

1. Parte 1, 2, 3, 4 Overleaf, 5 en Google Colab.

1. Para un modelo determinístico SIR en una población homogénea sin dinámica vital (no hay nacimientos ni muertes)

$$\frac{dS}{dt} = -\beta IS \quad (1)$$

$$\frac{dI}{dt} = \beta IS - \gamma I \quad (2)$$

$$\frac{dR}{dt} = \gamma I \quad (3)$$

- a) Determinar la relación que debe cumplir el número final de infectados. (Final Size en la literatura usual)

Sol: Como no consideramos dinámica vital tenemos que $S + I + R = 1$ idénticamente, de manera que

$$(S + I + R)' = 0.$$

Por otra parte podemos considerar la primera derivada del logaritmo de S la cual nos dará la relación $(\log S)' = \frac{1}{S} S' = -\beta I$ y con ella podremos escribir R' en términos de S y S' como

$$R' = -\frac{\gamma}{\beta} (\log S)',$$

y así

$$\left(S + I - \frac{\gamma}{\beta} \log S \right)' = 0$$

y tenemos la cantidad conservada

$$S + I - \frac{\gamma}{\beta} \log S.$$

En particular cuando $t \rightarrow \infty$ tendremos que $I \rightarrow 0$ y $S \rightarrow S_\infty$, con lo cual vemos (con condiciones iniciales $S(0) = S_0, I(0) = I_0$) que

$$S_\infty - \frac{\gamma}{\beta} \log S_\infty = S_0 + I_0 - \frac{\gamma}{\beta} \log S_0$$

$$\log \frac{S_\infty}{S_0} = \frac{\beta}{\gamma} (S_\infty - S_0 - I_0),$$

y definiendo el número básico de reproducción $R_0 = \frac{\beta}{\gamma} S_0$ tenemos

$$\log \frac{S_\infty}{S_0} = R_0 \left(\frac{S_\infty}{S_0} - 1 - \frac{I_0}{S_0} \right).$$

Finalmente considerando que en $t = 0$ tenemos $R(0) = 0$, y que en $t \rightarrow \infty$ tenemos $I \rightarrow 0$ escribimos

$$\begin{aligned}\log \frac{1 - R_\infty}{S_0} &= -\frac{R_0}{S_0} R_\infty \\ 1 - R_\infty &= \frac{\gamma}{\beta} R_0 e^{-\frac{R_0}{S_0} R_\infty} \\ \frac{R_0}{S_0} (1 - R_\infty) &= R_0 e^{-\frac{R_0}{S_0} R_\infty} \\ -R_0 e^{-\frac{R_0}{S_0}} &= -\frac{R_0}{S_0} (1 - R_\infty) e^{-\frac{R_0}{S_0} (1 - R_\infty)}\end{aligned}$$

- b) Determinar las condiciones en β, γ y los susceptibles en tiempo cero para que el número de infectados decrezca siempre, o inicialmente crezca para luego decrecer. En términos matemáticos queremos que la solución libre de infectados (Disease Free Equilibrium) sea estable. (El famoso R_0 pero realmente teniendo en cuenta los susceptibles en tiempo 0)

Sol: Podemos escribir el modelo en forma matricial como

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} S \\ I \\ R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\beta I & -\beta S & 0 \\ \beta I & \beta S - \gamma & 0 \\ 0 & \gamma & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S \\ I \\ R \end{pmatrix},$$

y en particular para la solución libre de infectados la matriz es

$$\begin{pmatrix} 0 & -\beta S_0 & 0 \\ 0 & \beta S_0 - \gamma & 0 \\ 0 & \gamma & 0 \end{pmatrix},$$

y sabemos que ésta es estable si todos los eigenvalues de esta matriz son negativos. En particular el eigenvalue de interés es $\beta S_0 - \gamma$, el cual será negativo siempre que tengamos

$$R_0 = \frac{\beta}{\gamma} S_0 < 1.$$

- c) Para las condiciones encontradas anteriormente en las que el número de infectados inicialmente crece para luego decrecer. Determinar el número máximo de infectados.

