

Modelo de dinámica y control de epidemia de dengue con información a gran escala.

Lic. Gabriel Eduardo Moyano.

Presentado ante la Facultad de Matemática, Astronomía
y Física como parte de los requerimientos para la obtención
del grado de Doctor en Matemática de la

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA.

Marzo 2016

Director: Dr. Damián Fernandez Ferreyra.





Modelo de dinámica y control de epidemia de dengue con información a gran escala por Gabriel Eduardo Moyano se distribuye bajo una [Licencia Creative Commons Atribución-
NoComercialCompartirIgual 2.5 Argentina](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/2.5/arg/)

*A mis padres, mis hermanos,
mis directores y a los docentes de la facultad
por su apoyo, consejos y buena predisposición para ayudarme.*

Resumen

En esta tesis se presentará un modelo para el control de una epidemia de fiebre dengue, que requiere de el uso de distintas herramientas matemáticas presentado como un problema de optimización sujeto a una dinámica espacio–temporal de la enfermedad. En una primera parte se describirá un modelo con poblaciones de huéspedes y vectores divididas en compartimientos de acuerdo a su estado de enfermedad. Luego la relaciones entre vectores y huéspedes se modelará mediante un sistema de ecuaciones diferenciales y finalmente se procederá a plantear un problema de control al agregar un parámetro adicional que representa las posibles fumigaciones. En la segunda parte de este trabajo se llevará a cabo la resolución de este problema propuesto mediante técnicas numéricas basadas en métodos de optimización no lineal, ya que el problema representado es un problema de optimización cuadrática con restricciones que pueden ser linealizadas.

Los modelos matemáticos son de gran utilidad para el estudio, análisis y comprensión de diferentes fenómenos que surgen en ciencias tales como la medicina y la miología. A partir de los resultados y simulaciones obtenidas basadas en estos modelos, es posible tener un mejor entendimiento del fenómeno analizado y también estos resultados pueden ser utilizados para estimar parámetros correspondientes al proceso en estudio, dando así una herramienta para su uso como método de representación de un brote epidémico como también su uso para la prevención y método de control para un posible brote.

Aquí se propone realizar un primer enfoque del problema donde se describe el sistema de ecuaciones diferenciales que representan la dinámica espacio–temporal de un brote de fiebre dengue con parámetros obtenidos mediante información de los sensores de gran escala. La dinámica propuesta para los vectores es derivada de una ecuación de reacción–difusión no homogénea basada en los parámetros ya mencionados. Luego esta ecuación es propuesta como representación de las poblaciones de insectos en un modelo epidemiológico para una enfermedad transmitida por vectores descrito en compartimientos, donde además se agregan las ecuaciones que representan la población de los huéspedes también separados en compartimientos respecto a su estado frente a la enfermedad, obteniendo así un modelo que en la bibliografía clásica se conoce como $S - E - I$ para los vectores y $S - E - I - R$ para los huéspedes. Esto será modelizado mediante una simulación numérica de las ecuaciones diferenciales en diferencia finitas. A continuación se planteará un problema de optimización donde se introduce una variable de control que representa una posible estrategia de fumigación, de tal forma que el objetivo del problema es encontrar una estrategia óptima en el sentido que se minimiza la cantidad de huéspedes expuestos al virus de la enfermedad y la cantidad de insecticida en las fumigaciones, esto además sujeto a un conjunto de restricciones que se derivan del modelo físico.

En la segunda parte del trabajo, el objetivo es desarrollar y mostrar un algoritmo eficiente para la resolución del problema de optimización ya discretizado resultante de la primer parte de la tesis. Para esto se presentará un algoritmo de programación cuadrática secuencial basado en el método de Lagrangiano aumentado y el método del Lagrangiano con restricciones lineales.

Cabe señalar que las herramientas e ideas utilizadas en la primer parte del trabajo pueden ser aplicadas para la modelización de distintos insectos, principalmente voladores, adaptando los parámetros correspondientes para la representación de la evolución espacio–temporal de las densidades de poblaciones, sin la necesidad de que sea un modelo epidemiológico o adaptando los parámetros biológicos derivados de las propiedades del virus del dengue para representar la evolución de otro brote epidémico para una enfermedad

transmitida por un vector.

Palabras claves: epidemiología, optimización, control optimal, ecuaciones diferenciales parciales, método de diferencias finitas, simulaciones numéricas, método del gradiente proyectado, lagrangiano aumentado.

2010 Mathematics subject Classification: 92D30, 49J20, 90C20.

Índice general

1. Introducción	1
I Control en la dinámica de un brote de fiebre dengue.	5
2. Dinámica del brote de dengue	7
2.1. Motivación del problema	7
2.2. Modelo matemático	9
2.2.1. Dinámica de los insectos	9
2.2.2. Dinámica de la enfermedad	12
2.3. Discretización del modelo	16
2.3.1. Ecuaciones discretizadas	20
2.4. Simulaciones numéricas	22
2.4.1. Parámetros de difusión	22
2.4.2. Parámetros de transporte	22
2.4.3. Parámetros biológicos	23
2.4.4. Simulación de la dinámica en un terreno heterogéneo	23
2.4.5. Conclusiones de la simulación	26
3. El problema de control	39
3.1. Control sobre la epidemia	39
3.2. Discretización del problema	40
3.2.1. Discretización de la función objetivo	40
3.2.2. El problema discretizado	41
3.3. Métodos numéricos	42
3.3.1. El método adjunto	43
3.3.2. Cómo obtener $\nabla \tilde{J}$	47
3.3.3. Algoritmo empleado para la resolución	48
3.4. Simulaciones numéricas	49
3.5. Conclusiones y trabajos futuros	50
II Método de optimización cuadrática.	57
4. Introducción a la optimización no lineal	59
4.1. Motivación	59
4.2. Introducción a los métodos de penalización y del Lagrangiano Aumentado	60

5. Algoritmo del método del Lagrangiano Aumentado	65
5.1. Preliminares	65
5.2. Problema principal	67
5.3. Subproblemas.	74
5.3.1. El algoritmo de búsqueda lineal tipo Newton	75
5.4. El algoritmo del Lagrangiano aumentado	75
5.5. Conclusiones y trabajos futuros	76

Índice de figuras

2.1. Manifestaciones del síndrome del dengue.	8
2.2. Esquema de la dinámica de la enfermedad por compartimientos de huéspedes y vectores. Las flechas continuas representan la evolución de la población y las flechas punteadas representan las trasmisión del virus.	8
2.3. Población inicial de humanos susceptibles.	24
2.4. Clasificación de suelos para la simulación numérica.	25
2.5. Poblaciones iniciales de los vectores totales y separados por clases	26
2.6. Evolución de las poblaciones de los vectores a 10 días	27
2.7. Evolución de las poblaciones de los vectores a 30 días	28
2.8. Evolución de las poblaciones de los vectores a 60 días	29
2.9. Evolución de las poblaciones de los vectores a 90 días	30
2.10. Poblaciones iniciales de los huéspedes divididos respecto a su condición frente a la enfermedad	31
2.11. Evolución de las poblaciones de los huéspedes a 10 días	32
2.12. Evolución de las poblaciones de los huéspedes a 30 días	33
2.13. Evolución de las poblaciones de los huéspedes a 60 días	34
2.14. Evolución de las poblaciones de los huéspedes a 90 días	35
2.15. Evolución de las cantidades poblaciones de mosquitos en el tiempo.	36
2.16. Evolución de las cantidades de las poblaciones de humanos en el tiempo.	37
3.1. Población de mosquitos totales y susceptibles a la largo del tiempo con y sin control.	51
3.2. Población de mosquitos expuestos a la largo del tiempo con y sin control.	52
3.3. Población de mosquitos infecciosos a la largo del tiempo con y sin control.	53
3.4. Población de humanos expuestos a la largo del tiempo con y sin control.	54
3.5. Población de humanos infecciosos a la largo del tiempo con y sin control.	55
3.6. Población de humanos recuperados a la largo del tiempo con y sin control.	56

Índice de cuadros

2.1. Definición de parámetros de las ecuaciones, su representación física y algunos valores estimados.	17
2.2. Definición de parámetros de difusión.	22
2.3. Definición de parámetros de vientos.	22
2.4. Definición de parámetros de difusión.	23

Capítulo 1

Introducción

La interacción entre la matemática y ciencias como la biología y medicina no es reciente, sino que ha existido desde hace varios años atrás. Esta interacción resulta beneficiosa para ambas partes; para el matemático tratar de resolver los problemas que surgen en biología puede implicar el desarrollo de nuevas ideas, aplicaciones y teorías, mientras que para los biólogos o médicos el modelado matemático puede convertirse en una nueva herramienta y poderosa técnica de experimentación en casos muy difíciles o imposibles de llevar a cabo o como herramienta para la verificación de resultados. Además el desarrollo de modelos matemáticos de enfermedades tiene diversas motivaciones. Por un lado, mediante el modelado matemático se espera poder estimar el número total de afectados por una enfermedad para poder tomar medidas de prevención. Por otro lado se desea saber por qué algunas enfermedades aparecen de repente, se propagan rápidamente, y luego desaparecen igualmente rápido afectando solamente una pequeña parte de la población. Para el control de epidemias es muy importante poder evaluar la eficiencia de las vacunaciones con la finalidad de controlar, o a lo mejor totalmente extinguir, la enfermedad. Entre los acontecimientos que muestran los beneficios de esta interacción podemos destacar, sin ánimo de ser exhaustivos, los siguientes:

- El primer modelo matemático de una enfermedad fue propuesto por Daniel Bernoulli aproximadamente en 1760. Bernoulli trató de fundamentar la utilidad de la vacunación contra la viruela. En 1760 entregó a la Academia de Ciencias en París un trabajo titulado *Un intento de un nuevo análisis de la mortalidad causada por la viruela y las ventajas de la vacunación para prevenirla*. La pregunta era si la vacunación debía ser alentada a pesar de que algunas veces causaba la muerte. Más precisamente, el desafío era encontrar una manera de comparar el beneficio a largo plazo de la vacunación contra su riesgo inmediato de muerte.
- Uno de los pioneros en utilizar modelos matemáticos para describir el comportamiento de las epidemias fue el matemático, médico, naturalista y zoólogo escocés Ronald Ross, quien además en 1902 fue galardonado con el Premio Nobel de Fisiología y Medicina por demostrar que la malaria era contagiada por los mosquitos. Ross, en el año 1911, formuló un modelo matemático sencillo como apoyo de su argumentación que para erradicar el paludismo era suficiente con disminuir la población de mosquitos a un nivel bajo, sin necesariamente extinguirla. Este modelo se basó en la hoy denominada ley de masas, la cual establece que el número de contactos infecciosos por unidad de tiempo, es decir que producen enfermedad, es proporcional al número total de contactos entre individuos infecciosos y sanos.

- En 1926 McKendrick publicó un artículo sobre aplicaciones matemáticas a problemas médicos, que contenía varias ideas nuevas. En particular introdujo un modelo matemático para epidemias con un tiempo continuo que tomaba en consideración el aspecto estocástico de la infección y la recuperación. En el modelo de McKendrick las personas pueden pasar sucesivamente por tres estados, susceptibles, infectados y recuperados. Siguiendo el trabajo de Ross para la malaria supuso que durante un intervalo de tiempo infinitesimal dt , la probabilidad de que ocurra una nueva infección es proporcional a la cantidad de susceptibles y a la cantidad de infectados, y que la probabilidad de una nueva recuperación es proporcional a los infectados. Además fue uno de los primeros que representaron una buena aproximación a datos reales, por ejemplo de la plaga de Bombay de 1905/1906 y definiendo el concepto del llamado valor umbral fue posible por primera vez pronosticar la dimensión de una epidemia.

Tal como dijimos, la interacción entre la matemática y la biología o la medicina no es reciente. No obstante, esta interacción se ha incrementado notoriamente en los últimos años. No sería sino hasta entrado el siglo XX cuando la modelización matemática en epidemiología cobraría un real impulso, vislumbrándose sus enormes potencialidades. Son varios los factores que han contribuido a que esto se lleve a cabo, entre los cuales se pueden nombrar por ejemplo el alto grado de desarrollo tecnológico que hace que hoy sea posible realizar experimentos y mediciones antes inaccesibles y por lo tanto poder contar con grandes bases de datos e información, información que resulta difícil de entender sin el uso de herramientas matemáticas adecuadas. Otro factor, también ligado al anterior, es el desarrollo computacional actual que permite hacer cálculos y simulaciones que años atrás no eran posibles. Por último, también hay que destacar el desarrollo de herramientas y teorías matemáticas que resultan de gran utilidad a la hora de analizar y estudiar este tipo de fenómenos. Más allá de que el objetivo de cualquier modelización matemática sea contribuir a la resolución y el entendimiento de un problema mediante el aporte interdisciplinario que pueda hacer la Matemática, la modelización matemática de enfermedades contagiosas tiene además variadas virtudes que van desde proveer un marco teórico, brindar valiosas herramientas para combatir a las epidemias, contribuir a predecir futuros brotes y dar pautas de cómo actuar al respecto, hasta cuestiones de índole pragmáticas y económicas. Además otro importante contribución en la experimentación (por ejemplo por su implementación relativamente sencilla y de bajo costo) e incluso llega a ser indispensable cuando se trata de modelizaciones que involucra a humanos, pues la experimentación puede llegar a ser imposible o no ética. Los modelos matemáticos son de gran utilidad para el estudio, análisis y comprensión de diferentes procesos y fenómenos que surgen en las ciencias médicas y biológicas. A partir de los resultados y simulaciones obtenidas basadas en modelos matemáticos es posible tener un mejor entendimiento del fenómeno analizado. Las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, el modelado a partir de éstas, su resolución numérica y la creación de algoritmos son herramientas muy útiles, entre las varias existentes, para realizar lo mencionado anteriormente o con la finalidad de que estos modelos lleven tal vez a realizar alguna predicción sobre su comportamiento futuro.

En este trabajo se proponen principalmente dos áreas de estudio, por lo cual el trabajo está dividido en dos partes y cada una de las cuales describiremos brevemente a continuación. También relacionado a esto, el desarrollo de los temas tiene como objetivo que este trabajo pueda ser interpretado por personas con formación en distintas disciplinas como matemática, física o biología.

La primera parte está relacionada con un problema de control en la dinámica de un brote de fiebre dengue, enfermedad transmitida por el mosquito de la especie *Aedes Aegypti*

como vector. El objetivo es el desarrollo de un modelo basado en un problema de optimización que permita representar una estrategia de control por insecticida con el fin de minimizar los costos que involucra la compra/producción y distribución de insecticidas como también la cantidad de humanos afectados por la enfermedad, usando como información una variedad de datos obtenidos por sensores de gran escala sobre el terreno, datos meteorológicos y parámetros obtenidos mediante mediciones del terreno, datos conocidos de la especie de los mosquitos *Aedes Aegypti* y estadísticas sobre los huéspedes.

Mencionadas ya las ventajas de contar con un modelo matemático es relevante aclarar que la difusión geográfica de una epidemia es menos comprendida y mucho menos estudiada que la evolución y control temporal de enfermedades y epidemias. Sin embargo, el modelado de una forma que incluya suficiente realismo la dinámica espacio-temporal de una enfermedad puede ser de particular relevancia para el control de una epidemia o para comprender el proceso de trasmisión de la infección. La complicación radica en la manera de modelar la evolución de la enfermedad. De la bibliografía se destacan, entre otros, principalmente, tres enfoques para el modelado de una epidemia. En un primer enfoque, se emplea un modelo de “cajas” y consiste en dividir la poblaciones en compartimientos donde dentro de una de estas cajas se supone la población distribuida uniformemente y las relaciones y traspasos entre cajas están definidas de acuerdo a los parámetros dados y algunas probabilidades. En un segundo modelo, la propagación de una epidemia es descripta como un modelo continuo mediante el uso de una ecuación de difusión. Y más recientemente se han propuesto modelos de redes con el fin de representar las posibles transmisiones de la enfermedad mediante los contactos internos en la población.

Para modelar la densidad de la población de los vectores transmisores de la enfermedad en este trabajo nos basamos en el modelo dado por [20] donde se plantea a la evolución de las poblaciones de insectos, independientemente de si están o no infectados, como una ecuación de difusión en un terreno no homogéneo más un término de transporte que representa los efectos del viento sobre los insectos y un término adicional que representa la atracción de los humanos, o mamíferos, sobre los mosquitos. En el Capítulo 2 presentaremos en detalle esta ecuación, además de incluir términos de nacimientos y muertes. Además, considerando condiciones de frontera de Robin para así considerar que el flujo tanto de entrada como de salida de los insectos en el área de estudio es proporcional a la densidad de población en la frontera.

En cuanto a la cantidad de trabajos relacionados con la difusión espacio temporal de insectos modelada mediante un término de difusión, podemos decir que no es tan significativa y entre algunos de los trabajos en los que nuestro modelo está basado podemos citar a [25, 26]. Desde el punto de vista matemático, deseamos resolver un problema de control cuyo objetivo es en un horizonte de tiempo finito, minimizar la cantidad humanos que tienen contacto con la enfermedad y minimizar el uso de una herramienta para controlar la epidemia, en nuestro caso será una estrategia de fumigaciones, aunque de manera similar según se muestra en [8, 24] se puede emplear otra técnica como la introducción de mosquitos estériles.

En el Capítulo 3 se presentará con más detalle la definición de problema de control y también serán explicados de manera detallada los problemas que son de interés en este trabajo. Luego de analizar brevemente la existencia y estabilidad de las soluciones del problema de optimización, nos enfocaremos en nuestro objetivo principal de desarrollar una metodología para resolver tales problemas. En el mismo capítulo se procederá a mostrar la discretización utilizada para llevar a este problema de minimización continua a un problema de minimización en el discreto, el cual resultará ser un problema cuadrático.

En esta primera etapa se resolverá este problema mediante un algoritmo de optimización basado en el método adjunto con el fin de encontrar un minimizador.

La segunda parte del trabajo está orientada al desarrollo de un algoritmo capaz de resolver de manera eficiente el problema descrito en la primer parte, haciendo uso de la estructura cuadrática que éste tiene. Para esto se utilizará un método de optimización no lineal basado principalmente en el método del Lagrangiano aumentado en particular para problemas cuadráticos. En el Capítulo 4 se comenzará con un breve desarrollo de los detalles en que consisten los métodos de barrera y principalmente el método del Lagrangiano aumentado, continuando con la presentación del formato y de las características de éste método que usa la particular forma del problema a trabajar.

En el Capítulo 5 se definirá el algoritmo principal a implementar junto con los métodos que se utilizarán internamente para resolver subproblemas asociados. Luego en este mismo capítulo se darán las justificaciones teóricas de la buena definición y convergencia de este algoritmo. Aquí se darán los Lemas y Teoremas que garantizan la convergencia del método en forma teórica y se desarrollará con más detalles como es el método funciona mediante la resolución reiterada de un conjunto de subproblemas.

Parte I

Control en la dinámica de un brote de fiebre dengue.

Capítulo 2

Dinámica del brote de dengue

2.1. Motivación del problema

El objetivo de este trabajo es el de presentar un modelo matemático para llevar a cabo un control en la propagación espacio-temporal de una epidemia de dengue mediante poblaciones de mosquitos, los que serán los vectores, y de humanos, los cuales serán los huéspedes, en terrenos heterogéneos con datos de información a gran escala aplicando técnicas de optimización. Los datos ambientales a gran escala, tales como humedad, temperaturas, vientos y superficie del terreno son indicadores fundamentales en la distribución geográfica de insectos, importante en nuestro caso por ser el vector de la enfermedad y el uso de datos de sensores remotos se ha convertido más y más frecuente en la últimas décadas.

La fiebre dengue es una enfermedad viral, la cual es transmitida a humanos por las hembras del mosquito *Aedes Aegypti* cuando se alimentan. Existen diferentes formas de infección por dengue. De éste virus se conocen cuatro serotipos [13], en un paciente las manifestaciones, de más leves a severas, pueden ser algunas de las siguientes. Una infección asintomática. Presentar un cuadro benigno de fiebre o sensación de alza térmica, inespecífico y limitado asociado a malestar general o un cuadro más intenso de tipo febril conocido como dengue clásico (DC) el cual puede o no presentar manifestaciones hemorrágicas menores. Y finalmente en el otro extremo del espectro clínico las manifestaciones severas del dengue hemorrágico (DH) y de síndrome de shock por dengue o síndrome de choque por dengue (SCD) (Figura (2.1)). La infección por unos de los serotipos de dengue produce inmunidad permanente para éste tipo, pero solo una inmunidad cruzada temporal a los otros tipos [25]. Por lo cual individuos que vivan en zonas endémicas de dengue donde convivan distintos serotipos del virus pueden sufrir la enfermedad más de una vez.

Su proceso epidemiológico está dado de la siguiente manera. Los mosquitos hembras se infectan al momento de alimentarse de la sangre de un humano infectado durante el periodo infeccioso de la enfermedad que dura entre cuatro o cinco días. Un mosquito luego de que se infecta tiene un periodo mínimo de incubación extrínseca del virus de ocho a catorce días antes de que sea infeccioso. Cuando un mosquito en éste último estado pica a un humano susceptible, el virus es inyectado a su torrente sanguíneo y comienza un periodo de incubación intrínseco en el huésped que toma de cinco a siete días, con un promedio más cercano a los cinco días. Luego de este periodo comienza el periodo infeccioso del huésped comenzando de nuevo el proceso. Además existe una pequeña probabilidad de que el virus se transmita de forma vertical, esto es, un mosquito hembra infectado puede transmitirle el virus a su descendencia. En resumen, la figura (2.1) representa el flujo de los

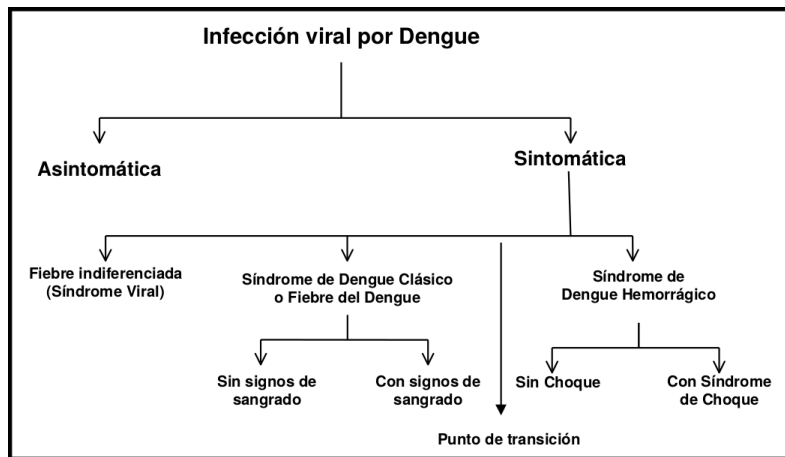


Figura 2.1: Manifestaciones del síndrome del dengue.

huéspedes y vectores entre las distintas clases respecto de la enfermedad.

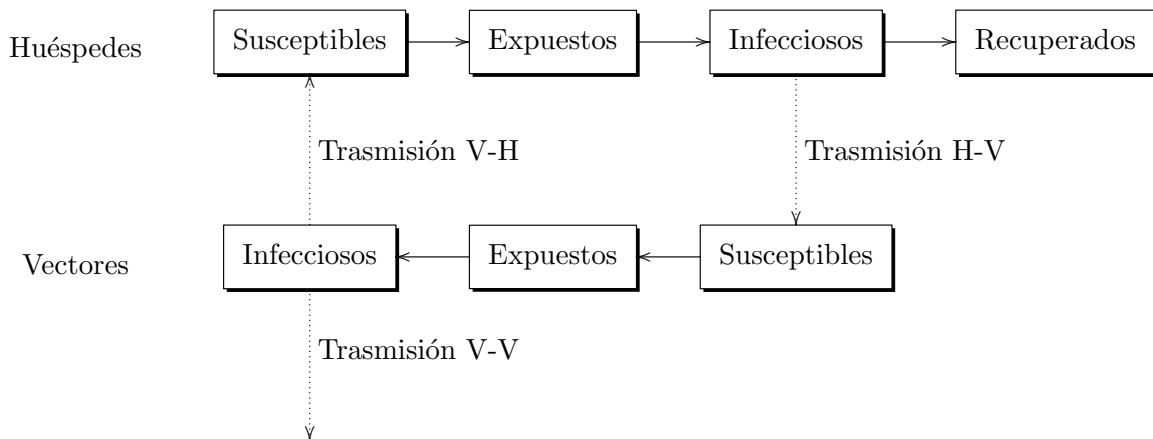


Figura 2.2: Esquema de la dinámica de la enfermedad por compartimientos de huéspedes y vectores. Las flechas continuas representan la evolución de la población y las flechas punteadas representan las trasmisión del virus.

Al día de hoy, como no existe vacuna o un tratamiento específico disponible, la única solución para un control del dengue es una estrategia de control sobre los vectores, es decir, evitar la proliferación de los mosquitos. Los mecanismos de control incluyen,

- Control químico de la población de mosquitos adultos mediante pulverización de insecticida.
- Control químico de las larvas mediante larvicidas.
- Reducción de los lugares de criaderos mediante la eliminación de agua residual y contenedores.
- Control biológico mediante el uso de parásitos y/o depredadores de los mosquitos.
- Manipulación genética de los mosquitos para producir mosquitos “refractarios” a la transmisión de la infección o insectos estériles.

Actualmente, dengue amenaza hasta un 40 % de la población mundial y hay entre 50-100 millones de infecciones anualmente (según World Health Organization, [1]) y a pesar de los esfuerzos para la erradicación y control a nivel global, la enfermedad vuelve a emerger en zonas donde anteriormente controles fueron alguna vez efectivos y emergiendo en otras áreas donde no estaba la enfermedad. Algunos de los primeros modelos propuestos para el control de la malaria, otra enfermedad transmitida por vector, propuesto por Ross [22] y luego modificado por Macdonald [12], han tenido mucha influencia tanto en el modelado como en la aplicación de un control para las enfermedades transmitidas por vectores.

Con la idea que la teoría de control optimal es una poderosa herramienta matemática para la toma de decisiones que involucren la dinámica de sistema complejos, consideramos que los modelos matemáticos pueden proveer una herramienta muy útil para el entendimiento y para mejorar la eficiencia en las estrategias para el control de la población de los vectores.

2.2. Modelo matemático

Una manera “natural” de modelar una enfermedad transmitida por un vector, como la fiebre del dengue, es dividir tanto las poblaciones de los vectores como la de los huéspedes en distintos compartimientos correspondientes a cada situación respecto a la enfermedad, en general, individuos susceptibles, expuestos o latentes, infecciosos y recuperados o removidos (ver en [15]). Luego, un sistema de ecuaciones diferenciales describe las relaciones entre los distintos compartimientos. Éstos tipos de modelos por compartimientos son generalmente utilizados para representar la transmisión de la infección, para determinar las condiciones de equilibrios [7, 26], el estudio del impacto de técnicas de control de los insectos [16, 8, 24], entre otros posibles estudios.

