N , ce qui montre que le temps moyen d'extinction est bien proportionnel à N . Cette figure affiche aussi un graphe obtenu pour une autre approximation de bruit constant, avec $\bar{D}(\rho) = 8 \times 10^{-4}$, afin de donner une idée de la sensibilité d'une telle approximation par rapport à la valeur choisie pour le bruit.

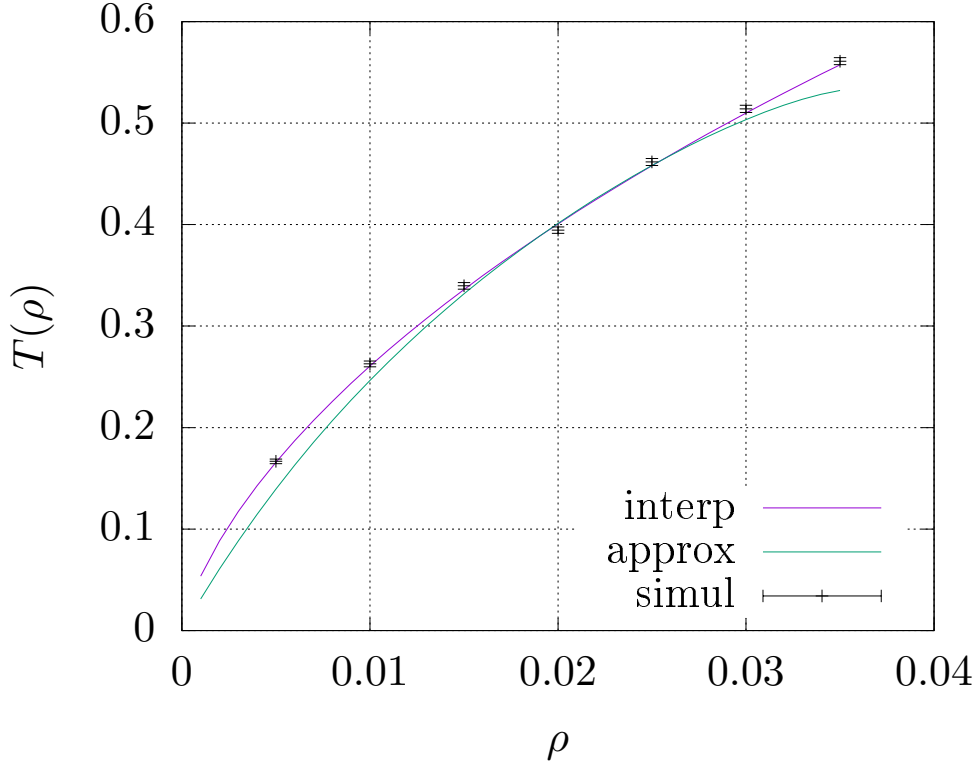


FIGURE 3 – Temps d’extinction en fonction de la valeur de ρ au point de départ dans le système. L’unité de temps est celle du temps microscopique (celui de l’équation maîtresse). Pour retrouver le temps en unités mésoscopiques (celui de l’équation de Fokker-Planck), il faut multiplier par N . La comparaison est faite des temps d’extinction calculés selon l’expression exacte de $\bar{D}(\rho)$ (“interp”), une approximation à bruit constant $\bar{D}(\rho) = 0.001$ (“approx”) ou encore en faisant des simulations du système (“simul”). Dans ces calculs, le nombre d’individus est $N = 1000$. Les résultats des simulations sont moyennés sur 10^4 réalisations.