Sol: Cuando el número de infectados es máximo (llámese I^*) tenemos que $I' = 0$, de donde obtenemos la relación $I^*(\beta S^* - \gamma) = 0$, claramente $I^* \neq 0$ y entonces

$$\begin{aligned}S^* &= \frac{\gamma}{\beta} \\ &= \frac{S_0}{R_0}.\end{aligned}$$

Por otra parte recordando la relación obtenida anteriormente para escribir R en términos

de S tenemos

$$\begin{aligned} R^* &= -\frac{\gamma}{\beta} \log S^* \\ &= -\frac{S_0}{R_0} \log \frac{S_0}{R_0}. \end{aligned}$$

Finalmente la cantidad conservada básica, dado que no consideramos dinámica vital, no es más que $S + I + R = 1$ y así

$$\begin{aligned} I^* &= 1 - S^* - R^* \\ &= 1 - \frac{S_0}{R_0} + -\frac{S_0}{R_0} \log \frac{S_0}{R_0} \\ &= 1 - \frac{S_0}{R_0} (1 - \log \frac{S_0}{R_0}) \end{aligned}$$

- d) Para las condiciones encontradas anteriormente en las que el número de infectados inicialmente crece para luego decrecer. Determinar el tiempo en el que se alcanza el número máximo de infectados. (La respuesta es una integral definida que no se puede expresar en términos de funciones elementales)

Sol: Para empezar es útil escribir I en función de S , para ello dividimos las ecuaciones diferenciales originales y esto lo podemos integrar para obtener

$$I(S) = -S + \frac{\gamma}{\beta} \log S + C$$

para alguna constante de integración C , la cual puede obtenerse fácilmente considerando las condiciones iniciales $I_0 = 1 - S_0$, tenemos entonces

$$I(S) = 1 - S + \frac{S_0}{R_0} \log \frac{S}{S_0}.$$

Luego de esto podemos escribir la primera ecuación diferencial completamente en términos de S ,

$$\frac{dS}{dt} = -\beta \left(1 - S + \frac{S_0}{R_0} \log \frac{S}{S_0} \right) S,$$

y esto podemos separarlo e integrar dt entre 0 y t^* y dS entre S_0 y S^* para obtener

$$t^* = -\frac{1}{\beta} \int_{S_0}^{\frac{S_0}{R_0}} \frac{dS}{\frac{S_0}{R_0} S \log \frac{S}{S_0} + S - S^2}.$$

- e) Dado un valor de población susceptible (o recuperada si quieren), determinar el tiempo que se requiere para llegar a ese valor. (Al igual que el ejercicio anterior, la respuesta es una integral definida que no se puede expresar en términos de funciones elementales)

Sol: De manera análoga a como se obtuvo el tiempo t^* , se puede obtener el tiempo que se tarda en llegar a una población susceptible dada, digamos \hat{S} , considerando la integral

$$\hat{t}(\hat{S}) = -\frac{1}{\beta} \int_{S_0}^{\hat{S}} \frac{dS}{\frac{S_0}{R_0} S \log \frac{S}{S_0} + S - S^2}.$$

2. Bajo qué condiciones la iteración de punto fijo de la relación encontrada en la parte anterior converge a un único punto fijo? Siempre? que orden de convergencia se obtiene para esas condiciones?

Sol: Dada la relación

$$\hat{t}(\hat{S}) = -\frac{1}{\beta} \int_{S_0}^{\hat{S}} \frac{dS}{\frac{S_0}{R_0} S \log \frac{S}{S_0} + S - S^2},$$

tenemos que una iteración de punto fijo convergerá a un único punto fijo siempre que exista $0 < k < 1$ tal que $|\hat{t}'(\hat{S})| \leq k$ para todo $\hat{S} \in (0, 1)$.

Tomamos entonces la derivada

$$\hat{t}'(\hat{S}) = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{\frac{S_0}{R_0} \hat{S} \log \frac{\hat{S}}{S_0} + \hat{S} - \hat{S}^2},$$

y vemos que la convergencia se dará para

$$R_0 < \frac{\beta S_0 \hat{S} \log \frac{\hat{S}}{S_0}}{\beta \hat{S}^2 - \beta \hat{S} + 1},$$

con orden de convergencia 1.

3. Considere el método de Newton para encontrar el número final de infectados, qué condiciones se deben cumplir para aplicar el método de Newton?, qué orden de convergencia se obtiene?

Sol: Para hallar el número final de infectados consideramos la función

$$f(R) = R_0 e^{-\frac{R_0}{S_0}} - \frac{R_0}{S_0} (1-R) e^{-\frac{R_0}{S_0} (1-R)},$$

la cual tendrá su raíz en R_∞ , i.e., $f(R_\infty) = 0$. Ahora para poder aplicar el método de Newton-Raphson basta con verificar que $f'(R_\infty) \neq 0$ para saber que existe $\delta > 0$ tal que este método genere una secuencia que converja a R_∞ para una aproximación inicial $\in (R_\infty - \delta, R_\infty + \delta)$. Vemos entonces que esto se cumple para

$$R_\infty \neq 1 - \frac{S_0}{R_0},$$

en cuyo caso el método tendrá orden de convergencia 2.

4. Encuentre por lo menos tres aproximaciones al número final de infectados y discuta su validez. (Una es la que se obtiene con la función de Lambert, otra puede ser aproximando la exponencial...)