En nuestro enfoque, proponemos modelar tanto las dinámicas espaciales como temporales para los movimientos de los insectos y una evolución temporal de las poblaciones de humanos, considerando que estos permanecen en comunidades fijas. Consideraremos solo como vector de la enfermedad a la especie de mosquitos *Ae. Aegypti*. El modelo se basa en el propuesto en [20], el cual utiliza los parámetros determinados por los datos de sensores remotos (en nuestro caso información obtenida por medio de satélites) a fin de describir de una manera realista la propagación de la enfermedad. Datos de sensores remotos a gran escala se pueden adaptar para la descripción de la difusión de insectos según lo dado en [20].

2.2.1. Dinámica de los insectos

Para el modelado de la dinámica de la densidad de la población de los mosquitos respecto al tiempo y el espacio utilizaremos la siguiente ecuación de reacción–difusión, basada en la ecuación ya propuesta en [25],

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \operatorname{div}(D_R \nabla v) - \langle D_W W, \nabla v \rangle + \operatorname{div}(Kv \nabla h) + \alpha - \beta, \quad (2.1)$$

para todo para (x, t) en un dominio $\Omega \times (0, T]$ con condiciones de frontera e iniciales de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial \eta} &= a v & \text{en } \Gamma \times (0, T], \\ v &= v_0 & \text{en } \Omega \times \{0\}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

donde los términos de esta ecuación son los siguientes:

- La densidad de los mosquitos está dada por la función $v : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, con $v(x, t)$ representando la densidad de mosquitos en el punto espacial x y en el instante temporal t .
- ∇f denota el vector gradiente de una función $f : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ respecto a la variable espacial $x \in \mathbb{R}^2$.
- La función $D_R : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{2 \times 2}$ está dada por el efecto del suelo en la difusión de los insectos. Esto es, un factor que muestra como varía el desplazamiento de los mosquitos dependiendo del tipo de suelo.
- Los datos del viento están representados en el campo vectorial $W : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$ y $D_W : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{2 \times 2}$ es una función que toma en cuenta los efectos del suelo sobre el viento. El campo vectorial W representa los datos de la dirección y velocidad del viento, la función D_W es una representación de los efectos locales del terreno sobre el flujo de los vientos.
- La densidad de la población humana es la función $h : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.
- La intensidad de la fuerza de atracción de los humanos sobre los mosquitos es $K : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{2 \times 2}$.
- Las funciones de natalidad y mortalidad de los mosquitos son $\alpha : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ y $\beta : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ respectivamente.
- La condición inicial del problema es la función $v_0 : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$.
- $\Omega \in \mathbb{R}^2$ es la región espacial de estudio, Γ es la frontera de Ω y $T \in \mathbb{R}$ es el horizonte de tiempo.
- η es el vector normal exterior a Γ .
- a es un escalar con $a \in [0, 1]$ que representa la cantidad de flujo de los insectos en la frontera de Ω .

A continuación daremos una breve descripción de estos términos.

Por lo visto en [20] y en [25] podemos decir que para el caso de que la velocidad promedio de los insectos es menor a 1 m/s (un metro por segundo), como es el caso del mosquito del A. Aegypti y considerando un área de estudio mayor a 20 m \times 20 m o 30 m \times 30 m es suficiente para utilizar el proceso de reacción–difusión como un buen representante de la dinámica de la población de los mosquitos para su modelado. Esta resolución en una imagen satelital que corresponde a los datos que se pueden obtener de un satélite tipo SPOT.

La función D_R evaluada en un punto (x, t) corresponde a una matriz de dimensión 2×2 que consta de la información del área Ω separada en clases mediante los datos obtenidos por los canales de ondas visibles e infrarrojas de los satélites. La clasificación que utilizaremos será en bosques, campos, suelos secos, suelos húmedos y urbano. Con estos datos junto con datos topológicos se construye la función D_R .

Los datos de vientos para generar el campo vectorial W se obtienen de estaciones meteorológicas juntos con técnicas de interpolación para tener los datos en cada punto

x . Luego, en relación a $D_R(x, t)$, se obtiene $D_W(x, t)$ que es otra matriz 2×2 tal que al multiplicar el vector $W(x, t)$ por la matriz $D_W(x, t)$ a izquierda refleja los efectos del terreno sobre los vientos.

La función h causa sobre el flujo de los mosquitos una fuerza de atracción. La orientación de esta fuerza está dada por el vector $\nabla h(x, t)$ que indica la dirección de máximo crecimiento de la población humana en el punto x y en el instante t y la intensidad está dada por la función $K(x, t)$ de tal forma que esta función refleja el rango y deformación de la fuerza definida por $\nabla h(x, t)$.

La natalidad $\alpha(x, t)$ indica la aparición de mosquitos adultos, este parámetro está relacionado con la biología de vector y se puede estimar usando datos estadísticos del ambiente como temperatura, lluvias y disponibilidad de sitios de nacimiento. Para esto se pueden obtener algunos datos de media escala, como temperatura y lluvias por ejemplo, mediante sensores en el lugar o de centros meteorológicos, otros mediante la información de los sensores a gran escala de los satélites y algunos a pequeña escala, como los sitios de puesta de huevos, se pueden determinar mediante los censos y campañas de relevamientos en las casas de las ciudades. Luego para la implementación del modelo se tomará en cuenta la variación de insectos alrededor de los lugares de nacimientos. Así basado en lo propuesto por [26, 2], diremos que el parámetro de nacimientos estará determinado por

$$\alpha(x, t) = r e^{-m_A \tau_A} v(x, t - \tau_A) \max \left\{ 0, 1 - \frac{v(x, t - \tau_A)}{\xi} \right\},$$

donde r es el parámetro de reproducción de los mosquitos, m_A y τ_A son los parámetros de mortalidad acuática y el tiempo de desarrollo acuático, respectivamente, que incluyen todas las etapas acuáticas (huevos, larvas y pupas) y ξ la capacidad de carga del ambiente, luego con el fin de simplificar los cálculos consideraremos que la densidad de población es mucho menor a la capacidad de carga de tal forma que representaremos el crecimiento logístico por un crecimiento exponencial en su lugar, entonces los nacimientos de mosquitos resulta de la siguiente forma,

$$\alpha(x, t) = r(x, t) e^{-m_A \tau_A} v(x, t - \tau_A). \quad (2.3)$$

Finalmente el término de mortalidad $\beta(x, t)$ es un término que incluye tanto la mortalidad natural de los mosquitos y la mortalidad debido a los efectos del insecticida. Este término entonces depende de un parámetro de mortalidad $m(x, t)$ y de la densidad de la población de vectores.

$$\beta(x, t) = m(x, t) v(x, t), \quad \forall x \in \Omega, t \in (0, T], \quad (2.4)$$

donde el parámetro $m(x, t)$ lo consideramos como la suma de dos términos m_1 y m_2 con $m_1(x, t)$ representando la mortalidad natural de los insectos y está dada por factores climáticos como temperatura y humedad y $m_2(x, t)$ representando la eficiencia del insecticida, para esto proponemos que esta eficiencia es proporcional a la cantidad de insecticida utilizada, esto es

$$m_2(x, t) = c_f \kappa(x, t), \quad (2.5)$$

para κ la cantidad utilizada. Para nuestro modelo consideraremos que el insecticida afecta solo la mortalidad del mosquito en su etapa adulta y no en su etapa acuática. Por lo tanto, podemos expresar a $m(x, t)$ como

$$m(x, t) = m_1(x, t) + m_2(x, t). \quad (2.6)$$

2.2.2. Dinámica de la enfermedad

La población de vectores será dividida en tres clases, las cuales dependerán del estado del vector respecto de la infección. Entonces llamaremos mosquitos susceptibles a la enfermedad a la subpoblación que no ha sido expuesta al virus, denotándolos por $v_S(x, t)$, vectores expuestos a la subpoblación de vectores infectados con el virus durante el periodo extrínseco de incubación, es decir, la población de mosquitos que han contraído el virus pero no son capaces de transmitirlo a un humano, cuya subpoblación denotaremos por $v_E(x, t)$ y finalmente llamaremos vectores infecciosos, a la población de mosquitos portadores del virus capaces de transmitirlo y los denotaremos por $v_I(x, t)$. Para nuestro modelo consideraremos que una vez infectado un mosquito permanece en dicho estado el resto de su vida. Entonces tenemos que

$$v(x, t) = v_S(x, t) + v_E(x, t) + v_I(x, t), \quad \forall x \in \Omega, t \in (0, T]. \quad (2.7)$$

Para cada una de estas poblaciones v_S , v_E y v_I en nuestro modelo propondremos que están sujetas a la misma dinámica que la población total, en principio suponiendo que el contagio con el virus no influye sobre la conducta de los mosquitos, junto con las transiciones de clases correspondientes. Con esto podemos deducir las dinámicas de las subpoblaciones v_S , v_E y v_I de la ecuación (2.1) modificando los términos de “nacimientos” y “muertes” y luego deducir la densidad de población total v de (2.7).

Respecto a la población de humanos, a esta la separaremos en cuatro subclases de tal manera que se verifique

$$h(x, t) = h_S(x, t) + h_E(x, t) + h_I(x, t) + h_R(x, t), \quad \forall x \in \Omega, t \in (0, T]. \quad (2.8)$$

Primero denotaremos como $h_S(x, t)$ a la población de humanos susceptibles, $h_E(x, t)$ a la población de humanos expuestos a la enfermedad en el periodo intrínseco de incubación, es decir, humanos portadores del virus pero sin la capacidad de transmitirlo hacia los mosquitos que los piquen, $h_I(x, t)$ a los humanos infecciosos y finalmente $h_R(x, t)$ a la subpoblación de humanos recuperados de la infección. Para simplificar el modelado se considerará que la población total de humanos solo varía respecto de las muertes ocasionadas por la infección, es decir, no consideramos términos de nacimientos ni de muertes ocasionadas por otros factores y además consideraremos que una vez recuperado un individuo este permanece inmune al dengue.

Entonces de (2.1), para la clase v_S , podemos escribir la siguiente ecuación

$$\frac{\partial v_S}{\partial t} = \operatorname{div}(D_R \nabla v_S) - \langle D_W W, \nabla v_S \rangle + \operatorname{div}(K v_S \nabla h) + \alpha_S - \beta_S, \quad (2.9)$$

para todo $(x, t) \in \Omega \times (0, T]$, junto con condiciones de frontera análogas a las dadas en (2.2)

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_S}{\partial \eta} &= a_S v_S & \text{en } \Gamma \times (0, T], \\ v_S &= v_{S0} & \text{en } \Omega \times \{0\}, \end{aligned} \quad (2.10)$$

donde a_S es una constante y v_{S0} es una función definida para todo $x \in \Omega$ y para este caso el término α_S representa el número de mosquitos que nacen susceptibles a la enfermedad (nosotros consideramos que existe una posibilidad de transmisión vertical del virus, es decir, de una hembra infectada a su descendencia y por esto no todos los nuevos mosquitos adultos son susceptibles) y β_S representa ahora tanto la mortalidad de esta subpoblación de mosquitos más el número de mosquitos susceptibles que contraen el virus por picar a un

humano infectado. Con más detalles podemos modelar el término α_S como los nacimientos totales de mosquitos menos la cantidad de mosquitos que nacen ya con el virus, lo cual es, la cantidad total de nacimientos α multiplicado por la tasa de transmisión vertical del virus c_{vv} y por la razón de mosquitos infectados en el instante $t - \tau_A$, esto es,

$$\alpha_S(x, t) = \alpha(x, t) - c_{vv} \alpha(x, t) \frac{v_I(x, t - \tau_A)}{v(x, t - \tau_A)}, \quad \forall x \in \Omega, t \in (0, T]. \quad (2.11)$$

La función de “mortalidad” β_S en este caso la suma de dos términos, uno que representa la mortalidad de los insectos en la clase de los susceptibles

$$\beta_{S1}(x, t) = \beta(x, t) \frac{v_S(x, t)}{v(x, t)}, \quad (2.12)$$

y un segundo término que denota el cambio de clase de mosquitos susceptibles a expuestos,

$$\beta_{S2}(x, t) = c_{hv} n_B v_S(x, t) \frac{h_I(x, t)}{h(x, t)}, \quad \forall x \in \Omega, t \in (0, T], \quad (2.13)$$

donde c_{hv} es la tasa de transmisión del virus de humano a mosquito y n_B representa la cantidad de picaduras por día de un mosquito. Por lo tanto tenemos que

$$\beta_S(x, t) = \beta_{S1}(x, t) + \beta_{S2}(x, t). \quad (2.14)$$

Es posible asumir que el número de picaduras de un mosquito depende de la densidad de la población humana, para esto proponemos como en [26, 10] para el caso del dengue y [10] en el caso de malaria, que la elección para $n_B(h(x, t))$ sea de la forma

$$n_B(h(x, t)) = \frac{\rho h(x, t)}{c + s h(x, t)}, \quad (2.15)$$

con ρ el rango de búsqueda de un mosquito, un parámetro de rescaldado tal que cuando $h(x, t)$ es pequeño la tasa de crecimiento de la población de mosquitos expuestos se aproxima a $c_{hv} h_I(x, t)$ y $s = u \rho$ donde u es el tiempo que tarda un mosquito en consumir la sangre de “una picada”.

En el caso de la subpoblación de los mosquitos expuestos, con un razonamiento análogo al ya hecho para la población v_S , podemos plantear las ecuaciones

$$\frac{\partial v_E}{\partial t} = \operatorname{div}(D_R \nabla v_E) - \langle D_W W, \nabla v_E \rangle + \operatorname{div}(K v_E \nabla h) + \alpha_E - \beta_E, \quad (2.16)$$

para todo $(x, t) \in \Omega \times (0, T]$, junto con condiciones de frontera análogas a la ya mencionadas

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_E}{\partial \eta} &= a_E v_E & \text{en } \Gamma \times (0, T], \\ v_E &= v_{E0} & \text{en } \Omega \times \{0\}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Para la función de natalidad, en este caso representa no los nacimientos sino los nuevos individuos en esta clase. Entonces se cumple que $\alpha_E(x, t) = \beta_{S2}(x, t)$. Por otro lado, el término de mortalidad aquí representa la muerte de los mosquitos en esta clase más los que cambian de estado frente a la enfermedad. Además podemos asumir que la mortalidad de los mosquitos es siempre la misma sin importar en qué clase de población se encuentra. Por lo tanto β_E puede ser visto como la suma de dos términos. Por un lado mortalidad común a

los insectos por la probabilidad de que el insecto esté infectado. Y por otro un término que representa los mosquitos que terminan su periodo de incubación y pasan a la clase v_I en el punto x . Esto es, si denotamos por τ_E el tiempo de incubación extrínseco, los mosquitos que en el instante t pasan de la clase v_E a v_I son los que en el instante $t - \tau_E$ ingresaban a la clase de los expuestos. Adicionalmente, dado los movimientos de los insectos, debemos estimar cual es la densidad de los insectos en un punto x . Para esto calcularemos la suma sobre el total de la población de los mosquitos que ingresaron en la clase de expuestos sobre todo el dominio Ω en el instante $t - \tau_E$ y redistribuyendo la población total sobre todos los puntos donde la población de mosquitos expuestos no es nula. Todo esto lo podemos escribir de la siguiente manera, en el caso de que $\int_{\Omega} v_E(x, t) dx > 0$

$$\begin{aligned}\beta_E(x, t) &= \beta(x, t) \frac{v_E(x, t)}{v(x, t)} + \left(\int_{\Omega} \alpha_E(x, t - \tau_E) dx \right) \frac{v_E(x, t)}{\int_{\Omega} v_E(x, t) dx} \\ &= \beta_{E1}(x, t) + \beta_{E2}(x, t), \quad \forall x \in \Omega, t \in (0, T],\end{aligned}\tag{2.18}$$

y $\beta_E(x, t) = 0$, $\forall x \in \Omega$, $t \in (0, T]$, en caso de que $\int_{\Omega} v_E(x, t) dx = 0$.

Ahora, respecto a la población de mosquitos v_I , de igual manera que antes la dinámica viene dada por la misma ecuación (2.1) con términos α_I y β_I en lugar de los términos de nacimientos y muertes respectivamente. El término α_I está dado por los mosquitos que pasan de la clase v_E a la clase v_I más un término que representa la transmisión vertical del virus de mosquitos adultos a su descendencia dado por los nacimientos totales multiplicado por la razón de mosquitos infectados y por la tasa de transmisión vertical, esto es

$$\alpha_I(x, t) = \beta_{E2}(x, t) + c_{vv} \alpha(x, t) \frac{v_I(x, t - \tau_A)}{v(x, t - \tau_A)}, \quad \forall x \in \Omega, t \in (0, T].\tag{2.19}$$

El término de mortalidad está dado solo por la tasa de mortalidad natural de los insectos,

$$\beta_I(x, t) = \beta(x, t) \frac{v_I(x, t)}{v(x, t)}, \quad \forall x \in \Omega, t \in (0, T].\tag{2.20}$$

Por otro lado, respecto de la dinámica de la población de huéspedes, tendremos las siguientes ecuaciones para todo $x \in \Omega$, $t \in (0, T]$. En primer lugar para la variación de los humanos susceptibles $\partial h_S / \partial t$, será una disminución que corresponde a la cantidad de personas que se convierten en infectados por una picadura de mosquito. Esto es, el producto entre el número de humanos susceptibles, la probabilidad de encontrar un mosquito virósico, la cantidad de picadura diarias que recibe un humano y la tasa de transmisión del virus del mosquito hacia el huésped. Luego la ecuación que modela esto resulta,

$$\frac{\partial h_S}{\partial t}(x, t) = -c_{vh} \tilde{n}_B h_S(x, t) \frac{v_I(x, t)}{v(x, t)}.\tag{2.21}$$

Además, usando el hecho de que el total de picaduras hechas por mosquitos tiene que ser igual al total de picaduras recibidas por humano se tiene que

$$n_B v(x, t) = \tilde{n}_B h(x, t),$$

o equivalentemente cuando $h(x, t) \neq 0$

$$\tilde{n}_B = n_B \frac{v(x, t)}{h(x, t)},$$

entonces la ecuación (2.21) queda de la forma,

$$\frac{\partial h_S}{\partial t}(x, t) = -c_{vh} n_B(h(x, t)) h_S(x, t) \frac{v_I(x, t)}{h(x, t)}. \quad (2.22)$$

Con el fin de simplificar notación denotaremos

$$p(x, t) = c_{vh} n_B(h(x, t)) h_S(x, t) \frac{v_I(x, t)}{h(x, t)},$$

así podemos reescribir (2.21) de manera más compacta como

$$\frac{\partial h_S}{\partial t}(x, t) = -p(x, t). \quad (2.23)$$

Para la población de humanos expuestos su variación estará dada por la introducción a esta clase de todos los individuos que dejan la clase de susceptibles menos el número de personas que se convierten en infecciosas luego del periodo de incubación intrínseco, al que denotaremos por τ_I . Esto es,

$$\frac{\partial h_E}{\partial t}(x, t) = p(x, t) - p(x, t - \tau_I). \quad (2.24)$$

De manera análoga se puede pensar que la variación en la clase de humanos infecciosos está dada por los humanos que pasan de la etapa de expuestos a infecciosos menos el número de personas que se convierten en recuperados luego de un periodo de tiempo τ_R y menos la cantidad de personas que fallecen por la enfermedad, esto lo representaríamos con una tasa de mortalidad de los humanos por la infección m_h . De esto proponemos la siguiente ecuación,

$$\frac{\partial h_I}{\partial t}(x, t) = p(x, t - \tau_I) - p(x, t - \tau_I - \tau_R) - m_h \cdot \frac{h_I(x, t)}{h(x, t)}. \quad (2.25)$$

Finalmente la variación en la población de humanos recuperados viene dada por la suposición de que la única variación en la población total es la dada por las muertes causadas por la enfermedad, entonces tenemos que,

$$\frac{\partial h_R}{\partial t}(x, t) = p(x, t - \tau_I - \tau_R). \quad (2.26)$$

Así podemos llegar a un modelo del sistema que representa la dinámica de la enfermedad donde los términos y parámetros que aparecen en las ecuaciones (2.9)-(2.26) están dados por los que se describen en el cuadro (2.1). Los valores aquí presentados son valores obtenidos de distintos artículos [4, 25, 24, 18, 21, 11] y son representativos como parámetros generales, ya que dado sus orígenes su estimación puede variar mucho de una fuente a otra. En resumen y haciendo de un abuso de notación no escribiendo las variables, resulta

el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial v_S}{\partial t} &= \operatorname{div}(D_R \nabla v_S) - \langle (D_W W), \nabla v_S \rangle + \operatorname{div}(K v_S \nabla h) + \alpha_S - \beta_S, \\
\frac{\partial v_E}{\partial t} &= \operatorname{div}(D_R \nabla v_E) - \langle (D_W W), \nabla v_E \rangle + \operatorname{div}(K v_E \nabla h) + \alpha_E - \beta_E, \\
\frac{\partial v_I}{\partial t} &= \operatorname{div}(D_R \nabla v_I) - \langle (D_W W), \nabla v_I \rangle + \operatorname{div}(K v_I \nabla h) + \alpha_I - \beta_I, \\
v &= v_S + v_E + v_I, \\
\frac{\partial h_S}{\partial t} &= -p(x, t), \\
\frac{\partial h_E}{\partial t} &= p(x, t) - p(x, t - \tau_I), \\
\frac{\partial h_I}{\partial t} &= p(x, t - \tau_I) - p(x, t - \tau_I - \tau_R) - m_h \frac{h_I}{h}, \\
\frac{\partial h_R}{\partial t} &= p(x, t - \tau_I - \tau_R), \\
h &= h_S + h_E + h_I + h_R, \\
C_\Gamma &= (a_S, a_E, a_I, b_S, b_E, b_I, b_R), \\
C_0 &= (v_0, v_{E0}, v_{I0}, h_{S0}, h_{E0}, h_{I0}, h_{R0}),
\end{aligned} \tag{2.27}$$

donde imponemos la condición de frontera de Robin de tal manera que resulta

$$C_\Gamma(x, t) = \left(\frac{\partial v_S}{\partial \eta}(x, t), \frac{\partial v_E}{\partial \eta}(x, t), \frac{\partial v_I}{\partial \eta}(x, t), \frac{\partial h_S}{\partial \eta}(x, t), \frac{\partial h_E}{\partial \eta}(x, t), \frac{\partial h_I}{\partial \eta}(x, t), \frac{\partial h_R}{\partial \eta}(x, t) \right)$$

con η el vector normal exterior a la frontera Γ y las condiciones iniciales son

$$C_0(x) = (v_S(x, 0), v_E(x, 0), v_I(x, 0), h_S(x, 0), h_E(x, 0), h_I(x, 0), h_R(x, 0)).$$

2.3. Discretización del modelo

Para llevar a cabo cualquier análisis de las ecuaciones del modelo propuesto, excepto en el caso de un modelo muy simplificado, el método más conveniente es llevar a cabo una discretización de las ecuaciones. En esta sección presentamos y describimos brevemente el método de diferencias finitas, método numérico que emplearemos para resolver el problema planteado en la sección previa.

El método de diferencias finitas (MDF) se basa en aproximar una ecuación diferencial o más precisamente la derivada de una función por una fórmula algebraica. Esta fórmula algebraica representa una discretización del cociente incremental por medio de una ecuación en diferencias.

	Definición	Unidad	Valores
v	Densidad de los vectores	$[I][L]^{-2}$	–
v_S	Densidad de los vectores susceptibles	$[I][L]^{-2}$	–
v_E	Densidad de los vectores expuestos	$[I][L]^{-2}$	–
v_I	Densidad de los vectores infecciosos	$[I][L]^{-2}$	–
h_S	Densidad de personas susceptibles	$[H][L]^{-2}$	–
h_E	Densidad de personas expuestas	$[H][L]^{-2}$	–
h_I	Densidad de personas infecciosas	$[H][L]^{-2}$	–
h_R	Densidad de personas recuperadas	$[H][L]^{-2}$	–
ρ	Distancia de búsqueda de alimento de un mosquito	$[L]$	–
u	Tiempo del consumo del alimento de un mosquito	$[T]$	–
c	Parámetro de rescaldado	$[T][H][L]^{-1}$	–
m_A	Mortalidad de los mosquitos en estado acuático	$[I][L]^{-2}[T]^{-1}$	–
m_1	Mortalidad natural de los mosquitos	$[I][L]^{-2}[T]^{-1}$	–
m_2	Mortalidad por insecticida de los mosquitos	$[I][L]^{-2}[T]^{-1}$	–
m_h	Mortalidad de los humanos por el virus	$[H][L]^{-2}[T]^{-1}$	–
r	Parámetro de reproducción de los mosquitos	$[\]$	variable
c_{hv}	Tasa de transmisión del virus de humanos a mosquitos	$[\]$	0,9
c_{vh}	Tasa de transmisión del virus de mosquitos a humanos	$[\]$	0,9
c_{vv}	Tasa de transmisión del virus de mosquitos a mosquitos	$[\]$	0,003
τ_A	Tiempo de desarrollo de etapa acuática de los mosquitos	$[T]$	7-12 días
τ_E	Tiempo de incubación extrínseco del virus	$[T]$	7-12 días
τ_I	Tiempo de incubación intrínseco del virus	$[T]$	4-6 días
τ_R	Tiempo de recuperación de la enfermedad en humanos	$[T]$	4-7 días

$[I]$	Cantidad de insectos
$[H]$	Cantidad de humanos
$[T]$	Tiempo
$[L]$	Longitud

Cuadro 2.1: Definición de parámetros de las ecuaciones, su representación física y algunos valores estimados.

Para ser más claro, consideremos $f(x)$ una función $n+1$ veces derivable en el intervalo (a, b) . Por el Teorema de Taylor tenemos que para todo $x \in (a, b)$ y Δx suficientemente pequeño de manera tal que $x + \Delta x \in (a, b)$

$$f(x + \Delta x) = f(x) + \frac{f'(x)}{1!} \Delta x + \frac{f''(x)}{2!} (\Delta x)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x)}{n!} (\Delta x)^n + R_n(x + \Delta x),$$

donde $n!$ denota el factorial de n y $R_n(x)$ es el resto o residuo, el cual representa la diferencia entre el polinomio de Taylor de grado n y el valor original de la función. Ahora, si nos restringimos sólo a la derivada de primer orden de la función tenemos

$$f(x + h) = f(x) + f'(x)\Delta x + R_1(x + \Delta x),$$

lo cual es equivalente a

$$f'(x) = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} - \frac{R_1(x + \Delta x)}{\Delta x}.$$

Por lo tanto, para Δx suficientemente pequeño, obtenemos

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}.$$

Esta última ecuación nos servirá como base para definir los distintos tipos de diferencias. Primero, discretizamos el intervalo donde está definida la función obteniendo así una grilla determinada por los puntos o nodos x_i , con $i = 1, \dots, M$ y donde $x_1 = a$ y $x_M = b$. Asumimos además que $x_i - x_{i-1} = \Delta x$, es decir, una grilla igualmente espaciada o equiespaciada. Luego obtenemos, para $i = 2, \dots, M-1$, la **diferencia hacia adelante** o **forward difference** mediante la ecuación

$$D_+ f(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{\Delta x} = f'(x_i) + \frac{1}{2} f''(\xi) \Delta x, \quad (2.28)$$

donde ξ es un punto perteneciente al intervalo (x_i, x_{i+1}) . Del mismo modo tenemos la **diferencia hacia atrás** o **backward difference** como:

$$D_- f(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{\Delta x} = f'(x_i) - \frac{1}{2} f''(\xi) \Delta x, \quad (2.29)$$

en este caso con $\xi \in (x_{i-1}, x_i)$. Por último, la **diferencia central** o **simétrica** se obtiene mediante la ecuación:

$$D_0 f(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2\Delta x} = f'(x_i) + \frac{\Delta x^2}{6} f'''(\xi). \quad (2.30)$$

El error cometido al utilizar un método numérico puede definirse como la diferencia que existe entre el valor exacto de la solución de la ecuación y el valor obtenido utilizando la aproximación numérica. Hay dos fuentes de generación de errores en el método de diferencias finitas y en general en todo método numérico. La primera es la relacionada a los errores de redondeo debido a la pérdida o falta de precisión causada por la representación decimal finita realizada por la computadora. La otra fuente está asociada con el error de truncamiento o discretización, el cual se puede definir como la diferencia entre al valor exacto y el valor obtenido utilizando diferencias finitas asumiendo aritmética perfecta, es decir asumiendo que no existen errores de redondeo. Para ser más precisos si $f'(x_i)$

denota el valor exacto de la derivada en el punto x_i y $Df(x_i)$ representa el valor calculado utilizando diferencias finitas, el error de truncamiento es $f'(x_i) - Df(x_i)$. Por lo tanto, de acuerdo a las ecuaciones (2.28) y (2.29) tenemos que el error de truncamiento cometido usando diferencias hacia adelante o hacia atrás es proporcional al paso Δx . En este caso se dice que el error es de primer orden y se denota por $O(\Delta x)$. Por su parte para el caso de diferencia central el error de truncamiento resulta ser proporcional a Δx^2 , o sea que para Δx pequeño se comete un error menor que en los casos anteriores. En este caso se dice que el error es de segundo orden y se denota por $O(\Delta x^2)$.