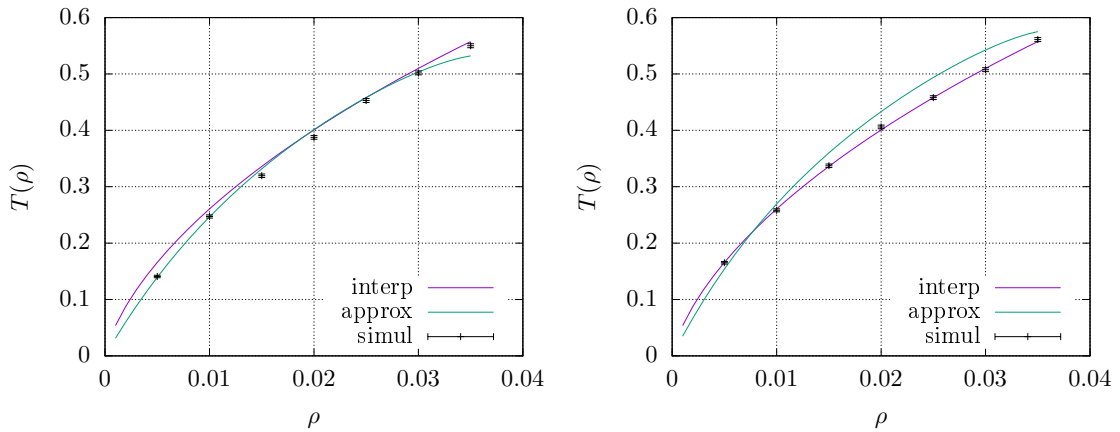


FIGURE 4 – À gauche, temps d’extinction calculés pour $N = 100$. À droite, temps d’extinction pour $N = 1000$, en utilisant une autre valeur pour l’approximation de bruit constant, $\bar{D}(\rho) = 8 \times 10^{-4}$.

8 Simulation du système

On réalise des simulations numériques du modèle de prédation cyclique en utilisant l'algorithme de Gillespie. Dans cet algorithme, les taux de réactions sont calculés, e.g. $f_{ab} = kAB$, et sommés pour avoir la fréquence à laquelle une réaction quelconque se produit $f_0 = \sum_i \sum_j f_{ij}$. Les réactions sont supposées se produire indépendamment les unes des autres et le temps d'attente avant une réaction suit donc une distribution exponentielle. Ainsi, à chaque réaction effectuée, le temps du système est incrémenté selon

$$t \rightarrow t - \frac{1}{f_0} \ln(r), \quad (57)$$

où r est un nombre aléatoire uniformément distribué entre 0 et 1. La réaction à effectuer est choisie avec un poids de probabilité donné par le rapport entre le taux pour cette réaction et le taux total, f_{ij}/f_0 .

La condition initiale du système est calculée à partir de l'invariant macroscopique $\rho = abc$, entré comme paramètre de la simulation. Nous démarrons la simulation au point de l'orbite où a est maximal, comme expliqué dans la section précédente. Les fractions a, b, c calculées sont bien sûr converties en nombres A, B, C d'individus pour chaque espèce. Nous laissons ensuite la simulation tourner jusqu'à ce que l'on détecte une extinction. Plus précisément, nous testons lors de chaque réaction si la population d'une des espèces est tombée à zéro.

A la fin de chaque simulation, nous enregistrons le temps d'extinction observé. Les simulations sont répétées un grand nombre de fois, ici 10^4 réalisations, afin de calculer le temps d'extinction moyen avec une marge d'erreur raisonnablement petite. L'erreur reportée pour la détermination de la moyenne est de un écart-type. L'écart-type sur une moyenne de M réalisations est donnée par l'écart-type d'une réalisation divisé par la racine carrée de M :

$$\sigma_M = \frac{\sigma}{\sqrt{M}}. \quad (58)$$

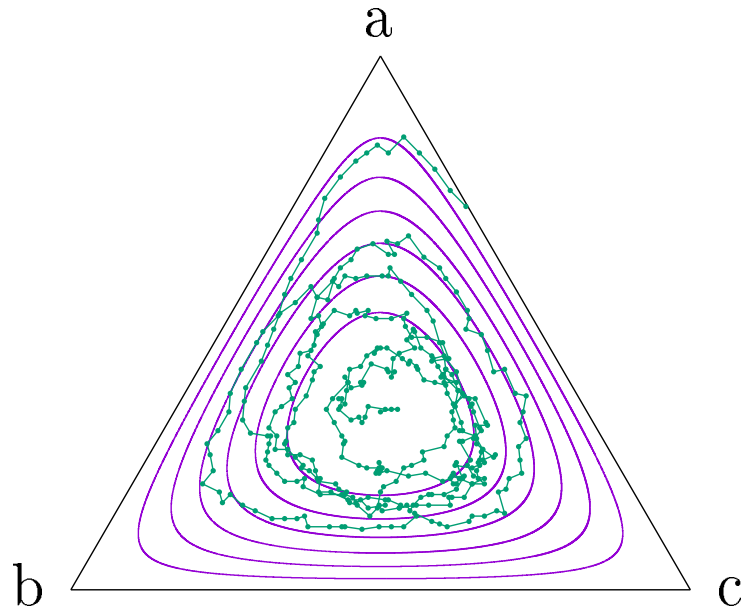


FIGURE 5 – Exemple de trajectoire générée par l’algorithme de Gillespie pour $N = 200$ individus. L’enregistrement de la position est effectué toutes les 20 réactions.

Références

- [1] E. FREY A. DOBRINEVSKI. Extinction in neutrally stable stochastic Lotka-Volterra models. *Phys. Rev. E*, **85** : (cf. p. 2, 8, 9, 14)
- [2] R. Z. KHASMINSKIJ. *Kybernetika*, **4** : 260–279. (cf. p. 8)