Sol: Recordando la relación obtenida para el final size

$$-R_0 e^{-\frac{R_0}{S_0}} = -\frac{R_0}{S_0} (1 - R_\infty) e^{-\frac{R_0}{S_0} (1 - R_\infty)},$$

vemos que ésta es de la forma $z = we^w$, la cual tiene solución dada por la función W de Lambert $w = W(z)$, es decir en este caso tenemos

$$-\frac{R_0}{S_0} (1 - R_\infty) = W(-R_0 e^{-\frac{R_0}{S_0}}),$$

y así

$$R_\infty = 1 + \frac{S_0}{R_0} W(-R_0 e^{-\frac{R_0}{S_0}}).$$

Por otra parte, para $|z| \ll 1$ (y en efecto este es el caso para R_0 suficientemente grande gracias al comportamiento exponencial) tenemos que la función W de Lambert puede aproximarse como $W(z) \approx z$ y en este caso tendríamos

$$R_\infty = 1 - S_0 e^{-\frac{R_0}{S_0}}.$$

Por último, para R_0 suficientemente grande tenemos que $R_\infty \rightarrow 1$ y $-\frac{R_0}{S_0} (1 - R_\infty) \rightarrow 0$, de manera que podremos aproximar la exponencial del lado derecho de la relación por $e^{-\frac{R_0}{S_0} (1 - R_\infty)} \approx 1 - \frac{R_0}{S_0} (1 - R_\infty)$, con lo cual tenemos

$$R_\infty = 1 - \frac{S_0}{R_0} \left(\frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} - R_0 e^{-\frac{R_0}{S_0}}} \right).$$

5. Considere el número final de infectados y las aproximaciones encontradas anteriormente como función de R_0 y gráfíquelas. (No tiene que programar desde cero el método numérico, solo debe comentar en su código la librería, la función y el método que está usando).

Sol: En Notebook.

2. Parte 1,2,3 Overleaf, 5,6 en Google Colab. Para un modelo determinístico Multi-SIR en un conjunto de poblaciones todas del mismo tamaño sin dinámica vital (no hay nacimientos ni muertes)

1. Determinar la relación que debe cumplir el número final de infectados. (Esta es una relación del número de recuperados en un grupo en términos de los recuperados en los otros grupos)

Sol: De manera análoga al caso anterior, consideramos ahora un sistema

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{S}}{dt} &= -\beta \operatorname{diag}(\mathbf{S})\mathbf{A}\mathbf{I}, \\ \frac{d\mathbf{I}}{dt} &= \beta \operatorname{diag}(\mathbf{I})\mathbf{A}\mathbf{S} - \gamma\mathbf{I}, \\ \frac{d\mathbf{R}}{dt} &= \gamma\mathbf{I},\end{aligned}$$

donde ahora tratamos con *vectores* de números de susceptibles, infectados, y muertos, y modelamos las N poblaciones por un grafo no dirigido sin loops con matriz de adyacencia A (en esta primera aproximación asumimos por simplicidad que los parámetros de infección y recuperación, β y γ , son los mismos para todas las poblaciones y es por esto que pueden representarte sencillamente como escalares). Para una población k dada tenemos entonces

$$\begin{aligned}\frac{dS_k}{dt} &= -\beta S_k \sum_l A_{kl} I_l, \\ \frac{dI_k}{dt} &= \beta I_k \sum_l A_{kl} S_l - \gamma I_k, \\ \frac{dR_k}{dt} &= \gamma I_k,\end{aligned}$$

con lo cual podemos hallar una relación similar a la que teníamos en el caso con una sola población, i.e.,

$$\sum_l A_{kl} R'_l = -\frac{\gamma}{\beta} (\log S_k)',$$

y así tener las N cantidades conservadas

$$\sum_l A_{kl} (S_l + I_l - \frac{\gamma}{\beta} \log S_l).$$

Nuevamente de manera análoga al caso con una sola población consideramos condiciones iniciales $S_k(0) = S_k^0, I_k(0) = I_k^0, R_k(0) = 0, \forall k$ y el límite cuando $t \rightarrow \infty$ con $S_k \rightarrow S_k^\infty, I_k \rightarrow 0, R_k \rightarrow R_k^\infty$ con esta cantidad conservada y definimos el número básico de reproducción $R_0 = \frac{\beta}{\gamma}$ para escribir (se obvian aquí algunos detalles pues es tal y como se mostró para el caso con una población)

$$\begin{aligned}\sum_l A_{kl} (S_l^\infty - \frac{\gamma}{\beta} \log S_l^\infty) &= \sum_l A_{kl} (S_l^0 + I_l^0 - \frac{\gamma}{\beta} \log S_l^0) \\ \sum_l A_{kl} \log \frac{1 - R_l^\infty}{S_l^0} &= -R_0 \sum_l A_{kl} R_l^\infty \\ \prod_l \left(\frac{1 - R_l^\infty}{S_l^0} \right)^{A_{kl}} &= e^{-R_0 \sum_l A_{kl} R_l^\infty} \\ R_k^\infty &= 1 - S_k^0 e^{-R_0 \sum_l A_{kl} R_l^\infty}\end{aligned}$$

2. Puede determinar condiciones en las condiciones iniciales y los parámetros, para que el número de infectados decrezca siempre?