Las fórmulas de diferencias finitas para aproximar derivadas de mayor orden pueden ser obtenidas usando las fórmulas para derivadas de menor orden. Por ejemplo, la fórmula de diferencia central para aproximar una derivada de segundo orden f'' está dada por la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} D_0^2 f(x_i) &= D_+ D_- f(x_i) = D_+ \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{\Delta x} \\ &= \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}))}{\Delta x^2} = f''(x_i) + \frac{\Delta x^2}{12} f^{(iv)}(\xi). \end{aligned}$$

Notemos que nuevamente la diferencia central resulta ser una aproximación de segundo orden.

En el caso en que estemos tratando con una función de n variables, las discretizaciones de las derivadas parciales se definen de manera análoga. Para nuestro caso particular, tenemos $n = 3$, dadas dos variables espaciales y una temporal.

Ahora desarrollaremos con más detalle cómo es la discretización que utilizaremos en nuestro problema.

Llamemos Ω al dominio, tomaremos un grupo de puntos espaciales (x_j, y_i) que serán los nodos de nuestra discretización.

Supongamos que el dominio Ω , es un dominio rectangular tal que

$$\Omega = \{(x, y) \mid x \in [0, N], y \in [0, M]\}, \quad (2.31)$$

entonces con el fin de resolver numéricamente las ecuaciones mediante el método de diferencias finitas los nodos serán

$$(x_j, y_i) = \left((j-1)\Delta L + \frac{\Delta L}{2}, (m-i)\Delta L + \frac{\Delta L}{2} \right),$$

donde $i \in \{1, \dots, m\}$, $j \in \{1, \dots, n\}$ y $n, m \in \mathbb{N}$, asumiendo que $x_j - x_{j-1} = y_i - y_{i-1} = \Delta L \in \mathbb{R}$ son tales que $n \cdot \Delta L = N$ y $m \cdot \Delta L = M$.

Esta es una transformación lineal que lleva las coordenadas cartesianas usuales a las coordenadas matriciales.

Respecto a la variable temporal, teniendo en cuenta que el horizonte de tiempo es T , tomaremos l intervalos tales que $l \cdot \Delta t = T$. Así consideraremos los instantes de tiempos $t_k = (k-1)\Delta t$ con $k = 1, \dots, l+1$ y representaremos cada intervalo de la forma $[t_k, t_{k+1})$ por el instante t_k para $k = 1, \dots, l$.

Entonces, suponiendo que $f : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ y $F = (F_1, F_2) : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$, utilizaremos la notación,

$$f_{ij}^k = f(x_j, y_i, t_k) \quad (2.32)$$

y la discretización de las ecuaciones diferenciales que proponemos usando un esquema de diferencia finitas centradas con paso $\Delta L/2$ resultan de la siguiente manera.

La discretización de las primeras derivadas espaciales resultan

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x}(x_j, y_i, t_k) &\approx \frac{f(x_j + \frac{\Delta L}{2}, y_i, t_k) - f(x_j - \frac{\Delta L}{2}, y_i, t_k)}{\Delta L} \\ &= \frac{f_{i,j+1/2}^k - f_{i,j-1/2}^k}{\Delta L}, \end{aligned} \quad (2.33)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial y}(x_j, y_i, t_k) &\approx \frac{f(x_j, y_i + \frac{\Delta L}{2}, t_k) - f(x_j, y_i - \frac{\Delta L}{2}, t_k)}{\Delta L} \\ &= \frac{f_{i+1/2,j}^k - f_{i-1/2,j}^k}{\Delta L}, \end{aligned} \quad (2.34)$$

y la discretización de la divergencia resulta

$$\begin{aligned} \text{div}(F(x_j, y_i, t_k)) &\approx \frac{F_1(x + \frac{\Delta L}{2}, y, t_k) - F_1(x - \frac{\Delta L}{2}, y, t_k)}{\Delta L} \\ &\quad + \frac{F_2(x, y + \frac{\Delta L}{2}, t_k) - F_2(x, y - \frac{\Delta L}{2}, t_k)}{\Delta L} \\ &= \frac{F_{1,i,j+1/2}^k - F_{1,i,j-1/2}^k}{\Delta L} + \frac{F_{2,i+1/2,j}^k - F_{2,i-1/2,j}^k}{\Delta L}, \end{aligned} \quad (2.35)$$

donde $f_{i,j+1/2} = \frac{f_{i,j+1} + f_{i,j}}{2}$, $f_{i,j-1/2} = \frac{f_{i,j} + f_{i,j-1}}{2}$, $f_{i+1/2,j} = \frac{f_{i+1,j} + f_{i,j}}{2}$, $f_{i-1/2,j} = \frac{f_{i-1,j} + f_{i,j}}{2}$.

Esta discretización la proponemos así para la simplificación en el momento de aproximar las derivadas de segundo orden con el fin de solo utilizar los nodos adyacentes al punto donde se evalúa la derivada.

Y para la discretización de la derivada temporal utilizaremos un esquema implícito, es decir, diferencia finita hacia adelante,

$$\frac{\partial f}{\partial t}(x_j, y_i, t_k) \approx \frac{f_{i,j}^{k+1} - f_{i,j}^k}{\Delta t}. \quad (2.36)$$

Como nota importante a tener en cuenta es que, mediante el esquema de diferencias finitas elegido, el hecho que la discretización centrada en nodos correspondientes a elementos de la frontera del nuevo dominio discretizado, la cual llamaremos $\Gamma_D = \{(i, j) \mid i \in \{1, m\} \vee j \in \{1, n\}\}$, involucra nodos que no pertenecen a la discretización del dominio Ω , con el objetivo resolver este problema definiremos un nuevo conjunto de píxeles $\Gamma_E = \{(i, j) \mid i \in \{0, m+1\} \vee j \in \{0, n+1\}\}$, que llamaremos “frontera exterior” para poder definir las funciones en todos los píxeles de Ω . En este caso como nulas todas las densidades de poblaciones (tanto vectores como huéspedes) cuando el nodo (i, j) cumple que pertenece a la frontera exterior Γ_E .

2.3.1. Ecuaciones discretizadas

Luego de todas las consideraciones dadas en la subsecciones previas, pretendemos utilizar un esquema como el método de Crank-Nicolson de diferencia finitas para aplicarlo sobre el sistema de ecuaciones (2.27). Como observación aquí podemos aclarar sin mucha precisión que el método de Crank-Nicolson se basa en diferencias centrales en espacio y en

la regla del trapecio en tiempo, resultando así en un método con convergencia de segundo orden en tiempo. Para llevar a cabo este método asumiremos que valen los siguientes puntos. Sea φ definida de la siguiente manera,

$$\begin{aligned} \varphi_{ij}^k(v, h, \alpha, \beta) &= \operatorname{div}_D \left(D_{R_{ij}}^k \nabla_D v_{ij}^k \right) - \left\langle \left(D_{W_{ij}}^k W_{ij}^k \right), \nabla_D v_{ij}^k \right\rangle \\ &\quad + \operatorname{div}_D \left(K_{ij}^k v_{ij}^k \nabla_D h_{ij}^k \right) + \alpha_{ij}^k - \beta_{ij}^k, \end{aligned}$$

donde ∇_D y div_D representan discretizaciones de las funciones gradiente y divergencia respectivamente, como se definieron previamente según los esquemas planteados en (2.33)-(2.34) para el gradiente y (2.35) para la divergencia. Los valores de $D_{R_{ij}}^k$, $D_{W_{ij}}^k$, K_{ij}^k , W_{ij}^k , h_{ij}^k , v_{ij}^k , α_{ij}^k y β_{ij}^k son obtenidos de evaluar las funciones correspondientes en los nodos de la grilla según la notación definida en (2.32).

Entonces la discretización de las ecuaciones de (2.27) resulta, mediante el esquema deseado, de la siguiente manera,

$$\begin{aligned} \frac{v_{S_{ij}}^{k+1} - v_{S_{ij}}^k}{\Delta t} &= \frac{1}{2} \left[\varphi_{ij}^{k+1}(v_S, h, \alpha_S, \beta_S) + \varphi_{ij}^k(v_S, h, \alpha_S, \beta_S) \right], \\ \frac{v_{E_{ij}}^{k+1} - v_{E_{ij}}^k}{\Delta t} &= \frac{1}{2} \left[\varphi_{ij}^{k+1}(v_E, h, \alpha_E, \beta_E) + \varphi_{ij}^k(v_E, h, \alpha_E, \beta_E) \right], \\ \frac{v_{I_{ij}}^{k+1} - v_{I_{ij}}^k}{\Delta t} &= \frac{1}{2} \left[\varphi_{ij}^{k+1}(v_I, h, \alpha_I, \beta_I) + \varphi_{ij}^k(v_I, h, \alpha_I, \beta_I) \right], \\ v_{ij}^k &= v_{S_{ij}}^k + v_{E_{ij}}^k + v_{I_{ij}}^k, \\ \frac{h_{S_{ij}}^{k+1} - h_{S_{ij}}^k}{\Delta t} &= -\frac{1}{2} \left[p_{ij}^{k+1} + p_{ij}^k \right], \\ \frac{h_{E_{ij}}^{k+1} - h_{E_{ij}}^k}{\Delta t} &= \frac{1}{2} \left[p_{ij}^{k+1} + p_{ij}^k \right] - \frac{1}{2} \left[p_{ij}^{k+1-\tau_I} + p_{ij}^{k-\tau_I} \right], \\ \frac{h_{I_{ij}}^{k+1} - h_{I_{ij}}^k}{\Delta t} &= \frac{1}{2} \left[p_{ij}^{k+1-\tau_I} + p_{ij}^{k-\tau_I} \right] - \frac{1}{2} \left[p_{ij}^{k+1-\tau_I-\tau_R} + p_{ij}^{k-\tau_I-\tau_R} \right] - \frac{m_h}{2} \left[\frac{h_{I_{ij}}^{k+1}}{h_{ij}^{k+1}} + \frac{h_{I_{ij}}^k}{h_{ij}^k} \right], \\ \frac{h_{R_{ij}}^{k+1} - h_{R_{ij}}^k}{\Delta t} &= -\frac{1}{2} \left[p_{ij}^{k+1-\tau_I-\tau_R} + p_{ij}^{k-\tau_I-\tau_R} \right], \\ h_{ij}^k &= h_{S_{ij}}^k + h_{E_{ij}}^k + h_{I_{ij}}^k + h_{R_{ij}}^k. \end{aligned} \tag{2.37}$$

Sobre las condiciones de frontera y la condición inicial podemos hacer la siguiente observación, como en la frontera tenemos una condición del tipo de Robin la discretización propuesta es de la forma

$$\frac{v_{0j}^k - v_{1j}^k}{\Delta L}, \frac{v_{n+1j}^k - v_{nj}^k}{\Delta L}, \frac{v_{i0}^k - v_{i1}^k}{\Delta L}, \frac{v_{im+1}^k - v_{im}^k}{\Delta L}, \tag{2.38}$$

para $i \in \{1, \dots, m\}$, $j \in \{1, \dots, n\}$ y $k \in \{1, \dots, l\}$ y análogamente para el resto de las funciones.

Clase de suelo	Coefficiente asociado $\mu_C/900$
Área residencial	1
Suelos abiertos	0,5
Bosque	0,8
Agua	0

Cuadro 2.2: Definición de parámetros de difusión.

Clase de suelo	Coefficiente asociado μ_{WC}
Área residencial	0,7
Suelos abiertos	1
Bosque	0,5
Agua	1

Cuadro 2.3: Definición de parámetros de vientos.

Para la condición inicial definiremos las matrices $V_0, V_{E0}, V_{I0}, H_{S0}, H_{E0}, H_{I0}, H_{R0}$, donde los elementos de la fila i columna j son respectivamente $v_{ij}^0, v_{Eij}^0, v_{Iij}^0, h_{Sij}^0, h_{Eij}^0, h_{Iij}^0, h_{Rij}^0$.

2.4. Simulaciones numéricas

Para mostrar el funcionamiento del método numérico propuesto en la sección previa presentamos aquí algunas soluciones numéricas de la ecuación (2.37) con sus correspondientes condiciones de borde. En las próximas subsecciones presentaremos con mayor detalle los parámetros elegidos para llevar a cabo las simulaciones numéricas.

2.4.1. Parámetros de difusión

Para los parámetros de difusión basados en los modelos propuestos en [25, 20], proponemos que la matriz de difusión sea una matriz constante, múltiplo de la identidad $D_0 \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ multiplicada por un coeficiente μ_{ij}^k que dependerá de la clasificación del suelo que se le asigne al nodo (i, j, k) , esto representa como afecta la rugosidad del suelo al desplazamiento de los insectos. Para el coeficiente de desplazamiento puro tomamos un valor de aproximadamente $900[\text{m}^2/\text{día}]$ y para simplificaciones del modelo consideramos solo 4 clases posibles de suelos como se puede ver en el cuadro (2.2).

Respecto a la fuerza de atracción dada por la presencia de humanos, elegimos la función K_{ij}^k en cada nodo de tal manera que represente el flujo causado por la densidad de la población humana h_{ij}^k . La intensidad de esta fuerza está dada de tal forma que sea decreciente respecto a la distancia a la mayor concentración de humanos y la dirección dada por la discretización del gradiente ∇h .

2.4.2. Parámetros de transporte

Análogamente que en el caso de la matriz de difusión para el término de transporte consideramos la función ya discretizada $D_{W_{ij}^k}$ como una matriz 2×2 múltiplo de la identidad $D_{W_{ij}^k} = \mu_{W_{ij}^k} I \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$. De igual manera que antes, el parámetro μ_W representa el efecto de la rugosidad del suelo sobre los vientos. Así el campo vectorial W_{ij}^k es obtenido

Clase de suelo	Coefficiente asociado r
Área residencial	1
Suelos abiertos	0,1
Bosque	0,1
Agua	0

Cuadro 2.4: Definición de parámetros de difusión.

o estimado mediante información a gran escala de por ejemplo estaciones meteorológicas mientras que el término $D_{W_{ij}^k}$ representa el efecto local del suelo aplicado al campo W_{ij}^k . En vista de los parámetros propuestos en [25], en nuestro modelo utilizaremos los valores que aparecen en el cuadro (2.3).

2.4.3. Parámetros biológicos

Los valores elegidos para este conjunto de parámetros están basados en los dados en el cuadro (2.1), además por lo visto en [13, 10, 11, 26]. Este conjunto de parámetros estará formado por algunos obtenidos de parámetros biológicos conocidos o estimados y otros serán elegidos arbitrariamente con el fin de simplificar las simulaciones. Por esto elegimos los siguientes valores, $\tau_A = 6$, $\tau_E = 14$, $\tau_I = 7$ y $\tau_r = 7$. Además, con el propósito ilustrar la simulación tomamos $m_A = 0,1$, los valores de ρ , c y s en la ecuación (2.15), son tales que $n_B = 0,5$ según los artículos ya nombrados. Por otro lado, bajo la hipótesis que el mosquito *Aedes Aegypti* se reproduce mayormente en zonas urbanas, el parámetro de reproducción será definido como en el cuadro (2.4), y para simplificación del modelo computacional se tomó $m_h = 0$ considerando que el horizonte temporal no es muy extenso y la mortalidad causada por el virus es pequeña. Respecto a la mortalidad dada por la fumigación, en estas primeras simulaciones la consideraremos nula también como simplificación del modelo y ya que este parámetro será de mayor importancia en el problema de control a desarrollar en el próximo capítulo.

2.4.4. Simulación de la dinámica en un terreno heterogéneo

En esta subsección mostraremos los resultados obtenidos al simular un brote epidémico dadas una población de huéspedes susceptibles y una población de insectos con algunos miembros infecciosos. Los parámetros utilizados son los descriptos con anterioridad. La simulación representa un área de un terreno heterogéneo con un tamaño de $300\text{m} \times 300\text{m}$ discretizado por una malla de 10×10 elementos y un horizonte temporal de 90 días. Estos valores en el tamaño del terreno y la cantidad de días se eligieron así solamente con el objetivo de ser representativos y dado a que el uso de dimensiones mayores llevaba a problemas relacionados al tiempo de cómputo y a los límites de memoria donde se hicieron las simulaciones. Estos inconvenientes los desarrollaremos más adelante cuando hablemos de las dificultades del problema de control en la siguiente sección.

Claramente el ejemplo que damos a continuación no es un escenario real, pero el objetivo de esto es mostrar el funcionamiento del método numérico y algunos resultados posibles en una simulación con el modelo propuesto.

La población de humanos susceptibles en un comienzo está dada por la imagen (2.3) y la clasificación del terreno está dada por la imagen (2.4), donde el color azul representa una parte del terreno donde hay agua (abajo a la derecha en la imagen), el color gris

representa ciudad (en la parte más central hacia la izquierda de la imagen) y el verde representa campo. El objetivo para realizar la clasificación del terreno en los tipos de suelos ya mencionados es utilizar un algoritmo que lo pueda llevar a cabo de manera automática mediante la información obtenida por las imágenes satelitales, ya sea canales de espectro visibles o infrarrojos como se sugiere en [20]. Se plantea también la posibilidad de que los datos utilizados en la clasificación del terreno puedan ser obtenidos o completados mediante relevamientos en el área. En este ejemplo esta etapa de obtención de datos es saltada y simplemente se diseñó una imagen del terreno artificial. Luego de obtenida la imagen se clasificaron los tipos de suelos en función de los valores de la luminosidad del píxel. Esto es, analizar la representación de la imagen en formato matricial donde cada entrada de la matriz obtenida es un número entero entre 0 y 255 que indica la intensidad de la luz en ese píxel, siendo 0 negro y el 255 blanco.

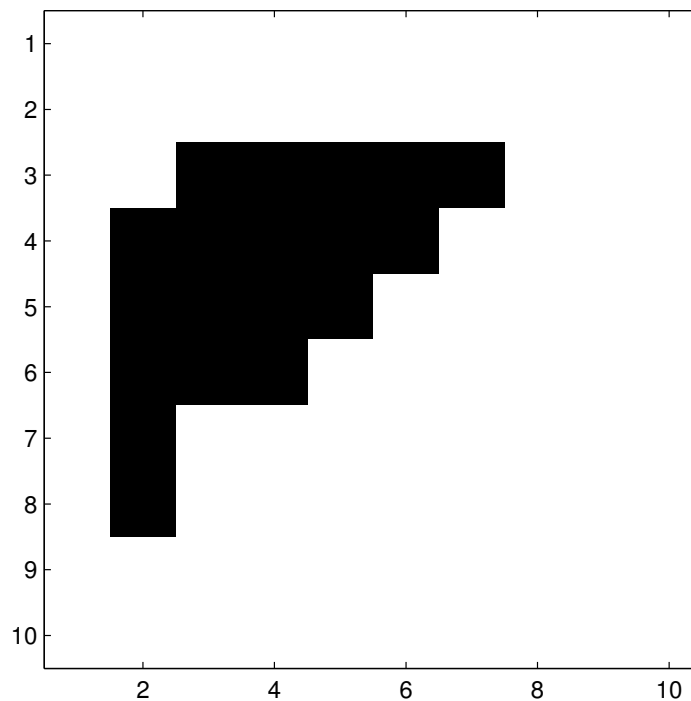


Figura 2.3: Población inicial de humanos susceptibles.

A continuación damos una pequeña descripción de la evolución de las poblaciones de mosquitos y de humanos que representamos en las próximas imágenes.

En las figuras (2.5) y (2.10) se muestran las poblaciones iniciales de los mosquitos y de los humanos. En nuestra simulación se puede observar en la figura (2.5) una población de los vectores mayoritariamente susceptible y una pequeña cantidad infecciosos. En la figura (2.10) se observa que comenzamos con una población total de humanos completamente susceptibles.

En la figura (2.6) se muestra ya la difusión de los insectos alrededor de la zona a los 10 días de evolución en la simulación, se observa una pequeña concentración mayor en el área donde se encuentran los humanos. También se puede observar una pequeña cantidad

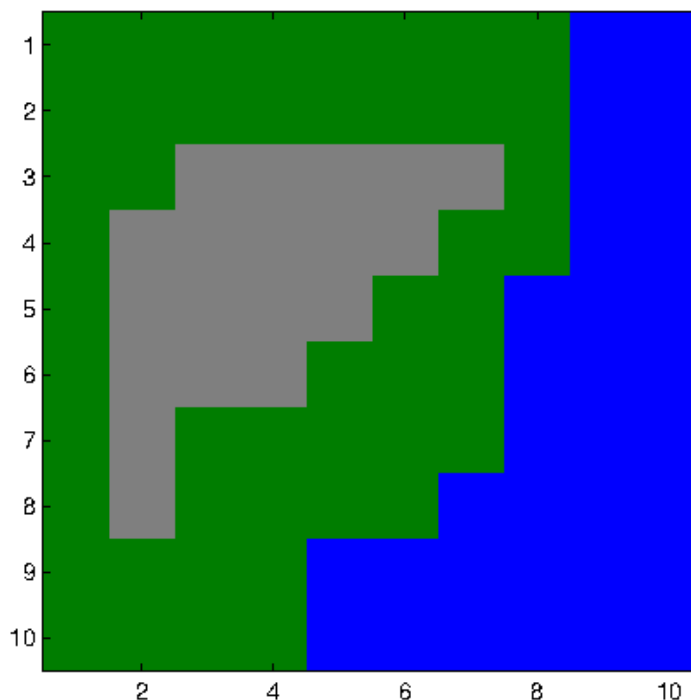


Figura 2.4: Clasificación de suelos para la simulación numérica.

de individuos en la clase de mosquitos expuestos y en la clase de mosquitos infecciosos se ve un aumento en la cantidad total y la difusión en un área mayor. En la figura (2.11) se puede observar las poblaciones de humanos a 10 días. En ésta última figura se puede observar que ya hay humanos en las clases de expuestos e infecciosos.

En la figura (2.7) se muestra la evolución de las poblaciones de los mosquitos a 30 días en la simulación. Se puede ver que la concentración de mosquitos totales permanece en mayor medida en el área de la población de humanos y fuera de ella una mayor difusión. Continúa la evolución de las poblaciones de mosquitos expuestos e infecciosos sin mayores cambios. En la figura (2.12) se observan las poblaciones de humanos, donde continúa la evolución de las transiciones de susceptibles a expuestos y de expuestos a infecciosos, además en ésta figura se observa ya individuos en la población de humanos recuperados.

En las figuras (2.8) y (2.9) se muestra la evolución de las poblaciones de los mosquitos a 60 y a 90 días en la simulación. Se puede notar que la concentración de mosquitos totales permanece, igual que en la figura anterior, en mayor medida en el área de la población de humanos y fuera de ella una mayor difusión. Se observa también que la mayor concentración de mosquitos susceptibles se encuentra en el área donde no hay población de humanos. Continúa la evolución de las poblaciones de mosquitos expuestos e infecciosos, donde estos últimos se concentran en un área donde están los humanos. Finalmente en las figuras (2.13) y (2.14) se observan las poblaciones de humanos también a 60 y 90 días respectivamente, donde continúa la evolución de las transiciones de susceptibles a expuestos, de expuestos a infecciosos y de infecciosos a recuperados. Se puede observar como la cantidad de individuos susceptibles disminuye respecto de las imágenes anteriores y como al final de la simulación

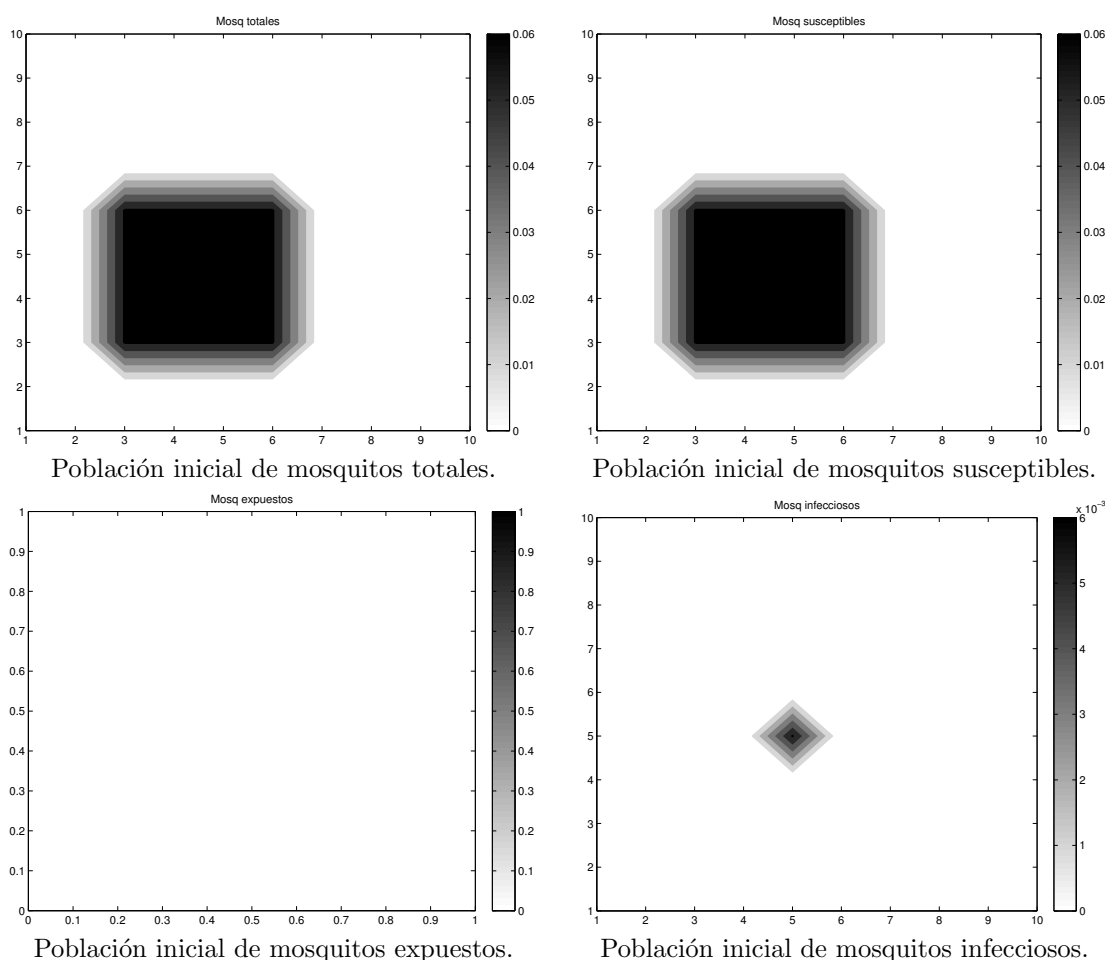


Figura 2.5: Poblaciones iniciales de los vectores totales y separados por clases

la cantidad se ve notablemente disminuida respecto a la condición inicial. Se puede notar también que la mayor cantidad de individuos que no fueron afectados por el virus son los que se encuentran a mayor distancia de donde se encontraban los vectores infecciosos iniciales ya que nuestro modelo no incluye la movilidad de los humanos en el terreno.

Otro resultado interesante para mostrar es la suma total de las poblaciones a lo largo del tiempo. En la imagen (2.15), vemos como evolucionan las poblaciones de los vectores en proporción a las cantidades en el tiempo inicial. Se puede observar que la cantidad total de insectos en el periodo de 30 días crece más de un 30 % pero la población de mosquitos susceptibles disminuye, esto se debe a que a partir del días 30 aproximadamente se comienza a observar un incremento en la población de mosquitos infecciosos. En la imagen (2.16) observamos como en el periodo de 90 días aproximadamente el 50 % de los humanos inicialmente susceptibles fueron expuestos al virus. Se puede ver que la cantidad de humanos expuestos e infecciosos aproximadamente llega a ser una 10 % de la población total al fin de éste periodo de tiempo.

2.4.5. Conclusiones de la simulación

Como algunas conclusiones que podemos extraer de la simulación que realizamos son que efectivamente creemos que este sistema de ecuaciones puede dar un buen modelo para

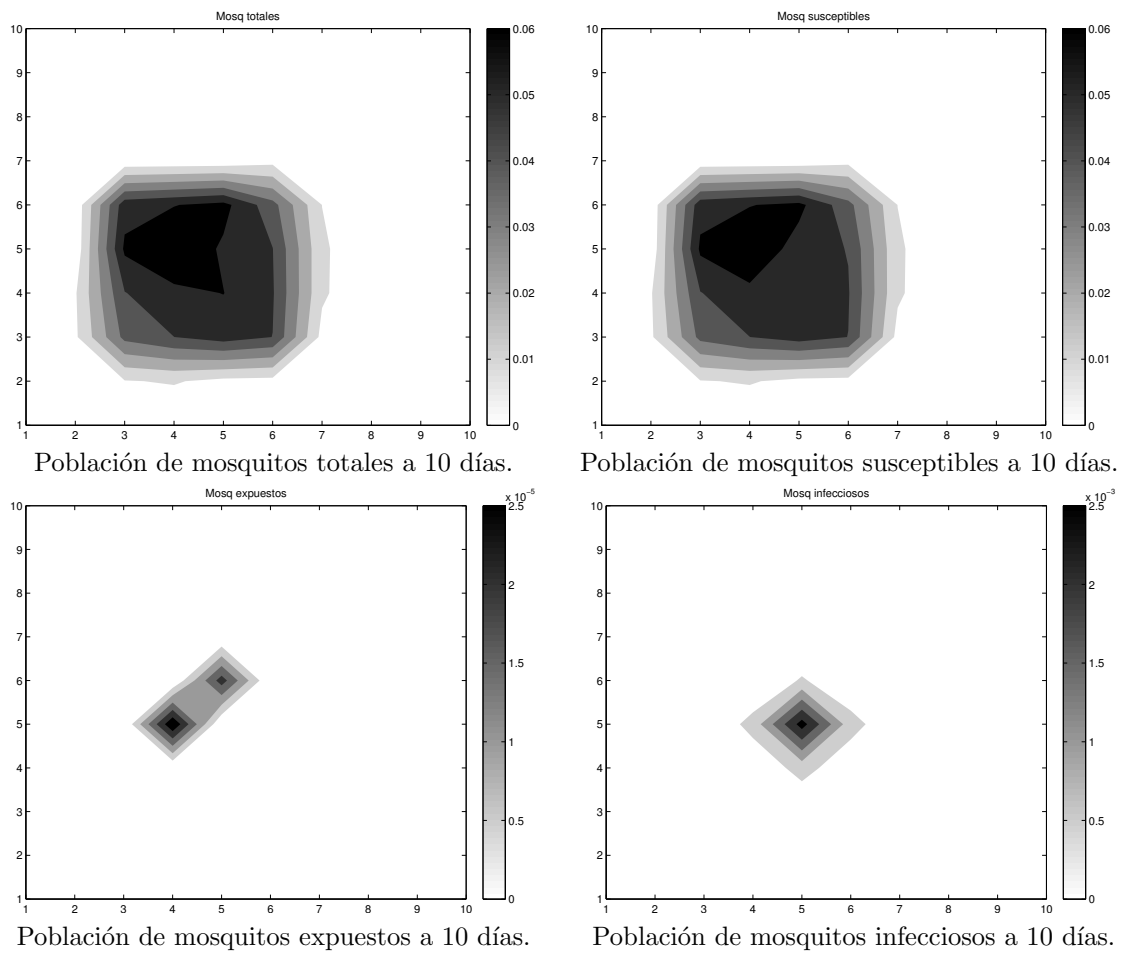


Figura 2.6: Evolución de las poblaciones de los vectores a 10 días

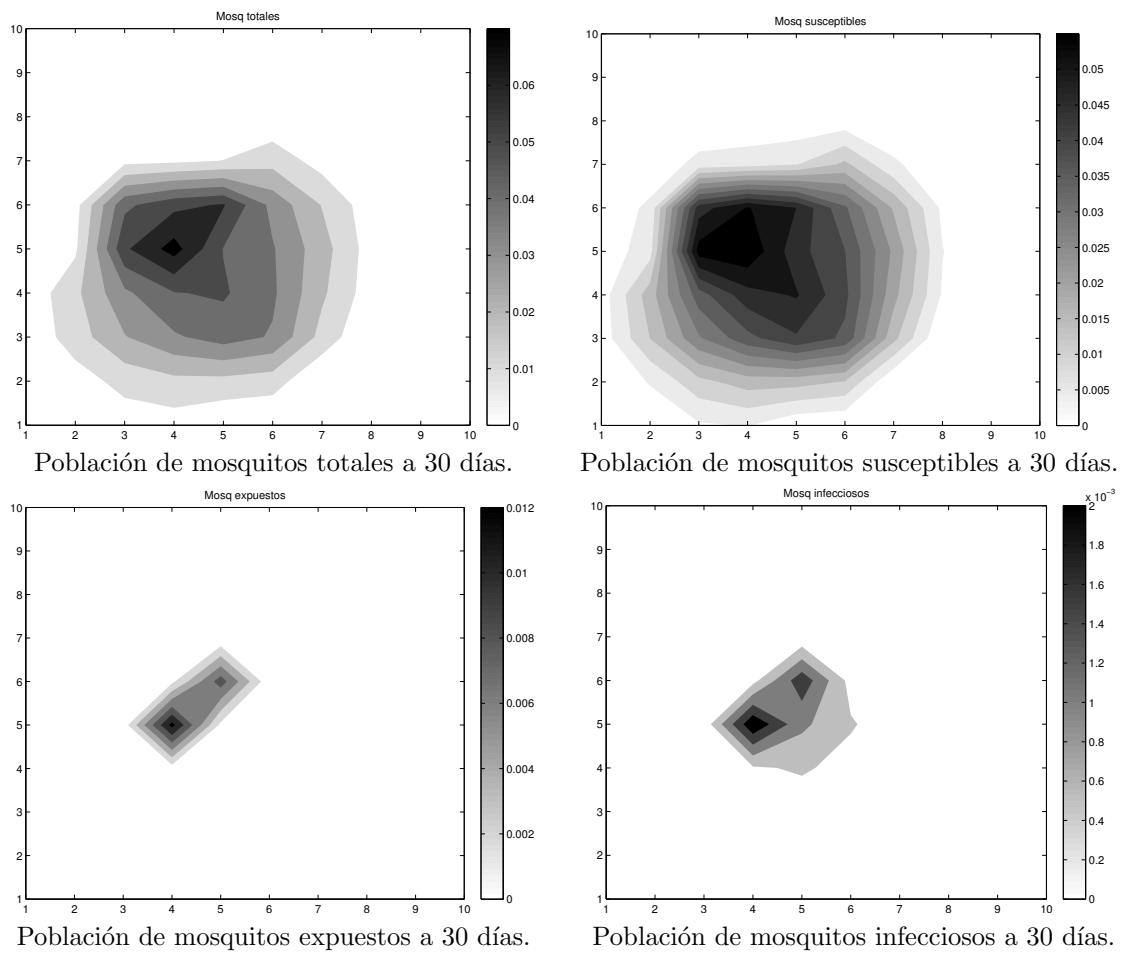


Figura 2.7: Evolución de las poblaciones de los vectores a 30 días

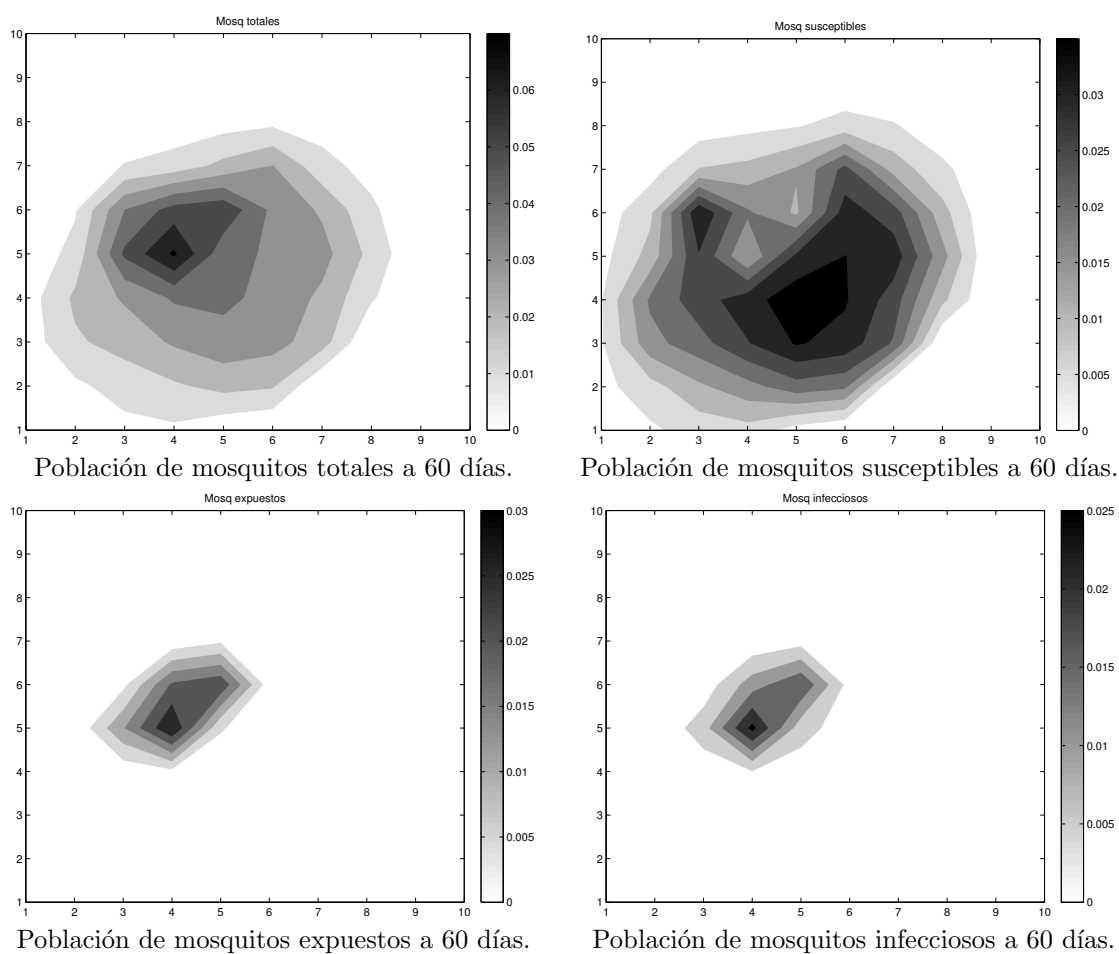


Figura 2.8: Evolución de las poblaciones de los vectores a 60 días

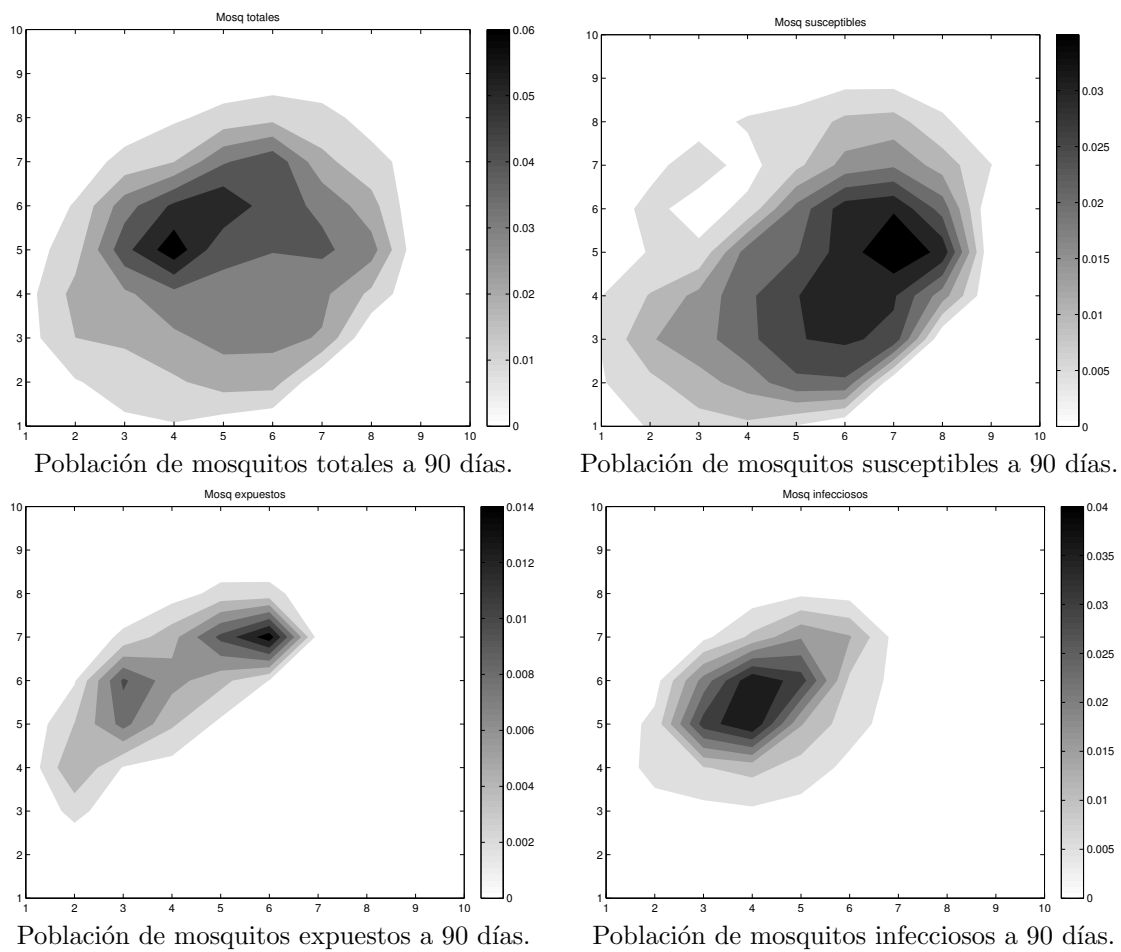


Figura 2.9: Evolución de las poblaciones de los vectores a 90 días

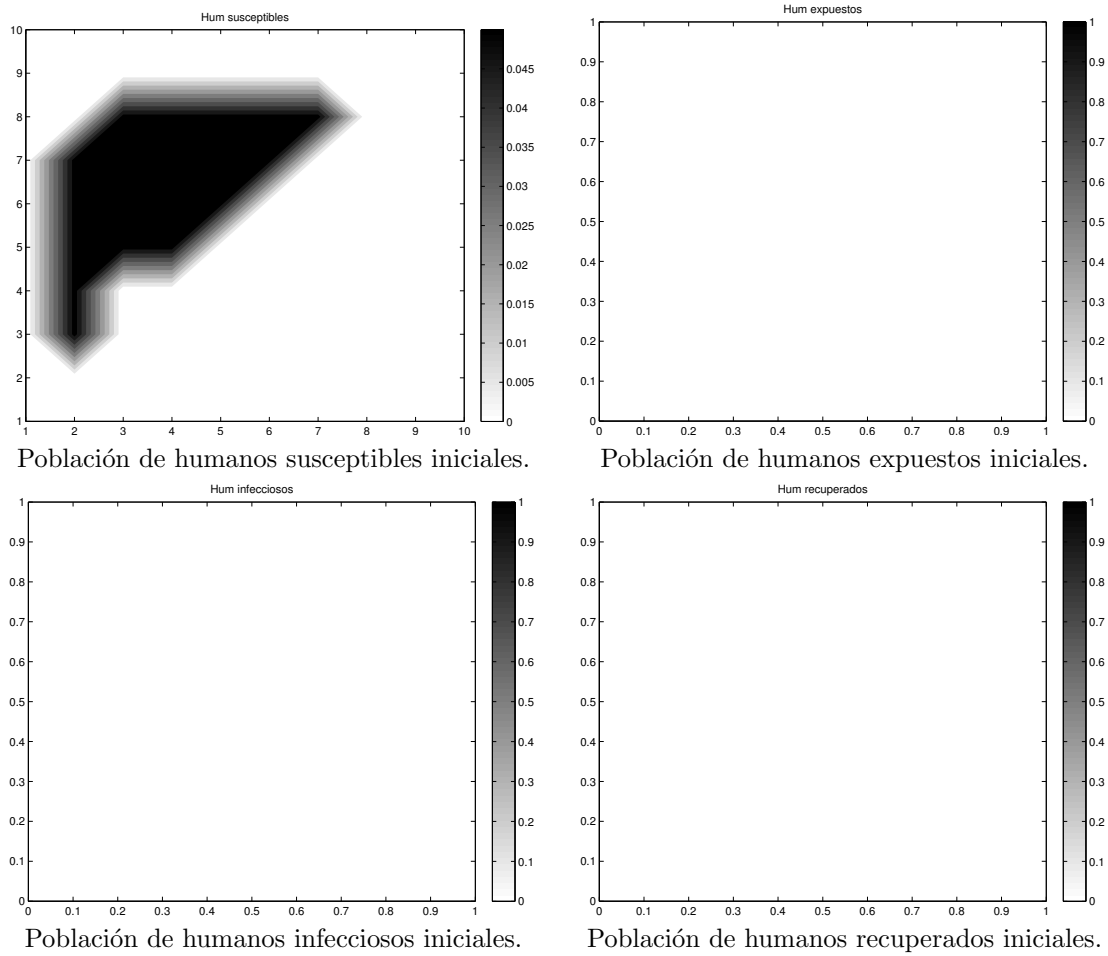


Figura 2.10: Poblaciones iniciales de los huéspedes divididos respecto a su condición frente a la enfermedad