Sol: Para que el número de infectados decrezca siempre buscamos que $I'_k < 0$, $\forall k$, es decir que debemos exigir

$$\left(\beta \sum_l A_{kl} S_l - \gamma \right) I_k < 0, \quad \forall k$$

y como $I_k > 0$, $\forall k$ esto se reduce a

$$\beta \sum_l A_{kl} S_l - \gamma < 0, \quad \forall k$$

$$\beta \sum_l A_{kl} S_l < \gamma, \quad \forall k$$

$$\frac{\beta}{\gamma} \sum_l A_{kl} S_l < 1, \quad \forall k$$

lo cual en particular debe cumplirse en $t = 0$,

$$R_0 \sum_l A_{kl} S_l^0 < 1, \quad \forall k$$

3. Puede determinar condiciones bajo las cuales el método de iteración de punto fijo y el método de Newton convergen?

Sol: Para verificar que estos métodos convergen para hallar el final size de la población k consideramos la función

$$f(R_k) = 1 - S_k^0 e^{-R_0 \sum_l A_{kl} R_l^\infty} - R_k,$$

la cual tendrá su raíz en R_k^∞ .

Ahora, la convergencia de la iteración de punto fijo se tendrá siempre que exista $0 < m < 1$ tal que $|f'(R_k)| \leq m$ para todo $R_k \in (0, 1)$, es decir que se dará para

$$\log S_k^0 < R_0 \sum_l A_{kl} R_l^\infty,$$

y como $S_k^0 \in (0, 1)$ y $R_0 \sum_l A_{kl} R_l^\infty > 0$ esto se cumple siempre.

En cuanto al método de Newton-Raphson, éste convergerá siempre que $f'(R_k^\infty) \neq 0$, es decir que será para

$$S_k^0 e^{-R_0 \sum_l A_{kl} R_l^\infty} \neq 0,$$

y como $e^{-R_0 \sum_l A_{kl} R_l^\infty} \neq 0$ solo tenemos como condición $S_k^0 \neq 0$.

4. Encuentre por lo menos dos aproximaciones al número final de infectados en cada grupo y discuta su validez. (Puede ser aproximando la exponencial..., la idea es aproximar el número total de recuperados, si se les ocurre alguna idea super!!!, a mi solo se me ocurre aproximar cada termino antes de sumar)

Sol: La aproximación más básica es considerar un mismo S^0 para todas las poblaciones (recordemos que ya tenemos como simplificación R_0 igual para todas las poblaciones) de manera que el sistema sea más sencillo de resolver, dependiendo éste ahora solamente de los final sizes y de la matriz de adyacencia,

$$R_k^\infty = 1 - S^0 e^{-R_0 \sum_l A_{kl} R_l^\infty}.$$

Otra posible aproximación al final size de la población k sería, además del uso de un único S^0 , aproximando la exponencial por $e^x \approx 1 + x$ de manera que tengamos

$$R_k^\infty = 1 - S^0 + S^0 R_0 \sum_l A_{kl} R_l^\infty,$$

sin embargo hay que tener cuidado con esta aproximación pues únicamente es válida para $|x| \ll 1$, lo cual es posible que no se cumpla con la sumatoria que tenemos como argumento en este caso—en efecto, al intentar incorporar esta aproximación en el Notebook para graficarla y comparar con la anterior arrojaba final sizes negativos excepto para R_0 muy bajos.

5. Considere grafos aleatorios Erdős-Rényi, Watts-Strogatz y Barabási-Albert con el mismo número de nodos y aristas (o valor esperado). Gráfíquelos para varios valores de los parámetros. (Ejemplos de módulos de python de grafos que pueden usar: Networkx, Igraph, Networkit, Graph-tools)

Sol: En Notebook.

6. Considere el número total de recuperados (la suma de los recuperados en cada grupo) y las correspondientes aproximaciones encontradas anteriormente como función de R_0 y los susceptibles en cada grupo en tiempo cero. Gráfíquelos para varios de los grafos aleatorios considerados anteriormente. (No tiene que programar desde cero todo, pero si comentar las funciones y las que esta usando).

Sol: En Notebook.