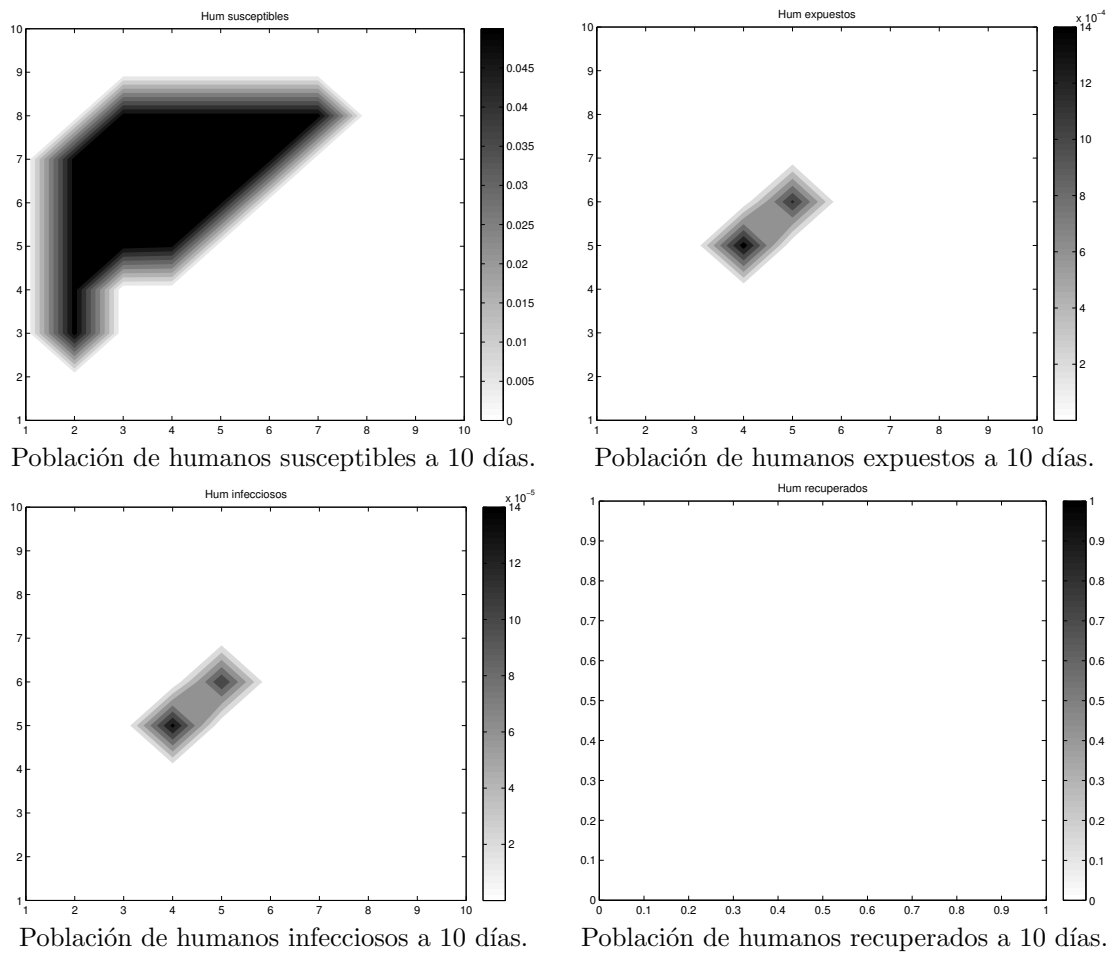


Figura 2.11: Evolución de las poblaciones de los huéspedes a 10 días

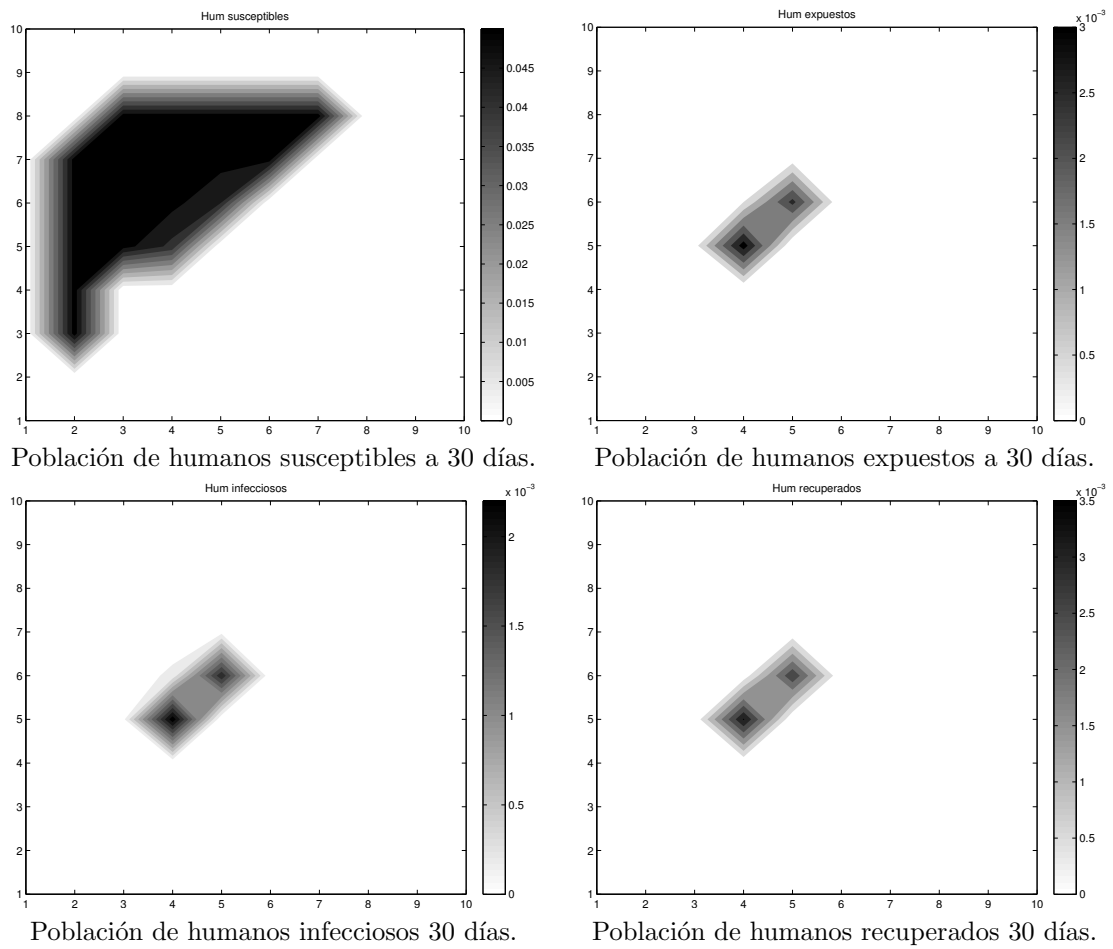


Figura 2.12: Evolución de las poblaciones de los huéspedes a 30 días

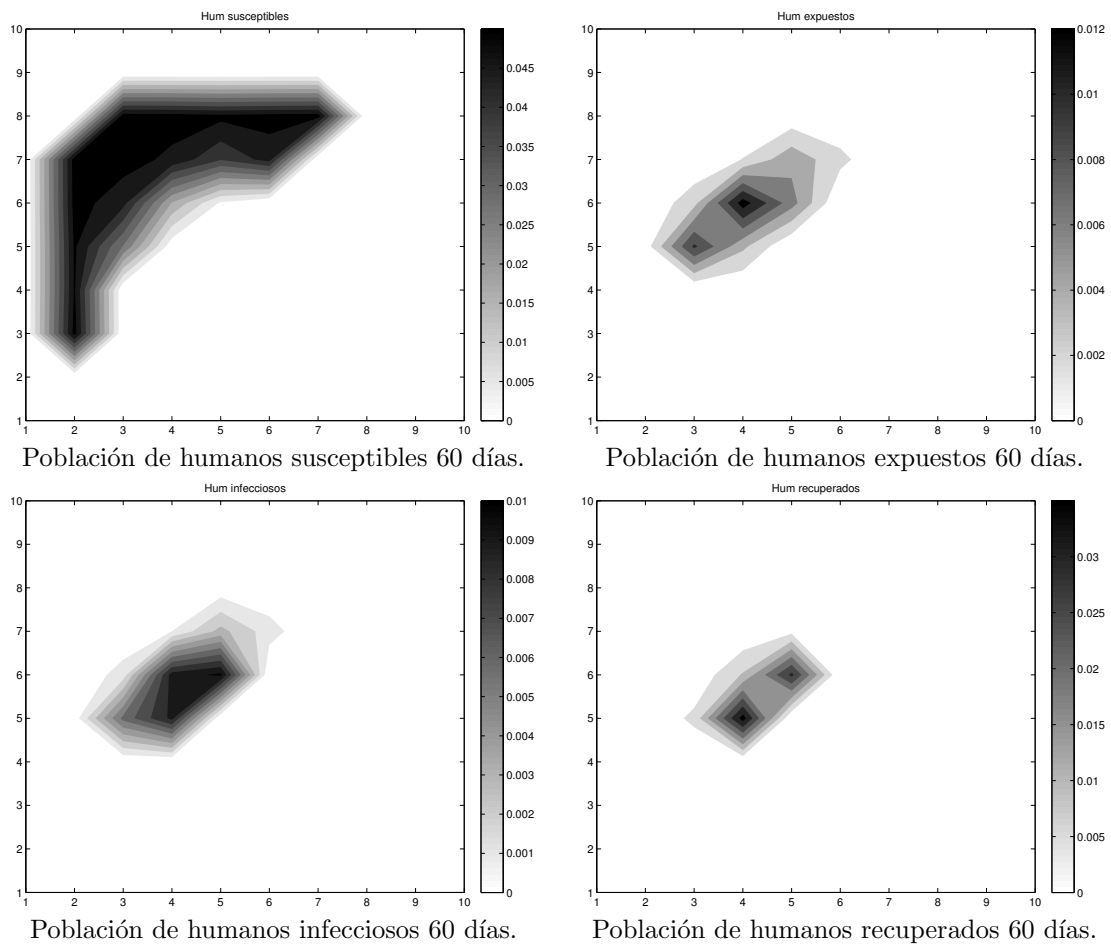


Figura 2.13: Evolución de las poblaciones de los huéspedes a 60 días

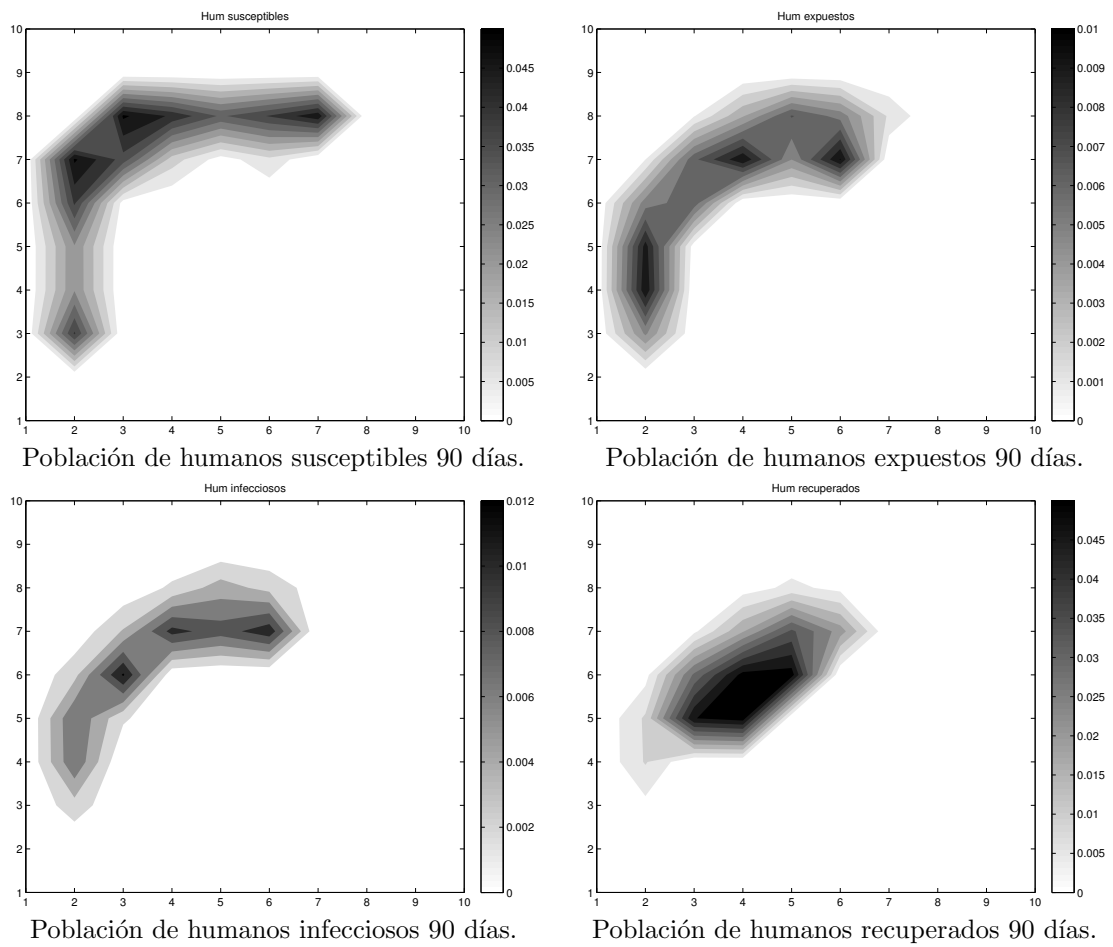


Figura 2.14: Evolución de las poblaciones de los huéspedes a 90 días

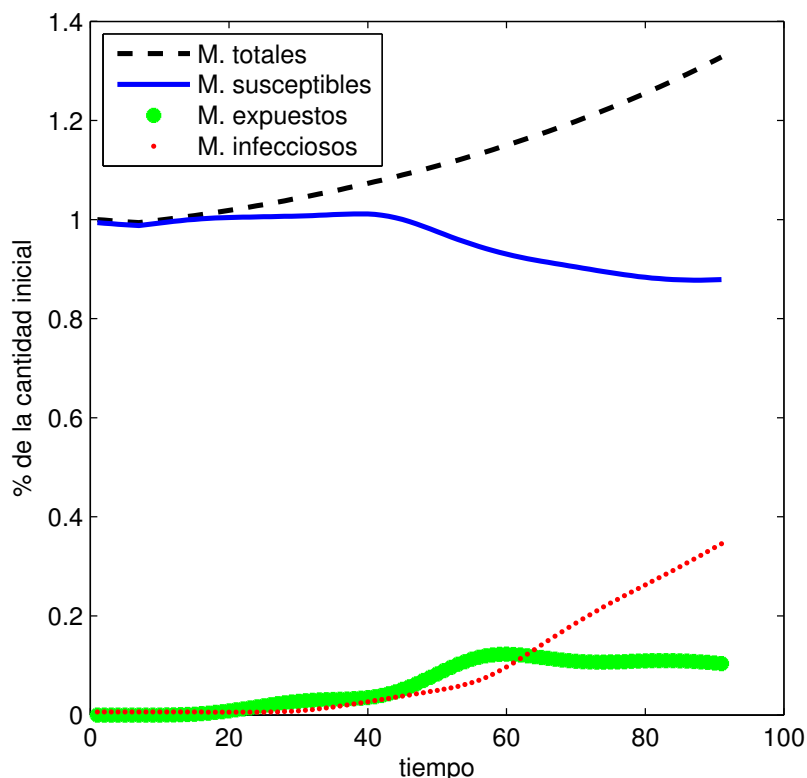


Figura 2.15: Evolución de las cantidades poblaciones de mosquitos en el tiempo.

la representación espacio-temporal de la desarrollo de la epidemia. Respecto a la dinámica de los insectos se logró modelar los efectos que se deseaban para nuestras consideraciones como ser las distintas velocidades de difusión de los insectos dependiendo de los tipos de terreno o el efecto atracción de los humanos sobre los insectos.

Por lo tanto esto nos lleva a considerar que el modelo es apropiado para la representación de la dinámica espacio-temporal de los mosquitos basado en los parámetros a gran escala del terreno.

Como una observación que se puede hacer de los resultados obtenidos es que la propagación de la enfermedad en la población de humanos sucede de una forma lenta y el avance en el espacio se de una manera lenta y siempre en entornos muy pequeños de huéspedes infecciosos. Esto se corresponde a la información de que el mosquito no recorre grandes distancia en busca de alimentos, entonces no es capaz de llegar el virus a mayores distancias. Y por lo tanto se podría concluir que la mayor dispersión del virus en una población de gran tamaño está dada no por la movilidad de los insectos sino que por la movilidad de las personas que llevan el virus a otros lugares donde se producen nuevos focos.

Por lo tanto, otra conclusión es que sin incluir mejoras en las elecciones de los parámetros y principalmente sin incluir la movilidad de los humanos no es posible dar una buena representación una epidemia real. De esto podemos remarcar que por lo observado la mayor deficiencia en este modelo es la ausencia de la movilidad de los humanos.

De aquí surgen las principales ideas para trabajos a futuros que serían estudiar de que manera se puede agregar a este sistema de ecuaciones desplazamiento de los huéspedes

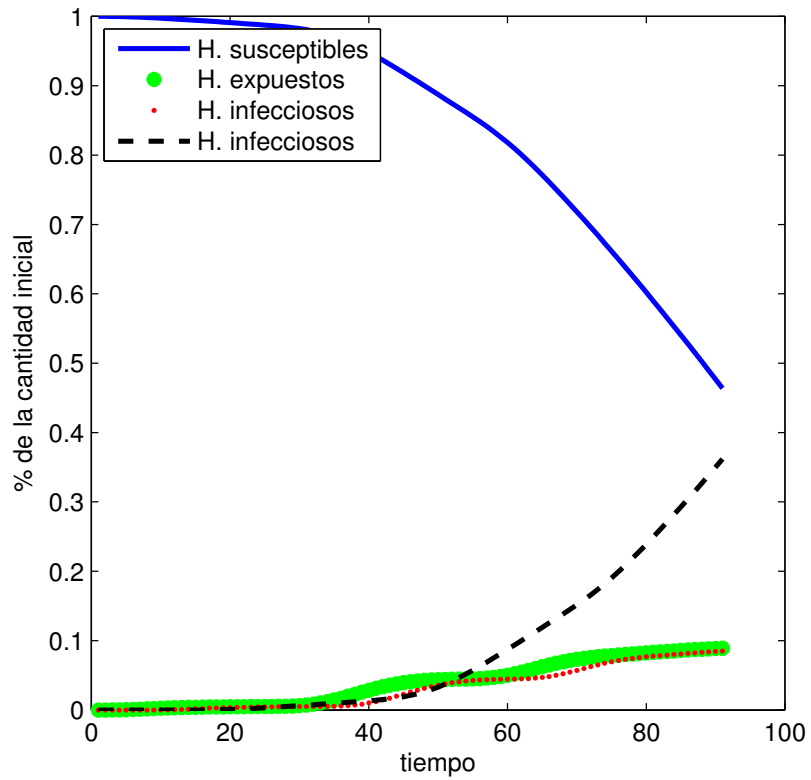


Figura 2.16: Evolución de las cantidades de las poblaciones de humanos en el tiempo.

y la estimación de los correspondientes parámetros y por otro lado de la incluir más fuentes de datos y realizar una mejor investigación, incluyendo el aumento de trabajo interdisciplinario, con el fin de obtener un modelo más representativo de la realidad.

Capítulo 3

El problema de control

3.1. Control sobre la epidemia

En esta sección el objetivo es formular un problema de control optimal aplicado al modelo de la enfermedad ya presentado en la sección anterior. Este problema sería minimizar la inversión en el control de la enfermedad, para esto proponemos que el costo de fumigar es lineal respecto a la cantidad de insecticida utilizado. Además, con el fin de reducir el brote de la enfermedad, se busca minimizar la cantidad de humanos que son portadores del virus (tanto expuestos como infecciosos). Así si definimos la siguiente función

$$\Upsilon(x, t) = (v_S(x, t), v_E(x, t), v_I(x, t), h_S(x, t), h_E(x, t), h_I(x, t), h_R(x, t)), \quad (3.1)$$

basándonos en los modelos propuestos en [11, 24, 21] damos el siguiente funcional a minimizar

$$J(\Upsilon, \kappa) = \frac{1}{2} \int_{\Omega \times [0, T]} (\gamma_1 h_E(x, t)^2 + \gamma_2 h_I(x, t)^2 + \gamma_3 \kappa(x, t)^2) dx dt. \quad (3.2)$$

donde γ_1 y γ_2 representan los pesos de las poblaciones de humanos con el virus, γ_3 representa los costos derivados de la fumigación (materiales, logística, etc) y κ representa la cantidad utilizada del insecticida.

Así el problema de optimización se puede escribir de la manera

$$\underset{(\Upsilon, \kappa)}{\text{mín}} J(\Upsilon, \kappa) \quad (3.3)$$

sujeto al sistema (2.27) y a una condición sobre la cantidad de insecticida usada de tal manera que esta sea una cantidad fija dada.

Por lo tanto, dada la estructura del funcional a minimizar, tenemos un problema de optimización cuadrático sujeto a dos clases distintas de restricciones, por un lado restricciones simples del tipo de cajas y de desigualdades y por otro lado un conjunto de restricciones que vienen de un sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales no lineales. Para resolver este problema, es decir, para encontrar un conjunto de funciones

$$\Upsilon^* = (v_S^*, v_E^*, v_I^*, h_S^*, h_E^*, h_I^*, h_R^*) \text{ y } \kappa^*, \quad (3.4)$$

que minimice el funcional J , esto es, encontrar en par (Υ^*, κ^*) tal que

$$J(\Upsilon^*, \kappa^*) \leq J(\Upsilon, \kappa) \quad \text{para todo par } (\Upsilon, \kappa) \in \mathcal{A}$$

donde \mathcal{A} representa el conjunto factible donde está definido el funcional J de (3.2), proponemos un método computacional discretizando el problema, plantear el problema reducido y resolver éste último mediante un método tipo gradiente proyectado.

3.2. Discretización del problema

3.2.1. Discretización de la función objetivo

Como ya se mencionó al final de la sección anterior, tenemos el objetivo de plantear el problema original como un problema de minimización en dimensión finita. A continuación comenzaremos haciendo las observaciones correspondientes a la discretización que plantearemos para la función objetivo. Para llevar al funcional J a una aproximación de dimensión finita aplicaremos un método de integración numérica a la ecuación (3.2). Entonces si consideramos dominio donde está definido el funcional como en (2.31), podemos reescribir a J de la siguiente manera,

$$J(\mathbf{Y}, \boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{2} \int_0^T \int_0^M \int_0^N (\gamma_1 h_E(x, y, t)^2 + \gamma_2 h_I(x, y, t)^2 + \gamma_3 \boldsymbol{\kappa}(x, y, t)^2) dx dy dt. \quad (3.5)$$

Dado que se tiene un esquema de diferencias finitas, para calcular esta integral proponemos utilizar el método de integración aplicando la regla del trapecio para el caso en 3 dimensiones, ya que esto aprovecha el hecho de tener los valores de las funciones en una grilla ya determinada. Para esto, usando el hecho que el paso espacial es de longitud ΔL para ambas variables espaciales y el paso temporal es Δt , podemos estimar una aproximación de J primero discretizando las variables espaciales. Entonces denotando

$$g(x, y, t) = \gamma_1 h_E(x, y, t)^2 + \gamma_2 h_I(x, y, t)^2 + \gamma_3 \boldsymbol{\kappa}(x, y, t)^2 \quad (3.6)$$

y si llamamos G a la función

$$G(t) = \int_0^M \int_0^N g(x, y, t) dx dy,$$

aplicando la regla del trapecio a estas integrales obtenemos la siguiente expresión,

$$G(t) \approx \frac{\Delta L^2}{4} \left\{ g(x_1, y_1, t) + g(x_1, y_m, t) + g(x_n, y_1, t) + g(x_n, y_m, t) + 4 \sum_{i=2}^{m-1} \sum_{j=2}^{n-1} g(x_j, y_i, t) \right. \\ \left. + 2 \sum_{i=2}^{m-1} [g(x_1, y_i, t) + g(x_n, y_i, t)] + 2 \sum_{j=2}^{n-1} [g(x_j, y_1, t) + g(x_j, y_m, t)] \right\}. \quad (3.7)$$

Ahora utilizando un razonamiento análogo, integrando la aproximación de la función $G(t)$ y utilizando la notación para representar el valor de una función evaluada en los puntos

de la grilla tenemos la siguiente expresión discretizada para el funcional J ,

$$\begin{aligned}
J(\Upsilon, \kappa) \approx J_D(\Upsilon, \kappa) = & \frac{\Delta L^2 \Delta t}{8} \left[g_{1,1}^1 + g_{1,1}^l + g_{1,n}^1 + g_{1,n}^l + g_{m,1}^1 + g_{m,1}^l + g_{m,n}^1 + g_{m,n}^l \right. \\
& + 2 \left\{ \sum_{i=2}^{m-1} (g_{i,1}^1 + g_{i,1}^l + g_{i,n}^1 + g_{i,n}^l) + \sum_{j=2}^{n-1} (g_{1,j}^1 + g_{1,j}^l + g_{m,j}^1 + g_{m,j}^l) \right. \\
& + \left. \sum_{k=2}^{l-1} (g_{1,1}^k + g_{m,1}^k + g_{1,n}^k + g_{m,n}^k) \right\} + 4 \left\{ \sum_{j=2}^{n-1} \sum_{i=2}^{m-1} (g_{i,j}^1 + g_{i,j}^l) \right. \\
& + \left. \sum_{k=2}^{l-1} \sum_{j=2}^{n-1} (g_{1,j}^k + g_{m,j}^k) + \sum_{k=2}^{l-1} \sum_{i=2}^{m-1} (g_{i,1}^k + g_{i,n}^k) \right\} \\
& \left. + 8 \sum_{k=2}^{l-1} \sum_{j=2}^{n-1} \sum_{i=2}^{m-1} g_{i,j}^k \right], \tag{3.8}
\end{aligned}$$

donde usando la definición de g y la notación usada,

$$g_{i,j}^k = g(x_j, y_i, t_k) = \gamma_1 h_E(x_j, y_i, t_k)^2 + \gamma_2 h_I(x_j, y_i, t_k)^2 + \gamma_3 \kappa(x_j, y_i, t_k)^2, \tag{3.9}$$

para todo $j = 1, \dots, n$, $i = 1, \dots, m$ y $k = 1, \dots, l-1$ y

$$g_{i,j}^l = g(x_j, y_i, t_{l+1}) = \gamma_1 h_E(x_j, y_i, t_k)^2 + \gamma_2 h_I(x_j, y_i, t_k)^2, \tag{3.10}$$

para todo $j = 1, \dots, n$, $i = 1, \dots, m$ y el par (Υ, κ) representan los vectores de las funciones Υ y κ evaluadas en (x_j, y_i, t_k) para todo i, j, k en los dominios correspondientes.

La diferencia que se hace entre las funciones $g_{i,j}^k$ definidas para $k < l-1$ y la función $g_{i,j}^l$ definida al tiempo final viene dado del hecho que dada la discretización del problema lo que buscamos es hallar una trayectoria de controles $\kappa = (\kappa^0, \dots, \kappa^{l-1})$ y una trayectoria de estados $\Upsilon = (\Upsilon^1, \dots, \Upsilon^l)$, sujeto a las restricciones correspondientes.

3.2.2. El problema discretizado

En la sección previa presentamos y planteamos el problema de control sobre un brote de epidemia. Este problema fue planteado como minimizar un funcional J sujeto a un conjunto de restricciones. De este modo, éste puede ser visto como un problema de optimización. El objetivo es hallar un parámetro κ que sea óptimo en el sentido que la solución del problema asociado a esa elección sea la que minimice la función costo.

Recordando que nuestro objetivo era resolver un problema de minimización en un espacio de funciones, luego de lo analizado en las secciones anteriores, consideraremos resolver un problema de optimización finito, para poder aplicar un método numérico, que consiste en minimizar $J_D(\Upsilon, \kappa)$ sujeto al sistema de ecuaciones discretizado (2.37), junto con las condiciones discretizadas de frontera, iniciales y la restricción de no negatividad en las densidades de las poblaciones. Esto nos permite plantear a este problema como un problema de optimización en dimensión finita, en términos matemáticos el problema

puede ser reescrito de la manera

$$\begin{aligned} & \text{minimizar}_{(\Upsilon, \kappa)} J_D(\Upsilon, \kappa) \\ & \text{sujeto a } \phi(\Upsilon, \kappa) = 0 \\ & \quad \kappa \geq 0, \\ & \quad \langle \kappa, e \rangle = 1, \end{aligned} \tag{3.11}$$

donde e representa el vector de unos y $\phi(\Upsilon, \kappa)$ representa el sistema de ecuaciones diferenciales discretizado (2.37)-(2.38).

Las restricciones de este problema surgen de modelar las limitaciones físicas, supuestas, posibles al momento de llevar a cabo una campaña de fumigación. De aquí las restricciones que aparecen en el problema son las siguientes: La primera representa que la dinámica de la epidemia debe estar sujeta al modelo planteado en el Capítulo 2 previas. La segunda restricción, $\kappa \geq 0$, es agregada ya que en un sentido físico las cantidades de insecticida distribuidas deben ser no negativas. Y la tercer restricción representa una cota finita a la cantidad de insecticida que puede ser utilizado en la campaña.

3.3. Métodos numéricos

En esta sección desarrollaremos el método empleado para la resolución del problema de control. Por las características del mismo, resulta que una de las mayores complicaciones para su resolución numérica es la dimensión de la variable a trabajar, en este caso estamos trabajando con un problema de dimensión $m \times n \times l$ donde m y n son la cantidad de nodos de la discretización espacial y l la de la discretización temporal. Esta dificultad nos llevó a realizar un cambio en el método empleado para la resolución del problema del modelado de la dinámica. En las secciones previas se había analizado el caso de la discretización y resolución del sistema de ecuaciones diferenciales mediante el método de diferencias finitas. Para este caso utilizamos un esquema de Crank-Nicholson para aprovechar su estabilidad numérica. Pero dado que este debería ser resuelto repetidamente como subproblemas del problema de control decidimos que como un primer intento de solución se utilice un esquema de diferencias finitas hacia adelante para resolver el sistema de ecuaciones.

Respecto a la notación que utilizaremos, de aquí en adelante para simplificar la escritura haremos referencia a la función objetivo discretizada simplemente como J , además utilizaremos la notación de ∇J para hacer referencia al vector gradiente respecto de todas las variables, mientras que utilizaremos la notación de derivada parcial para denotar los gradientes respecto de un subconjunto de las variables.

A continuación daremos un resumen del proceso empleado para encarar este problema. Con el fin de resolver (3.11), emplearemos un método tipo gradiente proyectado, ya que por las características de nuestro problema claramente deberíamos emplear un método numérico para resolver problemas con restricciones y por la dimensión de las variables que utilizamos no elegimos los métodos que involucran información de la matriz hessiana ya que esto implicaría el uso de una muy grande cantidad de memoria.

Dicho esto, con el fin de obtener el gradiente de la función objetivo, utilizaremos el método adjunto. Primero supondremos que existe una única trayectoria de estados $\Upsilon(\kappa)$ tal que cumpla que para el sistema de ecuaciones diferenciales ϕ ,

$$\phi(\Upsilon(\kappa), \kappa) = 0 \quad \text{y} \tag{3.12}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \Upsilon}(\Upsilon(\kappa), \kappa) \quad \text{es no singular.} \quad (3.13)$$

Esto lo podemos garantizar ya que el método para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales discretizados que utilizamos es un método de diferencias finitas hacia adelante, por lo tanto la matriz $\frac{\partial \phi}{\partial Upsilon_{psilon}}$ es una matriz triangular con todos los elementos no nulos en la diagonal, garantizando que sea no singular. Luego por el TFI, existe un $\tilde{\Upsilon}$ tal que $\phi(\tilde{\Upsilon}, \kappa) = 0$.

Luego si denotamos $\tilde{J}(\kappa) = J(\Upsilon(\kappa), \kappa)$, donde este par $(\Upsilon(\kappa), \kappa)$ satisface las condiciones (3.12)-(3.13), se puede ver que el problema en (3.11) es equivalente al siguiente

$$\begin{aligned} & \text{minimizar}_{\kappa} \quad \tilde{J}(\kappa) \\ & \text{sujeto a} \quad \kappa \geq 0, \\ & \quad \quad \langle \kappa, e \rangle = 1, \end{aligned} \quad (3.14)$$

Entonces este es el problema que resolveremos computacionalmente, por lo tanto lo que nos interesa encontrar es $\nabla \tilde{J}$ con el fin de aplicar un método tipo gradiente.

$$\nabla \tilde{J}(\kappa) = \nabla \Upsilon(\kappa)^\top \frac{\partial J}{\partial \Upsilon}(\Upsilon(\kappa), \kappa) + \frac{\partial J}{\partial \kappa}(\Upsilon(\kappa), \kappa) \quad (3.15)$$

esto lo hacemos con el fin de obtener el gradiente de la función $\tilde{J}(\kappa)$ para luego buscar una dirección de descenso. Brevemente el procedimiento para encontrar una solución κ^* del problema (3.14) consiste en los siguientes pasos

1. Dar un conjunto de parámetros iniciales, un estado inicial Υ_0 y una trayectoria de control κ .
2. Buscar $\Upsilon(\kappa)$ tal que $\phi(\Upsilon(\kappa), \kappa) = 0$ y definir $\tilde{J}(\kappa) = J(\Upsilon(\kappa), \kappa)$.
3. Hallar λ tal que se satisfaga

$$\frac{\partial J}{\partial \kappa}(\Upsilon(\kappa), \kappa) + \frac{\partial \phi}{\partial \Upsilon}(\Upsilon(\kappa), \kappa)^\top \lambda = 0.$$

4. Definir $\nabla \tilde{J}(\kappa) = \frac{\partial J}{\partial \kappa}(\Upsilon(\kappa), \kappa) + \frac{\partial \phi}{\partial \Upsilon}(\Upsilon(\kappa), \kappa)^\top \lambda$.
5. Dados \tilde{J} y $\nabla \tilde{J}$ usar un método de descenso para resolver el problema (3.14) y actualizar κ .
6. Volver al paso 2.

3.3.1. El método adjunto

Con el fin de desarrollar en esta sección el método numérico empleado de aquí en adelante llamaremos a cada Υ_k como el estado en el tiempo k y a cada κ_k como el control en el tiempo k para utilizar una notación usual.

Supongamos ahora que definimos las siguientes funciones para todo $k = 1, \dots, l-1$

$$\begin{aligned} J_k(\Upsilon_k, \kappa_k) = & \frac{\Delta L^2 \Delta t}{8} \left[2 \left(g_{1,1}^k + g_{m,1}^k + g_{1,n}^k + g_{m,n}^k \right) + \right. \\ & \left. 4 \left\{ \sum_{j=2}^{n-1} \left(g_{1,j}^k + g_{m,j}^k \right) + \sum_{i=2}^{m-1} \left(g_{i,1}^k + g_{i,n}^k \right) \right\} + 8 \sum_{j=2}^{n-1} \sum_{i=2}^{m-1} g_{i,j}^k \right], \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned}
J_1(\Upsilon_1, \kappa_1) &= \frac{\Delta L^2 \Delta t}{8} \left[g_{1,1}^1 + g_{1,n}^1 + g_{m,1}^1 + g_{m,n}^1 \right. \\
&\quad \left. + 2 \left\{ \sum_{i=2}^{m-1} (g_{i,1}^1 + g_{i,n}^1) + \sum_{j=2}^{n-1} (g_{1,j}^1 + g_{m,j}^1) \right\} \right. \\
&\quad \left. + 4 \sum_{j=2}^{n-1} \sum_{i=2}^{m-1} g_{ij}^1 \right], \tag{3.17}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
J_l(\Upsilon_l) &= \frac{\Delta L^2 \Delta t}{8} \left[g_{1,1}^l + g_{1,n}^l + g_{m,1}^l + g_{m,n}^l \right. \\
&\quad \left. + 2 \left\{ \sum_{i=2}^{m-1} (g_{i,1}^l + g_{i,n}^l) + \sum_{j=2}^{n-1} (g_{1,j}^l + g_{m,j}^l) \right\} \right. \\
&\quad \left. + 4 \sum_{j=2}^{n-1} \sum_{i=2}^{m-1} g_{ij}^l \right], \tag{3.18}
\end{aligned}$$

donde las funciones g_{ij}^k están definidas de igual manera que antes y de manera análoga de cuando se definieron las funciones g_{ij}^k . el control está definido en los tiempos $k = 0, \dots, l-1$, por lo tanto J_l solo depende del estado Υ_l .

Además, dado que el sistema de ecuaciones diferenciales lo resolveremos con un método de diferencias finitas explícito, podemos escribir cada discretización en un instante temporal como un estado que depende solamente de los estados anteriores y de los controles anteriores.

Por lo tanto nuestro problema ya discretizado puede expresarse en una manera más compacta de la siguiente manera, dado un estado inicial Υ_0 dar una trayectoria de controles $\kappa = (\kappa_0, \dots, \kappa_{l-1})$ y una trayectoria de estados $\Upsilon = (\Upsilon_1, \dots, \Upsilon_l)$ que minimicen la función

$$J(\Upsilon, \kappa) = J_l(\Upsilon_l) + \sum_{k=1}^{l-1} J_k(\Upsilon_k, \kappa_k), \tag{3.19}$$

sujeto a las restricciones

$$\Upsilon_{k+1} = \psi_k(\bar{\Upsilon}_k, \kappa_k), \quad k = 0, \dots, l-1, \tag{3.20}$$

$$\sum_{k=0}^{l-1} \langle \kappa_k, e_s \rangle = 1, \tag{3.21}$$

$$\kappa_k \geq 0 \quad k = 0, \dots, l-1, \tag{3.22}$$

donde $\bar{\Upsilon}_k = (\Upsilon_k, \Upsilon_{k-k_A}, \Upsilon_{k-k_E}, \Upsilon_{k-k_I}, \Upsilon_{k-k_I-k_R})$ con los términos Υ_{k-k_A} , Υ_{k-k_E} , Υ_{k-k_I} y $\Upsilon_{k-k_I-k_R}$ definidos cuando los subíndices $k - k_A$, $k - k_E$, $k - k_I$ y $k - k_I - k_R$, que

son los valores discretizados de los tiempos τ_A , τ_E , τ_I y τ_R , sean valores positivos y e_s el vector de unos de dimensión $7 \times m \times n$.

Si observamos solo la parte de las restricciones que corresponde a la ecuación de estado, es decir, el sistema de ecuaciones diferenciales, tenemos

$$\phi(\Upsilon, \kappa) = \begin{pmatrix} \psi_0(\tilde{\Upsilon}_0, \kappa_0) - \Upsilon_1 \\ \psi_1(\tilde{\Upsilon}_1, \kappa_1) - \Upsilon_2 \\ \vdots \\ \psi_{l-1}(\tilde{\Upsilon}_{l-1}, \kappa_{l-1}) - \Upsilon_l \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

Por lo tanto buscamos un par (Υ^*, κ^*) con $\Upsilon^* \in \mathbb{R}^{7mnl}$ y $\kappa^* \in \mathbb{R}^{mnl}$, solución del problema de la forma que presentamos en (3.11),

$$\begin{aligned} & \text{minimizar}_{(\Upsilon, \kappa)} J(\Upsilon, \kappa) \\ & \text{sujeto a } \phi(\Upsilon, \kappa) = 0 \\ & \quad \kappa \geq 0, \\ & \quad \langle \kappa, e \rangle = 1. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Con el objetivo de trabajar un problema con restricciones más simples, recordaremos la definición de la función Lagrangiana asociada a la ecuación de estado

$$L : \mathbb{R}^{N_1} \times \mathbb{R}^{N_2} \times \mathbb{R}^{N_1} \rightarrow \mathbb{R},$$

con $N_1 = 7mnl$ y $N_2 = mnl$ y

$$L(\Upsilon, \kappa; \lambda) = J(\Upsilon, \kappa) + \lambda^\top \phi(\Upsilon, \kappa), \quad (3.25)$$

donde $\lambda = (\lambda_2, \dots, \lambda_{l+1})$ es la trayectoria de coestados.

Además, por lo visto en (3.23), tenemos que

$$\begin{aligned} \Upsilon_1 &= \psi_0(\Upsilon_0, \kappa_0), \\ \Upsilon_2 &= \psi_1(\Upsilon_1, \kappa_1) = \psi_1(\psi_0(\Upsilon_0, \kappa_0), \kappa_1), \\ &\vdots \end{aligned}$$

Por lo tanto podemos definir $\tilde{\psi} : \mathbb{R}^{N_2} \rightarrow \mathbb{R}^{N_1}$ tal que

$$\tilde{\psi}(\kappa) = \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_1(\kappa) \\ \vdots \\ \tilde{\psi}_l(\kappa) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Upsilon_1 \\ \vdots \\ \Upsilon_l \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Así considerando ahora la función $\tilde{J}(\kappa) = J(\tilde{\psi}(\kappa), \kappa)$, obtenemos el problema equivalente a (3.11), donde se desea hallar κ^* solución del problema (3.14),

$$\begin{aligned} & \text{minimizar}_{\kappa} \tilde{J}(\kappa) \\ & \text{sujeto a } \kappa \geq 0, \\ & \quad \langle \kappa, e \rangle = 1, \end{aligned} \quad (3.27)$$

para luego definir $\Upsilon^* = \tilde{\psi}(\kappa^*)$.

Para hallar κ^* solución, proponemos utilizar un método tipo gradiente proyectado aprovechando que las restricciones restantes en el problema tienen una estructura relativamente simple. Esto es, deseamos generar una sucesión $\kappa^1, \kappa^2, \dots$ tal que

$$\kappa^{k+1} = \kappa^k + \alpha_k \left(\bar{\kappa}^k - \kappa^k \right),$$

donde

$$\bar{\kappa}^k = \Pi_R \left(\kappa^k - s_k \nabla \tilde{J}(\kappa^k) \right),$$

de manera que $\tilde{J}(\kappa^{k+1}) \leq \tilde{J}(\kappa^k)$.

Aquí $\Pi_R(\cdot)$ denota la proyección en el conjunto de puntos factibles $R = \left\{ x \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{m \times n \times l} \mid \langle x, e \rangle = 1 \right\}$, $\alpha_k \in (0, 1]$ es el tamaño del paso y s_k es un escalar positivo.

Esto es, para obtener $\bar{\kappa}^k$, tomamos el paso $-s_k \nabla \tilde{J}(\kappa^k)$ a lo largo de la dirección de menos el gradiente. Luego proyectamos el resultado $\kappa^k - s_k \nabla \tilde{J}(\kappa^k)$ sobre R , obteniendo de este modo el vector factible $\bar{\kappa}^k$. Finalmente, tomamos un paso en la dirección de $\bar{\kappa}^k - \kappa^k$ de longitud α^k .

Notemos que $\kappa^* = \Pi_R \left(\kappa^* - s \nabla \tilde{J}(\kappa^*) \right)$ para todo $s > 0$ si y solo si κ^* es un punto estacionario. Por lo tanto el método se detiene si y solo si encuentra un punto estacionario del problema (3.27).

Para la elección de los valores de α_k y s_k utilizaremos una búsqueda lineal tipo regla de Armijo con proyección a lo largo del arco. Aquí el tamaño de paso α_k es fijado como uno,

$$\alpha_k = 1 \quad k = 1, 2, \dots$$

y el paso s_k es determinado por reducciones sucesivas hasta que una desigualdad tipo Armijo se satisface. Esto significa que κ^{k+1} es determinado por una búsqueda tipo Armijo sobre la proyección de arco

$$\kappa^k(s) = \{ \kappa^k(s) \mid s > 0 \},$$

donde, para todo $s > 0$, $\kappa^k(s)$ es definido por

$$\kappa^k(s) = \Pi_R \left(\kappa^k - s \nabla \tilde{J}(\kappa^k) \right).$$

En particular, para un conjunto de escalares fijos $\bar{s} > 0$, $\beta \in (0, 1)$ y $\sigma \in (0, 1)$, definiremos $s_k = \beta^{m_k} \bar{s}$, donde m_k es el menor entero no negativo m para el cual se cumple que

$$\tilde{J}(\kappa^k) - \tilde{J} \left(\kappa^k(\beta^m \bar{s}) \right) \geq \sigma \nabla \tilde{J}(\kappa^k)^\top \left(\kappa^k - \kappa^k(\beta^m \bar{s}) \right).$$

La convergencia de este método la podemos garantizar por la siguiente proposición.

Proposición 3.3.1 *Sea el problema de minimización*

$$\begin{aligned} & \text{minimizar}_x \quad f(x) \\ & \text{sujeto a} \quad x \in X, \end{aligned} \tag{3.28}$$

donde X es un subconjunto convexo, cerrado y no vacío de \mathbb{R}^n , $\sigma \in (0, 1)$ un escalar fijo y la función $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ es continuamente diferenciable en X .

1. Para cada $x \in X$ existe un escalar $s_x > 0$ tal que

$$f(x) - f(x(s)) \geq \sigma \nabla f(x)^\top (x - x(s)), \quad \forall s \in [0, s_x],$$

donde $x(s) = \Pi_X (x - s \nabla f(x))$.

2. Sea $\{x^k\}$ una sucesión generada por el método del gradiente proyectado con $\alpha_k = 1$ para todo k y con longitud de paso s_k elegido por la regla de Armijo a lo largo de la proyección del arco. Entonces todo punto límite de la sucesión $\{x^k\}$ es un punto estacionario.

La demostración de esta proposición se puede ver en [3].

3.3.2. Cómo obtener $\nabla \tilde{J}$

Recordando la definición de $\tilde{\psi}$ en (3.26), se ve que $\phi(\tilde{\psi}(\kappa), \kappa) = 0$ para todo $\kappa \in \mathbb{R}^{m \times n \times l}$. Por lo tanto tenemos que nuestra función \tilde{J} cumple que

$$\tilde{J}(\kappa) = J(\tilde{\psi}(\kappa), \kappa) + \lambda^\top \phi(\tilde{\psi}(\kappa), \kappa) = L(\tilde{\psi}(\kappa), \kappa; \lambda)$$

y

$$\nabla \tilde{J}(\kappa) = \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \kappa} \left(\frac{\partial J}{\partial \Upsilon} (\tilde{\psi}(\kappa), \kappa) + \frac{\partial \phi}{\partial \Upsilon} (\tilde{\psi}(\kappa), \kappa)^\top \lambda \right) + \frac{\partial J}{\partial \kappa} (\tilde{\psi}(\kappa), \kappa) + \frac{\partial \phi}{\partial \kappa} (\tilde{\psi}(\kappa), \kappa)^\top \lambda$$

donde

$$\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \kappa}(\kappa) = \begin{bmatrix} \frac{\partial \tilde{\psi}_1}{\partial \kappa}(\kappa) & \frac{\partial \tilde{\psi}_2}{\partial \kappa}(\kappa) & \dots & \frac{\partial \tilde{\psi}_l}{\partial \kappa}(\kappa) \end{bmatrix}$$

Ahora podemos definir $\lambda : \mathbb{R}^{N_2} \rightarrow \mathbb{R}^{N_1}$ tal que

$$\frac{\partial J}{\partial \Upsilon} (\tilde{\psi}(\kappa), \kappa) + \frac{\partial \phi}{\partial \Upsilon} (\tilde{\psi}(\kappa), \kappa)^\top \lambda(\kappa) = 0, \quad (3.29)$$

donde esta última expresión es conocida como la ecuación adjunta. Se puede ver entonces que la ecuación adjunta es igual a

$$\frac{\partial L}{\partial \Upsilon} (\tilde{\psi}(\kappa), \kappa, \lambda(\kappa)) = 0$$

donde para nuestra función objetivo y conjunto de restricciones tenemos que la función Lagrangiana asociada a la ecuación de estado es

$$L(\Upsilon, \kappa; \lambda) = J_l(\Upsilon_l) + \sum_{k=0}^{l-1} J_k(\Upsilon_k, \kappa_k) + \sum_{k=0}^{l-1} [\phi_k(\tilde{\Upsilon}_k, \kappa_k) - \Upsilon_{k+1}]^\top \lambda^{k+1}. \quad (3.30)$$

Por lo tanto, aplicando regla de la cadena el gradiente de la función Lagrangiana respecto de Υ^k , resulta

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \Upsilon_k}(\Upsilon, \kappa, \lambda) &= \frac{\partial J_k}{\partial \Upsilon_k} - \lambda_k + \frac{\partial \phi_k}{\partial \Upsilon_k} (\tilde{\Upsilon}_k, \kappa_k)^\top \lambda_{k+1} + \frac{\partial \phi_{k+k_A}}{\partial \Upsilon_{k+k_A}} (\tilde{\Upsilon}_{k+k_A}, \kappa_{k+k_A})^\top \lambda_{k+k_A+1} \\ &+ \frac{\partial \phi_{k+k_E}}{\partial \Upsilon_{k+k_E}} (\tilde{\Upsilon}_{k+k_E}, \kappa_{k+k_E})^\top \lambda_{k+k_E+1} + \frac{\partial \phi_{k+k_I}}{\partial \Upsilon_{k+k_I}} (\tilde{\Upsilon}_{k+k_I}, \kappa_{k+k_I})^\top \lambda_{k+k_I+1} \\ &+ \frac{\partial \phi_{k+k_I+k_R}}{\partial \Upsilon_{k+k_I+k_R}} (\tilde{\Upsilon}_{k+k_I+k_R}, \kappa_{k+k_I+k_R})^\top \lambda_{k+k_I+k_R+1}, \end{aligned} \quad (3.31)$$

donde $\tilde{\Upsilon}_k = (\Upsilon^k, \Upsilon^{k-k_A}, \Upsilon^{k-k_E}, \Upsilon^{k-k_I}, \Upsilon^{k-k_I-k_R})$ para $k = 1, \dots, l-1$ y los índices están definidos donde existen los estados y coestados, y

$$\frac{\partial L}{\partial \Upsilon_l}(\Upsilon, \kappa, \lambda) = \frac{\partial J_l}{\partial \Upsilon_l}(\Upsilon_l) - \lambda_l. \quad (3.32)$$

Por lo tanto de la última ecuación podemos obtener el valor de λ_l y de manera recursiva “hacia atrás” se obtienen el resto de los coestados como por ejemplo

$$\lambda_{l-1} = \frac{\partial J_{l-1}}{\partial \Upsilon_{l-1}}(\Upsilon_{l-1}, \kappa_{l-1}) + \frac{\partial \phi_l}{\partial \Upsilon_{l-1}}(\tilde{\Upsilon}_{l-1})^\top \lambda_l$$

y así sucesivamente se puede despejar cada λ_k en función de λ_j para $j > k$.

Entonces

$$\nabla \tilde{J}(\kappa) = \frac{\partial J}{\partial \kappa}(\tilde{\psi}(\kappa), \kappa) + \frac{\partial \phi}{\partial \kappa}(\tilde{\psi}(\kappa), \kappa) \lambda(\kappa) = \frac{\partial L}{\partial \kappa}(\tilde{\psi}(\kappa), \kappa, \lambda(\kappa)).$$

y de la expresión de la función Lagrangiana, obtenemos

$$\frac{\partial L}{\partial \kappa_k}(\Upsilon, \kappa, \lambda) = \frac{\partial J_k}{\partial \kappa_k}(\Upsilon_k, \kappa_k) + \frac{\partial \phi_k}{\partial \kappa_k}(\tilde{\Upsilon}_k, \kappa_k)^\top \lambda_{k+1} = \frac{\partial \tilde{J}}{\partial \kappa_k}(\kappa),$$

pudiendo construir así

$$\nabla \tilde{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \tilde{J}}{\partial \kappa_1}(\kappa) \\ \frac{\partial \tilde{J}}{\partial \kappa_2}(\kappa) \\ \vdots \\ \frac{\partial \tilde{J}}{\partial \kappa_l}(\kappa) \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

3.3.3. Algoritmo empleado para la resolución

Aquí resumiremos lo desarrollado en las secciones previas para dar los pasos que llevamos a cabo para resolver el problema de control.

Dado un estado inicial Υ_0 buscamos una trayectoria de estados Υ^* y una de controles κ^* solución del problema

$$\begin{aligned} & \text{minimizar}_{(\Upsilon, \kappa)} && J(\Upsilon, \kappa) \\ & \text{sujeto a} && \phi(\Upsilon, \kappa) = 0 \\ & && \kappa \geq 0, \\ & && \langle \kappa, e \rangle = 1, \end{aligned}$$

Algoritmo 3.3.1 *Algoritmo para resolver el problema de control*

Paso 0: *Inicialización*

Definir $R = \left\{ x \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{N_2} \mid \langle x, e \rangle = 1 \right\}$, dar un estado inicial Υ_0 , y escalares fijos $\bar{s} > 0$, $\beta \in (0, 1)$ y $\sigma \in (0, 1)$. Dar $\kappa^0 = (\kappa_0^0, \kappa_1^0, \dots, \kappa_{l-1}^0) \in R$ y hacer $i = 0$.

Paso 1: Resolver el sistema de ecuaciones diferenciales

Para $k = 0, \dots, l-1$ calcular $\Upsilon^i = (\Upsilon_1^i, \dots, \Upsilon_{l+1}^i)$ usando que

$$\Upsilon_{k+1}^i = \phi_k(\bar{\Upsilon}_k^i, \kappa_k^i),$$

donde $\bar{\Upsilon}_k^i = (\Upsilon_k^i, \Upsilon_{k-k_A}^i, \Upsilon_{k-k_E}^i, \Upsilon_{k-k_I}^i, \Upsilon_{k-k_I-k_R}^i)$.

Paso 2: Calcular los coestados

Calcular las derivadas respecto de Υ_k^i de la función Lagrangiana (3.30) como en (3.31)-(3.32). Calcular la trayectoria de coestados $\lambda^i = (\lambda_1^i, \dots, \lambda_l^i)$ utilizando las derivadas de la función Lagrangiana.

Paso 3:

Definir $\tilde{J} = J(\Upsilon^i, \kappa^i)$ y para $k = 1, \dots, l$ calcular $\frac{\partial \tilde{J}}{\partial \kappa_k}(\kappa^i)$ y construir $\nabla \tilde{J}$.

Paso 4: Método del gradiente proyectado

Si $\|\kappa^i - \Pi_R(\kappa^i - \bar{s}\nabla \tilde{J}(\kappa^i))\| = 0$ definir $\kappa^* = \kappa^i$, $\Upsilon^* = \tilde{\psi}(\kappa^*)$ y parar.

Si no, definir $s_i = \beta^{m_i} \bar{s}$ con m_i el menor entero positivo m tal que

$$\tilde{J}(\kappa^i(\beta^m \bar{s})) \leq \tilde{J}(\kappa^i) + \sigma \nabla \tilde{J}(\kappa^i)^\top (\kappa^i(\beta^m \bar{s}) - \kappa^i),$$

donde $\kappa^i(s) = \Pi_R(\kappa^i - s\nabla \tilde{J}(\kappa^i))$.

Paso 5:

Definir $\kappa^{i+1} = \Pi_R \kappa^i - s_i \nabla \tilde{J}(\kappa^i)$.

Paso 6:

Hacer $i = i + 1$, y volver al Paso 1.

3.4. Simulaciones numéricas

A continuación en esta sección mostraremos los resultados obtenidos al resolver el problema de control ya discretizado mediante el proceso propuesto en el Algoritmo 3.3.1. Los parámetros involucrados en el sistema de ecuaciones diferenciales son los mismos que en las simulaciones del problema directo de ejemplo en la Sección 2. Los pesos dentro de la función objetivo, los elegimos arbitrariamente como $\gamma_1 = \gamma_2 = 1000$ y $\gamma_3 = 1$ con el fin de darle más peso a la cantidad de humanos expuestos a la enfermedad que al “costo” de la fumigación, haciendo así que la función objetivo sea convexa en estas variables. Además para estas simulaciones, consideraremos que el efecto del insecticida no perdura en el tiempo, es decir, si se fumiga un lugar esto afecta a un porcentaje de la población de mosquitos adultos solo en ese lugar y solo en ese momento. El principal resultado obtenido por este método fue una estrategia de fumigación minimizando la función J donde lo importante era mantener constante la cantidad total de insecticida utilizado en cualquier

campana de fumigación, lo cual está representado en el modelo como la restricción de igualdad.

Si además consideramos los resultados sobre los cambios respecto al tiempo en el tamaño de las clases de poblaciones, a continuación en una serie de gráficos mostramos las comparaciones de la evolución diaria en el tamaño de las poblaciones de las distintas clases sin ningún control sobre la población de mosquitos y la misma evolución pero aplicando la estrategia de fumigación obtenida como solución del problema inverso.

Estas simulaciones muestran en el eje horizontal los días de la simulación desde 1 a 60 y en el eje vertical la densidad de las poblaciones totales respecto a las cantidades iniciales. EL uso de una simulación con un horizonte temporal de 60 días responde a las limitaciones de memoria debido que al resolverlo con un algoritmo genérico no se hace uso de la estructura de este problema, llevando a que para mayores dimensiones se vea saturada la memoria.

Una aclaración sobre los resultados que mostramos cuando hacemos referencia a una evolución sin control es que estamos considerando una estrategia de fumigación promedio sobre cada píxel de la discretización del espacio durante todo el horizonte temporal.

En las siguientes figuras se muestra la representación gráfica de las evoluciones de las poblaciones tanto de humanos como de insectos comparando los casos donde se incluye en la simulación al estrategia óptima obtenida y en los casos que no se incluye en al simulación. Estos gráficos representan las proporciones de la cantidad inicial dada.

La solución obtenida para este problema utilizando los parámetros ya mencionados se obtuvo mediante la programación del Algoritmo 3.3.1 en un código para utilizar en Matlab/Octave.

La figura (3.1) compara las poblaciones de mosquitos totales y susceptibles a lo largo del tiempo por un lado en líneas punteadas las poblaciones sin control y en líneas continuas las poblaciones con control.

Las figuras (3.2) y (3.3) se comparan las poblaciones de mosquitos expuesto y las poblaciones de mosquitos infecciosos respectivamente. Igual que antes la líneas punteadas representan las evoluciones de las poblaciones respecto a las población inicial sin control y las líneas continuas las evoluciones de las poblaciones cuya simulación se agrega el control. Se puede apreciar en ambos casos una disminución en las poblaciones durante el periodo de tiempo, especialmente cuando se comparan las poblaciones finales. También se puede notar que incluso usando la estrategia de fumigación óptima obtenida, no se logró eliminar por completo los insectos infecciosos.

Las figuras (3.4), (3.5) y (3.6) muestran como evolucionan las poblaciones de humanos expuestos, infecciosos y recuperados respecto a la población inicial durante el periodo de tiempo simulado. De manera análoga que en las figuras anteriores representamos con líneas punteadas la simulación sin control y con línea continua las simulación con control. Se puede ver que por como se formuló nuestro modelo, las curvas mostradas en cada una de las imágenes son la misma desplazadas respecto al tiempo. Por otro lado, igual que en el caso de las poblaciones de los vectores, se puede observar una significativa reducción en las proporciones de los humanos afectados por el virus cuando se comparan las mismas clases con y sin el control en la simulación.

3.5. Conclusiones y trabajos futuros

Como una primera conclusión obtenida al resolver el problema, para este ejemplo artificial, es que efectivamente es visible la ventaja de llevar a cabo una buena estrategia

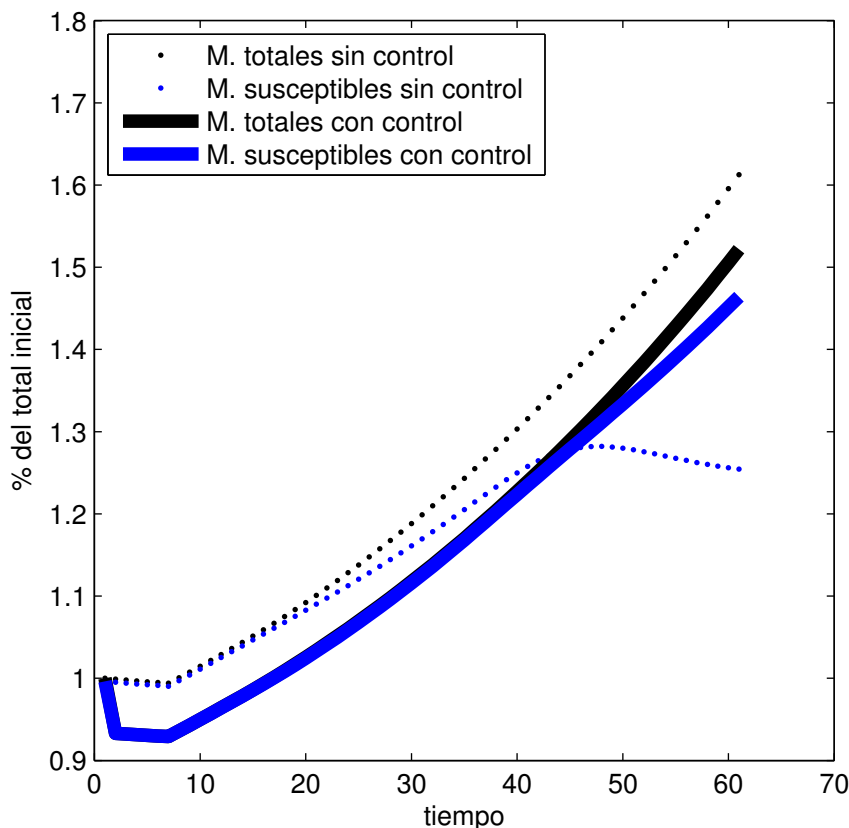


Figura 3.1: Población de mosquitos totales y susceptibles a la largo del tiempo con y sin control.

de fumigación para el control local de un brote de epidemia de fiebre dengue y que el problema llega a una solución viable y con significativa mejora respecto a la simulación sin control.

Por otro lado, otra conclusión más relacionada con la realidad es que la fumigación no es un buen método para eliminar la epidemia, salvo que la campaña de fumigación sea muy extrema. También se puede concluir que la eficacia de una campaña de fumigación está muy relacionada con la buena y pronta identificación del virus en una población. Esto concuerda con los resultados obtenidos en el Capítulo 2, donde se dijo que los mosquitos no recorren grandes distancias, entonces si se tiene un caso de una persona infectada con el virus, es muy probable que los mosquitos infecciosos, que fueron contagiados al picar a esta persona, permanezcan en esa área.

Otro resultado es que por más que la fumigación sea la solución del problema, es decir, una solución óptima (por lo menos computacionalmente), no afecta en gran medida a la población total de mosquitos, esto se puede ver en la Figura 3.1, por lo tanto esta no es una buena estrategia si lo que se desea es controlar la poblaciones de los vectores.

También otro resultado relacionado con estas dos conclusiones anteriores es que si la campaña de fumigación en algún momento se detiene, como esta no puede eliminar la población de mosquitos infecciosos, se puede producir un brote epidémico al poco tiempo.

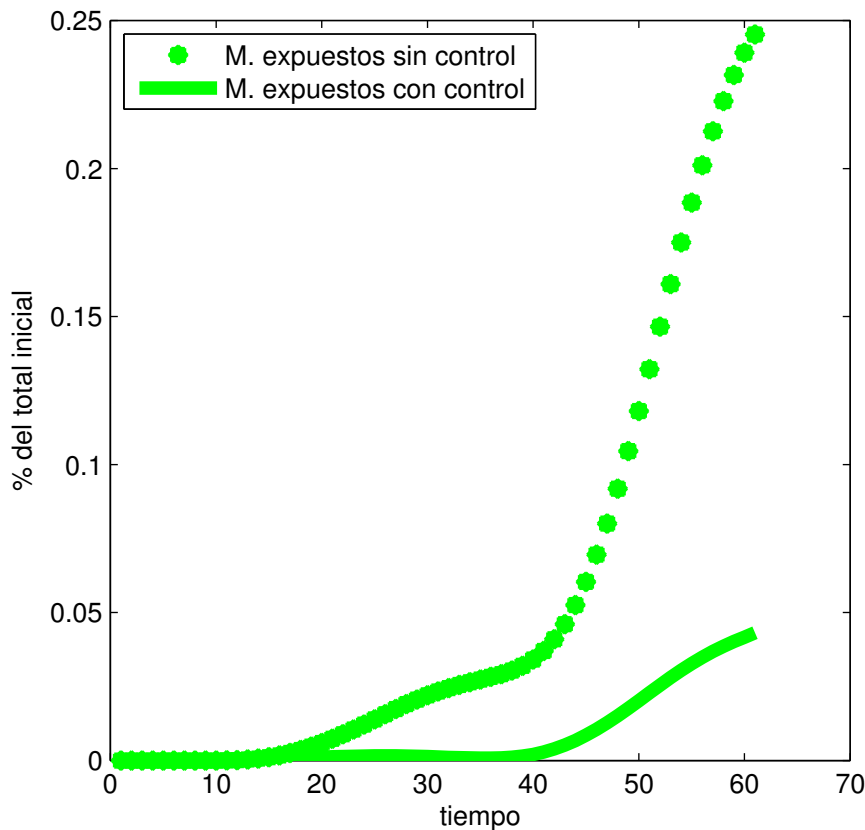


Figura 3.2: Población de mosquitos expuestos a la largo del tiempo con y sin control.

Entre los trabajos a futuro a realizar, aparte de las mejoras correspondientes al sistema de ecuaciones diferenciales que forma parte de las restricciones del problema de minimización, se encuentran las siguiente consideraciones:

Ajustar de manera más precisa los parámetros de los pesos en la función objetivo para así dar un enfoque más realista a la interpretación de la relación entre los “costos” de tener personas enfermas y de la factibilidad de llevar a cabo una campaña de fumigación.

Mejorar el modelado del efecto del insecticida sobre la población de los mosquitos, esto incluiría buscar datos sobre los efectos (cuanto tiempo es efectivo el insecticida), eficiencia (a que porcentaje de la población de mosquitos afecta) y los parámetros físicos que involucra la dispersión (por ejemplo que tan lejos llega cuando se fumiga o que cantidad ingresa en las zonas urbanas) de los químicos utilizados sobre los mosquitos.

También se debería mejorar las condiciones que utilizamos para representar la fumigación, esto es, agregar restricciones de zonas o cantidades para llevar a cabo en un día.

Respecto a la parte de los parámetros, entre las posibles mejoras y trabajo a futuro se encuentra la de crear un horizonte de tiempo mayor, para llevar a una situación donde se pueda analizar todo el periodo de la epidemia. Y también la de tratar de determinar cuales de todos los parámetros involucrados son los que tienen mayor influencia en la estrategia obtenida por la solución y en la evolución del tamaño de las distintas poblaciones de humanos e insectos en el tiempo.

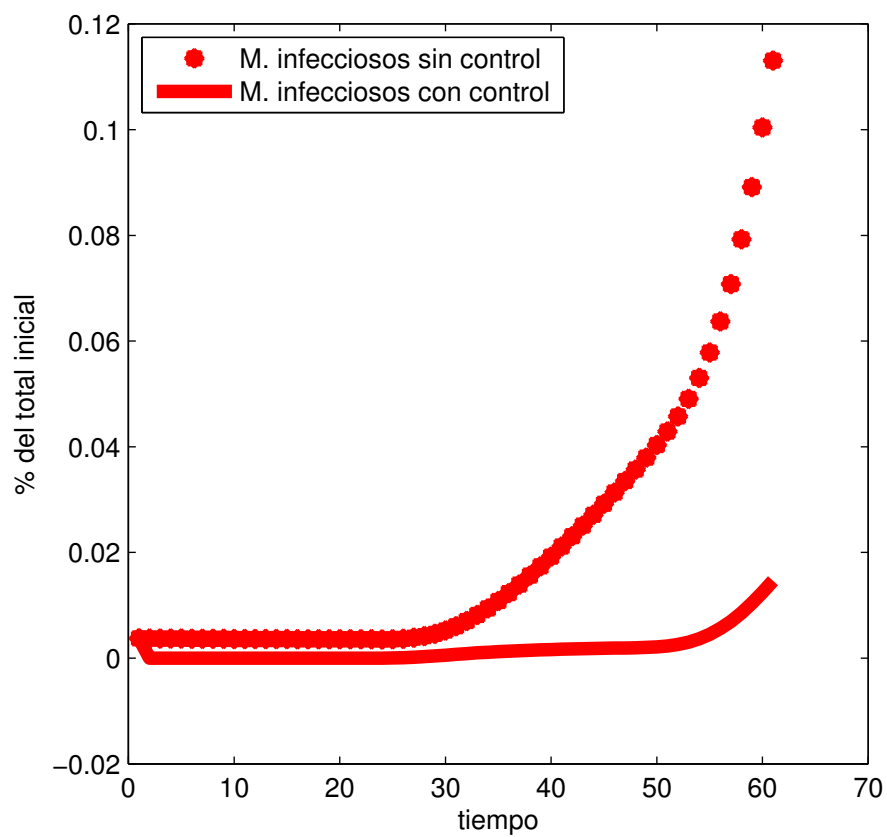


Figura 3.3: Población de mosquitos infecciosos a la largo del tiempo con y sin control.

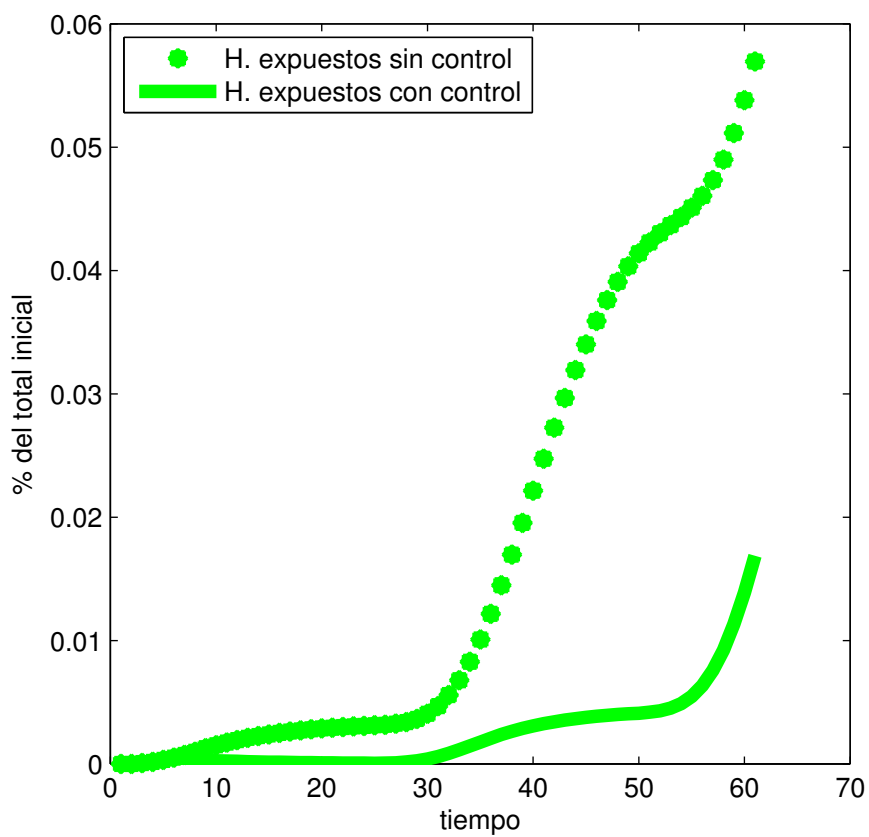


Figura 3.4: Población de humanos expuestos a la largo del tiempo con y sin control.

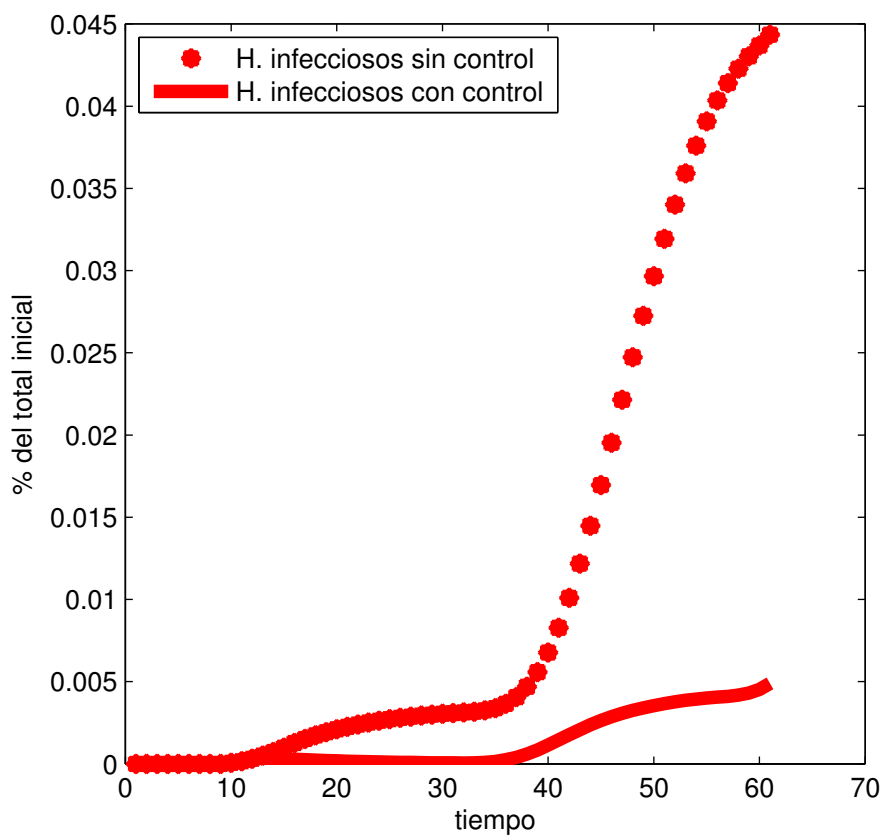


Figura 3.5: Población de humanos infecciosos a la largo del tiempo con y sin control.

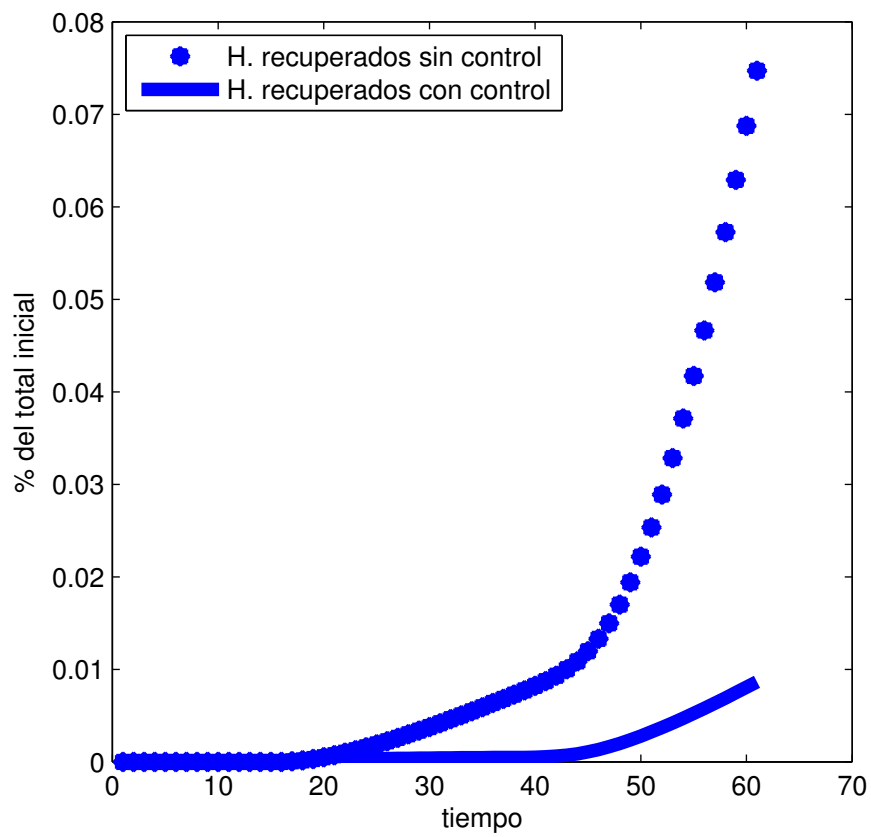


Figura 3.6: Población de humanos recuperados a la largo del tiempo con y sin control.

Parte II

Método de optimización cuadrática.

Capítulo 4

Introducción a la optimización no lineal

4.1. Motivación

Recordemos el problema de optimización del problema de control que queremos resolver

$$\begin{aligned} \underset{\kappa}{\text{minimizar}} \quad & \tilde{J}(\kappa), \\ \text{sujeto a} \quad & \kappa \geq 0, \\ & \langle \kappa, e \rangle = 1. \end{aligned} \tag{4.1}$$

Al resolverlo mediante un método del tipo sSQP generaremos una sucesión primal-dual tal que $(\kappa^{k+1}, \lambda^{k+1}, \mu^{k+1})$ es solución del problema

$$\begin{aligned} \underset{(\kappa, \lambda, \mu)}{\text{minimizar}} \quad & \tilde{J}(\kappa^k) + \langle \nabla \tilde{J}(\kappa^k), \kappa - \kappa^k \rangle + \frac{1}{2} \langle Q_k(\kappa - \kappa^k), (\kappa - \kappa^k) \rangle \\ & + \frac{1}{2\rho_k} \|\lambda\|^2 + \frac{1}{2\rho_k} \|\mu\|^2, \\ \text{sujeto a} \quad & \langle e, \kappa \rangle - 1 - \frac{1}{\rho_k} (\lambda - \lambda^k) = 0, \\ & -\kappa - \frac{1}{\rho_k} (\mu - \mu^k) \leq 0. \end{aligned} \tag{4.2}$$

O equivalentemente

$$\begin{aligned} \underset{\kappa}{\text{minimizar}} \quad & \tilde{J}(\kappa^k) + \langle \nabla \tilde{J}(\kappa^k), \kappa - \kappa^k \rangle + \frac{1}{2} \langle Q_k(\kappa - \kappa^k), (\kappa - \kappa^k) \rangle \\ & + \frac{1}{2\rho_k} \|\lambda^k + \rho_k (\langle e, \kappa \rangle - 1)\|^2 + \frac{1}{2\rho_k} \|\text{máx}\{0, \mu^k - \rho_k \kappa\}\|^2, \end{aligned}$$

para simplificar notación, tomaremos en cuenta solo las restricciones de desigualdad.

Por lo tanto en cada iteración vamos a resolver un problema cuadrático usando el método del Lagrangiano aumentado. De aquí, en cada iteración resolveremos un problema del tipo

$$\begin{aligned} \text{minimizar} \quad & \frac{1}{2} \langle Qx, x \rangle + \langle q, x \rangle, \\ \text{s.a.} \quad & x \geq 0, \end{aligned} \tag{4.3}$$

donde $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es simétrica y $q \in \mathbb{R}^n$ (Q puede ser indefinida, es decir, no necesariamente definida positiva) usando Lagrangiano aumentado.

Si \bar{x} es un minimizador local del problema (4.3), entonces

$$\bar{x} = \max\{0, \bar{x} - (Q\bar{x} + q)\},$$

ya que el conjunto factible es un conjunto convexo (el máximo es tomado componente a componente).

En lo que sigue describiremos nuestra notación. Usaremos $\|\cdot\|$ para denotar la norma Euclídea. Si x e y son vectores en \mathbb{R}^n , entonces $z = \max\{x, y\}$ denota a un vector en \mathbb{R}^n tal que $z_i = \max\{x_i, y_i\}$, $i = 1, \dots, n$. Desigualdades como $x \geq 0$ son interpretadas como componente a componente. El conjunto B hará referencia a la bola unidad cerrada. Diremos que una función $G : A \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ es localmente Lipschitz continua si para cada $x_0 \in A$ existe un entorno U de x_0 y una constante $L > 0$ tal que

$$\|G(x) - G(x_0)\| \leq L \|x - x_0\| \text{ para todo } x \in U.$$

Debido al Teorema de Rademacher, toda función $G : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ que es localmente Lipschitz continua cumple que es diferenciable para casi todo punto en el sentido de la medida de Lebesgue [14, 23, 5]. Si \mathcal{S}_G es el conjunto de puntos en los cuales G es diferenciable, el B -diferencial de G en \bar{x} es el conjunto

$$\partial_B G(\bar{x}) = \left\{ H \in \mathbb{R}^{m \times n} : \begin{array}{l} H = \lim_{k \rightarrow \infty} G'(x^k), \text{ para alguna sucesión} \\ \{x^k\} \rightarrow \bar{x}, x^k \in \mathcal{S}_G \end{array} \right\}.$$

Luego, el Jacobiano generalizado de Clarke de G en \bar{x} es el conjunto

$$\partial G(\bar{x}) = \text{conv}(\partial_B G(\bar{x})),$$

donde $\text{conv}(S)$ significa la cápsula o envolvente convexa del conjunto S . Si $F : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ denotaremos por $(\partial_B)_x F(x, y)$ y $\partial_x F(x, y)$, respectivamente, a la B -derivada parcial y al Jacobiano generalizado parcial respecto de x en (x, y) .

Diremos que una función $G : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ es “semisuave” o “semismooth” en \bar{x} si G es localmente Lipschitz en \bar{x} y

$$\lim_{\substack{V \in \partial G(\bar{x} + th') \\ h' \rightarrow h, t \downarrow 0}} Vh',$$

existe para cualquier $h \in \mathbb{R}^n$ [14, 19].

4.2. Introducción a los métodos de penalización y del Lagrangiano Aumentado

La idea detrás de los métodos de penalización es eliminar algunas o todas las restricciones del problema original y agregar a la función objetivo un término de penalización que introduzca un gran costo a las puntos fuera del conjunto factible. Asociado a éste tenemos un parámetro de penalización el cual determina la severidad de la penalización, lo que lleva a aproximar el problema original con restricciones por uno sin restricciones. Como el parámetro de penalización tome valores grandes, la aproximación resulta más precisa.

De manera a introducción del método del Lagrangiano aumentado, consideremos en un primer caso el problema con restricciones de igualdad

$$\begin{aligned} & \text{minimizar} && f(x), \\ & \text{s.a.} && g_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m_E, \\ & && x \in X, \end{aligned} \tag{4.4}$$

donde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $g_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ son funciones dadas, dos veces continuamente diferenciables y X es un subconjunto de \mathbb{R}^n .

A continuación, diremos que la función Lagrangiana aumentada asociada al problema (4.4) está dada por

$$L(x, \lambda; \rho) = f(x) + \lambda^\top g(x) + \frac{\rho}{2} \|g(x)\|^2,$$

donde ρ es un parámetro de penalización positivo.

Existen dos opciones para las cuales el problema de minimización sin restricciones de la función $L(\cdot, \lambda; \rho)$ puede producir puntos cercanos a x^* solución de (4.4):

- Tomando λ cerca de λ^* .

Como se puede ver en [3], si ρ es mayor a alguna cota, entonces para cierto γ y $\epsilon > 0$ se tiene que

$$L(x, \lambda^*; \rho) \geq L(x^*, \lambda^*; \rho) + \frac{\gamma}{2} \|x - x^*\|^2, \quad \forall x \text{ tal que } \|x - x^*\| < \epsilon,$$

de modo que x^* es un minimizador local estricto del Lagrangiano aumentado $L(\cdot, \lambda^*; \rho)$. Esto sugiere que si λ es cercano a λ^* , una buena aproximación de x^* puede ser encontrada mediante la minimización de $L(\cdot, \lambda; \rho)$.

- Tomando ρ igual a un valor muy grande.

Dado que para valores muy grandes de ρ , hay un costo muy alto para puntos no factibles, entonces el minimizador sin restricciones de la función $L(\cdot, \lambda; \rho)$ será casi factible. Además, ya que, $L(x, \lambda; \rho) = f(x)$ para cualquier x dentro del conjunto de puntos factibles, es esperable que $L(x, \lambda; \rho) \approx f(x)$ para puntos próximos al conjunto factible. Por lo tanto, esperamos obtener una buena aproximación de x^* mediante la minimización sin restricciones de $L(\cdot, \lambda; \rho)$ cuando ρ es grande.

En este trabajo utilizaremos como función de penalización desarrollaremos la función de penalización cuadrática. Éste método consiste en resolver una sucesión de problemas de la forma

$$\begin{aligned} & \text{minimizar} && L(x, \lambda^k; \rho^k), \\ & \text{s.a.} && x \in X, \end{aligned} \tag{4.5}$$

donde $\{\lambda^k\}$ es una sucesión en \mathbb{R}^{m_E} y $\{\rho^k\}$ es una sucesión de parámetros de penalización positivos. La idea de este método consiste en usar una “buena” aproximación de los multiplicadores de Lagrange como λ^k y tomar a los ρ^k como una sucesión creciente que tienda a infinito. La siguiente proposición es el resultado básico de convergencia.

Proposición 4.2.1 *Supongamos que f y g_i son como antes, el conjunto X es cerrado y el conjunto de restricciones $\{x \in X \mid g_i(x) = 0, i = 1, \dots, m_E\}$ es no vacío. Para $k = 0, 1, \dots$, sea x^k un minimizador global del problema*

$$\begin{aligned} & \text{minimizar} && L(x, \lambda^k; \rho^k), \\ & \text{s.a.} && x \in X, \end{aligned} \tag{4.6}$$

donde $\{\lambda^k\}$ es acotada, $0 < \rho^k < \rho^{k+1}$ para todo k y $\rho^k \rightarrow \infty$. Entonces cada punto límite de la sucesión $\{x^k\}$ es un minimizador global del problema (4.4).

Ahora esta proposición asume que el minimizador del Lagrangiano aumentado es encontrado de manera exacta, pero generalmente esto no es posible. Usualmente los métodos de minimización sin restricciones terminan cuando el valor de la norma del gradiente es lo suficientemente pequeño, pero no necesariamente cero. En particular, cuando $X = \mathbb{R}^n$, un algoritmo para resolver el problema

$$\begin{aligned} \text{minimizar} \quad & L(x, \lambda^k; \rho^k), \\ \text{s.a.} \quad & x \in X, \end{aligned} \tag{4.7}$$

debería terminar en un punto x^k que satisfaga

$$\|\nabla_x L(x^k, \lambda^k; \rho^k)\| \leq \epsilon^k,$$

donde ϵ^k es un escalar pequeño. En este caso, se tiene la siguiente proposición.

Proposición 4.2.2 *Supongamos que $X = \mathbb{R}^n$ y f y g_i son funciones como antes. Para $k = 0, 1, \dots$, sea x^k que satisfaga*

$$\|\nabla_x L(x^k, \lambda^k; \rho^k)\| \leq \epsilon^k,$$

donde $\{\lambda^k\}$ es acotada y las sucesiones $\{\epsilon^k\}$ y $\{\rho^k\}$ satisfacen

$$\begin{aligned} 0 < \rho^k < \rho^{k+1}, \quad \forall k \quad & \text{y} \quad \rho^k \rightarrow \infty \quad \text{cuando} \quad k \rightarrow \infty, \\ 0 \leq \epsilon^k, \quad \forall k \quad & \text{y} \quad \epsilon^k \rightarrow 0 \quad \text{cuando} \quad k \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Asumiendo que una subsucesión $\{x^k\}_K$, converge a x^* tal que $\nabla g(x^*)$ tiene rango completo, con $g(x) = (g_1(x), g_2(x), \dots, g_{m_E}(x))^T$. Entonces

$$\{\lambda^k + \rho^k g(x^k)\}_K \rightarrow \lambda^*,$$

donde λ^* es un vector que junto con x^* satisfacen las condiciones necesarias de optimalidad de primer orden

$$\nabla f(x^*) + \nabla g(x^*)\lambda^* = 0, \quad g(x^*) = 0.$$

Ahora para el caso del problema con restricciones de desigualdad, la manera más simple de tratar con estas restricciones, en el contexto de penalización cuadrática, es convertir estas a restricciones de igualdades mediante el uso de variables adicionales.

Dadas las funciones dos veces continuamente diferenciables $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $g: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{m_E}$ y $h: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{m_I}$, consideraremos el problema de optimización

$$\begin{aligned} \text{minimizar} \quad & f(x), \\ \text{s.a.} \quad & g_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m_E, \\ & h_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m_I. \end{aligned} \tag{4.8}$$

Podemos convertir este problema en uno con restricciones de igualdad

$$\begin{aligned} \text{minimizar} \quad & f(x), \\ \text{s.a.} \quad & g_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m_E, \\ & h_i(x) + z_i^2 = 0, \quad i = 1, \dots, m_I. \end{aligned} \tag{4.9}$$

donde z_1, \dots, z_{m_I} son variables de holgura. El método de penalización cuadrática para este problema resulta en minimizar la siguiente función respecto de las variables x y z

$$\bar{L}(x, z, \lambda, \mu; \rho) = f(x) + \lambda^\top g(x) + \frac{\rho}{2} \|g(x)\|^2 + \sum_{j=1}^{m_I} \left\{ \mu_j (h_j(x) + z_j^2) + \frac{\rho}{2} |h_j(x) + z_j^2|^2 \right\}.$$

Esta minimización puede ser realizada primeramente minimizando \bar{L} respecto de z , obteniendo

$$L(x, \lambda, \mu; \rho) = \min_z \bar{L}(x, z, \lambda, \mu; \rho),$$

y luego minimizar $L(x, \lambda, \mu; \rho)$ respecto de x . Una importante observación es que la primer minimización respecto de z se puede llevar a cabo de una forma cerrada para cada x fijo, por lo tanto, obteniendo así una forma cerrada para $L(x, \lambda, \mu; \rho)$.

Así tenemos que

$$\min_z \bar{L}(x, z, \lambda, \mu; \rho) = f(x) + \lambda^\top g(x) + \frac{\rho}{2} \|g(x)\|^2 \quad (4.10)$$

$$+ \sum_{j=1}^{m_I} \min_{z_j} \left\{ \mu_j (h_j(x) + z_j^2) + \frac{\rho}{2} |h_j(x) + z_j^2|^2 \right\}, \quad (4.11)$$

y la minimización respecto de z_j en el último término es equivalente a resolver

$$\text{minimizar}_{u_j \geq 0} \left\{ \mu_j (h_j(x) + u_j) + \frac{\rho}{2} |h_j(x) + u_j|^2 \right\}. \quad (4.12)$$

La función a minimizar en (4.12), es cuadrática en u_j . Entonces su minimizador es

$$u^* = \text{máx} \left\{ 0, - \left(\frac{\mu_j}{\rho} + h_j(x) \right) \right\},$$

ya que $-\left(\frac{\mu_j}{\rho} + h_j(x)\right)$ es minimizador sin restricciones donde la derivada de la función en (4.12) se anula.

Luego se tiene que

$$h_j(x) + u_j^* = \text{máx} \left\{ h_j(x), -\frac{\mu_j}{\rho} \right\}.$$

Por lo tanto usando esto en (4.10), obtenemos una forma cerrada para $L(x, \lambda, \mu; \rho) = \min_z \bar{L}(x, z, \lambda, \mu; \rho)$, dada por

$$L(x, \lambda, \mu; \rho) = f(x) + \lambda^\top g(x) + \frac{\rho}{2} \|g(x)\|^2 \quad (4.13)$$

$$+ \sum_{j=1}^{m_I} \left\{ \mu_j \text{máx} \left\{ h_j(x), -\frac{\mu_j}{\rho} \right\} + \frac{\rho}{2} \text{máx} \left\{ h_j(x), -\frac{\mu_j}{\rho} \right\}^2 \right\}. \quad (4.14)$$

Además mediante cálculo directo, se puede ver que esta forma es equivalente a la siguiente expresión, que utilizaremos a lo largo de las siguientes secciones,

$$L(x, \lambda, \mu; \rho) = f(x) + \lambda^\top g(x) + \frac{\rho}{2} \|g(x)\|^2 + \frac{1}{2\rho} \sum_{j=1}^{m_I} \left\{ (\text{máx}\{0, \mu_j + \rho h_j(x)\})^2 - \mu_j^2 \right\}. \quad (4.15)$$

Capítulo 5

Algoritmo del método del Lagrangiano Aumentado

5.1. Preliminares

Para nuestro problema (4.3) en particular, en cualquier punto del conjunto factible valen las condiciones de cualificación de restricciones de independencia lineal (LICQ por sus siglas en inglés linear independence constraint qualification). Por lo tanto, si \bar{x} es un minimizador local del problema (4.3), entonces el conjunto de multiplicadores de Lagrange asociados a \bar{x} , denotado por $\mathcal{M}(\bar{x})$, es no vacío. Luego, $\bar{\mu} \in \mathcal{M}(\bar{x})$ si y solo si $(\bar{x}, \bar{\mu})$ es solución de sistema Karush–Kuhn–Tucker (KKT):

$$\begin{aligned} Qx + q - \mu &= 0, \\ \mu_i &\geq 0, \quad i = 1, \dots, n, \\ x_i &\geq 0, \quad i = 1, \dots, n, \\ \mu_i x_i &= 0, \quad i = 1, \dots, n. \end{aligned} \tag{5.1}$$

Notemos que para el problema (4.3) el conjunto de multiplicadores de Lagrange es un “singleton”

$$\mathcal{M}(\bar{x}) = \{Q\bar{x} + q\}. \tag{5.2}$$

Recordando que la función Lagrangiano aumentado es $\bar{L} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ para el problema (4.3) resulta

$$\begin{aligned} \bar{L}(x, \mu; \rho) &= \frac{1}{2} \langle Qx, x \rangle + \langle q, x \rangle + \frac{1}{2\rho} \sum_{i=1}^n (\max\{0, \mu_i - \rho x_i\}^2 - \mu_i^2) \\ &= \frac{1}{2} \langle Qx, x \rangle + \langle q, x \rangle + \frac{1}{2\rho} (\|\max\{0, \mu - \rho x\}\|^2 - \|\mu\|^2). \end{aligned} \tag{5.3}$$

Es fácil ver que

$$\frac{\partial \bar{L}}{\partial x}(x, \mu; \rho) = Qx + q - \max\{0, \mu - \rho x\}. \tag{5.4}$$

Dada una iteración primal–dual $(x^k, \mu^k) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_{\geq}^n$ y un parámetro de penalización $\rho_k > 0$, el método del Lagrangiano aumentado exacto genera (x^{k+1}, μ^{k+1}) tal que

$$\begin{aligned} x^{k+1} &\text{ es una solución de } \underset{x \in \mathbb{R}^n}{\text{minimizar}} \bar{L}(x, \mu^k; \rho_k), \\ \mu^{k+1} &= \max\{0, \mu^k - \rho_k x^{k+1}\}. \end{aligned} \tag{5.5}$$

Computacionalmente, la minimización de la función del Lagrangiano aumentado se lleva a cabo de manera inexacta mediante el uso de un método de descenso y aceptando una aproximación primal si el gradiente de la función de Lagrangiano aumentado es suficientemente pequeño, esto es:

$$\left\| Qx^{k+1} + q - \max \left\{ 0, \mu^k - \rho_k x^{k+1} \right\} \right\| \leq \varepsilon_k, \quad (5.6)$$

donde ε_k es una tolerancia dada.

Supongamos que \bar{x} es un minimizador local para el problema (4.3) y $\bar{\mu}$ su multiplicador de Lagrange. Diremos que la condición suficiente de optimalidad de segundo orden fuerte (SSOSC por sus siglas en inglés, strong second-order sufficient optimality condition) es satisfecha en el punto $(\bar{x}, \bar{\mu})$ si

$$\langle Qu, u \rangle > 0 \quad \forall u \in \mathcal{C}^+(\bar{x}, \bar{\mu}) \setminus \{0\}, \quad (5.7)$$

donde

$$\mathcal{C}^+(\bar{x}, \bar{\mu}) = \{u \in \mathbb{R}^n \mid u_i = 0 \text{ para } i \in \{1, \dots, n\} \text{ tal que } \bar{\mu}_i > 0\}. \quad (5.8)$$

Debemos remarcar que de acuerdo a [6, Teorema 6], la existencia de un punto estacionario \bar{x} satisfaciendo las condiciones de cualificación de restricciones de independencia lineal (LICQ) con vector (único) de multiplicador de Lagrange $\bar{\mu}$ tal que $(\bar{x}, \bar{\mu})$ satisficce la condición SSOSC (5.7) es equivalente a que se cumpla la propiedad de Aubin en $((0, 0), (\bar{x}, \bar{\mu})) \in \text{gph}(\Sigma)$:

$$\Sigma(r, s) \cap ((\bar{x}, \bar{\mu}) + \varepsilon_0 B) \subset \Sigma(\hat{r}, \hat{s}) + \tau_0 \|(r, s) - (\hat{r}, \hat{s})\| B, \quad \forall (r, s), (\hat{r}, \hat{s}) \in \gamma_0 B, \quad (5.9)$$

donde ε_0 , τ_0 y γ_0 son constantes positivas,

$$\Sigma(r, s) = \left\{ (x, \mu) \left| \begin{array}{l} 0 = Qx + q - \mu + r, \\ 0 \leq x + s, \quad 0 \leq \mu, \\ 0 = \langle \mu, x + s \rangle. \end{array} \right. \right\}, \quad (5.10)$$

es el conjunto solución del sistema KKT bajo perturbaciones canónicas y $\text{gph}(\Sigma)$ es el grafo del conjunto sigma, es decir,

$$\text{gph}(\Sigma) = \{(r, s), (x, \mu) \mid (x, \mu) \in \Sigma(r, s)\}.$$

El uso de la aplicación punto a conjunto Σ aparece naturalmente en el estudio de los métodos de Lagrangiano aumentado (5.5). Brevemente, supongamos que en (5.5) x^{k+1} es un punto estacionario inexacto del problema de minimización y definamos r^k y s^k tales que

$$r^k = -\frac{\partial \bar{L}}{\partial x} \left(x^{k+1}, \mu^k; \rho_k \right), \quad s^k = \frac{1}{\rho_k} \left(\mu^{k+1} - \mu^k \right). \quad (5.11)$$

Por (5.4) y la definición de μ^{k+1} tenemos que

$$Qx^{k+1} + q - \mu^{k+1} + r^k = 0, \quad (5.12)$$

$$\mu^{k+1} \geq 0. \quad (5.13)$$

Además, notemos que

$$\mu_i^{k+1} = 0 \Rightarrow x_i^{k+1} + s_i^k = x_i^{k+1} - \frac{\mu_i^k}{\rho_k} = -\frac{1}{\rho_k} \left(\mu_i^k - \rho_k x_i^{k+1} \right) \geq 0,$$

$$\mu_i^{k+1} > 0 \Rightarrow x_i^{k+1} + s_i^k = -\frac{1}{\rho_k} \left[\mu_i^{k+1} - \left(\mu_i^k - \rho_k x_i^{k+1} \right) \right] = 0.$$

Entonces,

$$x^{k+1} + s^k \geq 0, \quad (5.14)$$

$$\langle \mu^{k+1}, x^{k+1} + s^k \rangle = 0. \quad (5.15)$$

Considerando (5.12)-(5.15) deducimos que $(x^{k+1}, \mu^{k+1}) \in \Sigma(r^k, s^k)$. Así la sucesión generado por el método del Lagrangiano aumentado inexacto puede ser estudiada en términos del conjunto de soluciones del sistema KKT bajo perturbaciones canónicas.

Claramente, un método primal-dual debería parar cuando una solución del sistema KKT es encontrada. Con el fin de medir la distancia al conjunto de soluciones del sistema (5.1) usaremos la función del residuo natural σ para el problema (4.3),

$$\sigma(x, \mu) = \left\| \begin{bmatrix} Qx + q - \mu \\ \mu - \max\{0, \mu - x\} \end{bmatrix} \right\|. \quad (5.16)$$

Notar que $(\bar{x}, \bar{\mu})$ es una solución de (5.1) si y solo si $\sigma(\bar{x}, \bar{\mu}) = 0$.

5.2. Problema principal

Consideremos ahora el siguiente proceso iterativo.

Algoritmo 5.2.1 (Algoritmo principal)

Sea $\Delta > 0$ fijo.

Paso 0: Inicialización

Sea $x^0 \in \mathbb{R}^n$, $\mu^0 \in \mathbb{R}_+^n$, $\rho_0 > 0$ y $k = 0$.

Paso 1: Resolviendo un subproblema

Encontrar $(x^{k+1}, \mu^{k+1}) \in (\bar{x}, \bar{\mu}) + \varepsilon B$ satisfaciendo

$$\|Qx^{k+1} + q - \mu^{k+1}\| \leq \frac{1}{\rho_k} \|\mu^{k+1} - \mu^k\|, \quad (5.17)$$

$$\|x^{k+1} - x^k\| \leq \Delta, \quad (5.18)$$

$$\mu^{k+1} = \max\{0, \mu^k - \rho_k x^{k+1}\}. \quad (5.19)$$

Paso 2: Criterio de parada

Si $\sigma(x^{k+1}, \mu^{k+1}) = 0$ parar.

Paso 3: Actualizando el parámetro de penalización

Actualizar $\rho_{k+1} \geq \rho_k$.

Paso 4: *Continuando el ciclo*

Hacer $k = k + 1$ y volver al Paso 1.

La tolerancia del error $\|\mu^{k+1} - \mu^k\| / \rho_k$ en el Paso 1 puede ser relacionada con el error del método de error proximal para la parte dual. La localización propia $\|x^{k+1} - x^k\| \leq \Delta$ es necesaria para propósitos teóricos.

Con el fin de obtener x^{k+1} en el Paso 1, un método irrestricto para minimizar $\bar{L}(\cdot, \mu^k; \rho_k)$ puede ser usado. Comenzando en x^k y asumiendo que Δ es lo suficientemente grande, la desigualdad (5.17) puede ser obtenida mediante verificar su validez luego de cada iteración de un método irrestricto.

Probaremos que bajo ciertas hipótesis el Paso 1 del algoritmo 5.2.1 puede llevarse a cabo exitosamente. Para ello definiremos las siguientes constantes asociadas a una solución primal dual $(\bar{x}, \bar{\mu})$ que satisfacen la condición SSOSC (5.7).

$$\begin{aligned} \hat{\varepsilon} &= \min \left\{ \varepsilon_0, \frac{1}{2} \Delta \right\}, & \hat{\gamma} &= \frac{1}{2} \min \left\{ \gamma_0, \frac{\hat{\varepsilon}}{\tau_0} \right\}, \\ \hat{\eta} &= \frac{\hat{\gamma}}{2\sqrt{2}}, & \hat{\rho} &> 2\sqrt{2} \max \left\{ \frac{\hat{\varepsilon}}{\hat{\gamma}}, \|Q\| \left(\frac{\Delta + \hat{\varepsilon}}{\hat{\gamma}} \right) + \frac{1}{\sqrt{2}} \right\}. \end{aligned} \quad (5.20)$$

donde las constantes ε_0 , γ_0 y τ_0 se definen en (5.9).

Lema 5.2.1 *Supongamos que $(\bar{x}, \bar{\mu})$ satisface la condición SSOSC y sea $x \in \bar{x} + \hat{\varepsilon}B$. Entonces para cada (μ, ρ) en el conjunto*

$$R_{\bar{\mu}} = \left\{ (\mu, \rho) \in \mathbb{R}_+^n \times (0, +\infty) : \frac{1}{\rho} \|\bar{\mu} - \mu\| \leq \hat{\eta}, \rho \geq \hat{\rho} \right\}, \quad (5.21)$$

existe $(\hat{z}, \hat{u}) \in (\bar{x}, \bar{\mu}) + \hat{\varepsilon}B$ tal que

$$\|Q\hat{z} + q - \hat{u}\| \leq \frac{1}{\rho} \|\hat{u} - \mu\|, \quad (5.22)$$

$$\|\hat{z} - x\| \leq \Delta, \quad (5.23)$$

$$\hat{u} = \max\{0, \mu - \rho\hat{z}\}. \quad (5.24)$$

Prueba. Definimos $u^0 = \bar{\mu}$. Luego, existen sucesiones $\{z^j\}_{j=1}^\infty \subset \mathbb{R}^n$ y $\{u^j\}_{j=1}^\infty \subset \mathbb{R}^n$ tales que para todo $j \geq 1$

$$\|(r^{j-1}, s^{j-1})\| \leq \hat{\gamma}, \quad (5.25)$$

$$(z^j, u^j) \in \Sigma(r^{j-1}, s^{j-1}) \cap ((\bar{x}, \bar{\mu}) + \hat{\varepsilon}B), \quad (5.26)$$

donde $r^l = s^l = (u^l - \mu) / \rho$ para todo $l \geq 0$.

Probaremos esta afirmación por inducción en j . Comprobemos (5.25) y (5.26) para $j = 1$:

$$\begin{aligned} \|(r^0, s^0)\| &= \frac{1}{\rho} \|(u^0 - \mu, u^0 - \mu)\| = \frac{\sqrt{2}}{\rho} \|u^0 - \mu\| = \frac{\sqrt{2}}{\rho} \|\bar{\mu} - \mu\| \\ &\leq \sqrt{2}\hat{\eta} = \frac{\hat{\gamma}}{2} \leq \hat{\gamma}, \end{aligned} \quad (5.27)$$

donde hemos usado la definición de r^0 y s^0 , la definición de norma Euclídea, la definición de u^0 , el hecho que $(\mu, \rho) \in R_{\bar{\mu}}$ y (5.20). En particular, $\|(r^0, s^0)\| \leq \hat{\gamma} \leq \gamma_0$, así que eligiendo $\hat{r} = \hat{s} = 0$ en la propiedad de Aubin (5.9), tenemos que

$$\Sigma(r^0, s^0) \cap ((\bar{x}, \bar{\mu}) + \varepsilon_0 B) \subset \Sigma(0, 0) + \tau_0 \|(r^0, s^0)\| B.$$

Tomamos ahora (z^1, u^1) en el conjunto de la izquierda. Entonces, (z^1, u^1) pertenece a $\Sigma(0, 0) + \tau_0 \|(r^0, s^0)\| B$. Luego,

$$\|(z^1, u^1) - (\bar{x}, \bar{\mu})\| \leq \tau_0 \|(r^0, s^0)\| \leq \tau_0 \hat{\gamma} \leq \tau_0 \frac{\hat{\varepsilon}}{2\tau_0} \leq \hat{\varepsilon},$$

usando (5.27) y la definición de $\hat{\gamma}$ (5.20). Entonces, (z^1, u^1) vale (5.25) y (5.26). A continuación, asumimos que la afirmación vale para j y la probamos para $j + 1$. Como antes, notar que:

$$\begin{aligned} \|(r^j, s^j)\| &= \frac{1}{\rho} \|(u^j - \mu, u^j - \mu)\| = \frac{\sqrt{2}}{\rho} \|u^j - \mu\| \\ &\leq \sqrt{2} \left(\frac{1}{\rho} \|u^j - \bar{\mu}\| + \frac{1}{\rho} \|\bar{\mu} - \mu\| \right) \\ &\leq \sqrt{2} \left(\frac{1}{\rho} \|(z^j, u^j) - (\bar{x}, \bar{\mu})\| + \frac{1}{\rho} \|\bar{\mu} - \mu\| \right) \\ &\leq \sqrt{2} \left(\frac{1}{\rho} \hat{\varepsilon} + \hat{\eta} \right) \leq \sqrt{2} \left(\frac{1}{\hat{\rho}} \hat{\varepsilon} + \hat{\eta} \right) \\ &\leq \sqrt{2} \left(\frac{\hat{\gamma}}{2\sqrt{2}\hat{\varepsilon}} \hat{\varepsilon} + \hat{\eta} \right) = \sqrt{2} \left(\frac{\hat{\gamma}}{2\sqrt{2}} + \frac{\hat{\gamma}}{2\sqrt{2}} \right) = \hat{\gamma}, \end{aligned} \quad (5.28)$$

donde hemos usado la definición de r^j y s^j , la definición de norma Euclídea, la hipótesis inductiva, el hecho que $(\mu, \rho) \in R_{\bar{\mu}}$ y (5.20). En particular, $\|(r^j, s^j)\| \leq \hat{\gamma} \leq \gamma_0$. Por lo tanto, eligiendo $\hat{r} = \hat{s} = 0$ en la propiedad de Aubin (5.9), tenemos que

$$\Sigma(r^j, s^j) \cap ((\bar{x}, \bar{\mu}) + \varepsilon_0 B) \subset \Sigma(0, 0) + \tau_0 \|(r^j, s^j)\| B.$$

Como antes, tomamos (z^{j+1}, u^{j+1}) en el conjunto de la izquierda. Luego, (z^{j+1}, u^{j+1}) pertenece a $\Sigma(0, 0) + \tau_0 \|(r^j, s^j)\| B$. Entonces,

$$\|(z^{j+1}, u^{j+1}) - (\bar{x}, \bar{\mu})\| \leq \tau_0 \|(r^j, s^j)\| \leq \tau_0 \hat{\gamma} \leq \tau_0 \frac{\hat{\varepsilon}}{2\tau_0} \leq \hat{\varepsilon},$$

usando (5.28) y la definición de $\hat{\gamma}$ (5.20). Se sigue que, (z^{j+1}, u^{j+1}) vale (5.25) y (5.26).

Notar que por la definición de norma Euclídea, la definición de u^0 y (5.26), es fácil ver que

$$\|u^j - \bar{\mu}\| \leq \hat{\varepsilon}, \quad \forall j \geq 0. \quad (5.29)$$

A continuación, si tomamos $l > j$ se obtiene:

$$\begin{aligned} (z^{l+1}, u^{l+1}) &\in \Sigma(0, 0) + \tau_0 \|(r^l, s^l)\| B, \\ (z^{j+1}, u^{j+1}) &\in \Sigma(0, 0) + \tau_0 \|(r^j, s^j)\| B. \end{aligned}$$

Esto significa que existen b_1 y b_2 en B tales que

$$\begin{aligned}(z^{l+1}, u^{l+1}) &= (\bar{x}, \bar{\mu}) + \tau_0 \left\| (r^l, s^l) \right\| b_1, \\ (z^{j+1}, u^{j+1}) &= (\bar{x}, \bar{\mu}) + \tau_0 \left\| (r^j, s^j) \right\| b_2.\end{aligned}$$

Deducimos entonces que:

$$\begin{aligned}\left\| (z^{l+1}, u^{l+1}) - (z^{j+1}, u^{j+1}) \right\| &= \tau_0 \left| \left\| (r^l, s^l) \right\| - \left\| (r^j, s^j) \right\| \right| \|b_1 - b_2\| \\ &\leq 2\tau_0 \left\| (r^l, s^l) - (r^j, s^j) \right\|.\end{aligned}\quad (5.30)$$

Por otro lado, recordando la definición de r^j y s^j tenemos:

$$\begin{aligned}\left\| (r^l, s^l) - (r^j, s^j) \right\| &= \sqrt{2} \left\| r^l - r^j \right\| = \frac{\sqrt{2}}{\rho} \left\| u^l - u^j \right\| \\ &\leq \frac{\sqrt{2}}{\rho} \left\| (z^l, u^l) - (z^j, u^j) \right\|.\end{aligned}\quad (5.31)$$

Ahora, deducimos que:

$$\begin{aligned}\left\| (z^{l+1}, u^{l+1}) - (z^{j+1}, u^{j+1}) \right\| &\leq 2\tau_0 \left\| (r^l, s^l) - (r^j, s^j) \right\| \\ &\leq \frac{2\sqrt{2}\tau_0}{\rho} \left\| (z^l, u^l) - (z^j, u^j) \right\| \leq \dots \\ &\leq \left(\frac{2\sqrt{2}\tau_0}{\rho} \right)^j \left\| (z^{l-j+1}, u^{l-j+1}) - (z^1, u^1) \right\| \\ &\leq \left(\frac{2\sqrt{2}\tau_0}{\rho} \right)^j 2\tau_0 \left\| (r^{l-j}, s^{l-j}) - (r^0, s^0) \right\| \\ &= \left(\frac{2\sqrt{2}\tau_0}{\rho} \right)^j 2\sqrt{2}\tau_0 \left\| r^{l-j} - r^0 \right\| \\ &= \left(\frac{2\sqrt{2}\tau_0}{\rho} \right)^j \frac{\sqrt{2}\tau_0}{\rho} \left\| u^{l-j} - u^0 \right\| \\ &= \left(\frac{2\sqrt{2}\tau_0}{\rho} \right)^{j+1} \left\| u^{l-j} - \bar{\mu} \right\| \\ &\leq \left(\frac{2\sqrt{2}\tau_0}{\rho} \right)^{j+1} \hat{\varepsilon} \leq \left(\frac{2\sqrt{2}\tau_0}{\hat{\rho}} \right)^{j+1} \hat{\varepsilon} \\ &\leq \left(\frac{\tau_0 \hat{\gamma}}{\hat{\varepsilon}} \right)^{j+1} \hat{\varepsilon} \\ &\leq \left(\frac{1}{2} \right)^{j+1} \hat{\varepsilon},\end{aligned}\quad (5.32)$$

donde hemos usado (5.30) y (5.31) en repetidas ocasiones, la definición de r^i y s^i , la definición de u^0 , (5.29), el hecho que $\rho \geq \hat{\rho}$ y (5.20).

Tenemos entonces que $\{(z^j, u^j)\}_{j \in \mathbb{N}}$ es una sucesión de Cauchy y por lo tanto converge a, digamos, (\hat{z}, \hat{u}) . Además, $\{r^j\}_{j \in \mathbb{N}}$ y $\{s^j\}_{j \in \mathbb{N}}$ converge a $\hat{r} = \hat{s} \doteq (\hat{u} - \mu) / \rho$.

Dado que $(z^{j+1}, u^{j+1}) \in \Sigma(r^j, s^j) \cap ((\bar{x}, \bar{\mu}) + \hat{\varepsilon}B)$ para todo j , tenemos que

$$\begin{aligned} Qz^{j+1} + q - u^{j+1} + r^j &= 0, & Q\hat{z} + q - \hat{u} + \hat{r} &= 0, \\ z^{j+1} + s^j &\geq 0, & \hat{z} + \hat{s} &\geq 0, \\ u^{j+1} &\geq 0, & \hat{u} &\geq 0, \\ \langle u^{j+1}, z^{j+1} + s^j \rangle &= 0, & \langle \hat{u}, \hat{z} + \hat{s} \rangle &= 0, \end{aligned} \quad (5.33)$$

y

$$(\hat{z}, \hat{u}) \in (\bar{x}, \bar{\mu}) + \hat{\varepsilon}B. \quad (5.34)$$

De la primera ecuación en el lado derecho de (5.33) tenemos que

$$\|Q\hat{z} + q - \hat{u}\| = \|\hat{r}\| = \frac{1}{\rho} \|\hat{u} - \mu\|.$$

Ahora, notamos que de la definición de \hat{r} y \hat{s} , las últimas tres desigualdades del lado derecho de (5.33) son equivalentes a:

$$\begin{aligned} \hat{u} &\geq \mu - \rho\hat{z}, \\ \hat{u} &\geq 0, \\ \hat{u}_i [\hat{u}_i - (\mu_i - \rho\hat{z}_i)] &= 0, \quad \forall i = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Entonces, para cada $i = 1, \dots, n$:

$$\begin{aligned} \mu_i - \rho\hat{z}_i < 0 &\Rightarrow \hat{u}_i - (\mu_i - \rho\hat{z}_i) > 0 \Rightarrow \hat{u}_i = 0, \\ \mu_i - \rho\hat{z}_i = 0 &\Rightarrow \hat{u}_i^2 = 0 \Rightarrow \hat{u}_i = 0, \\ \mu_i - \rho\hat{z}_i > 0 &\Rightarrow \hat{u}_i \geq \mu_i - \rho\hat{z}_i > 0 \Rightarrow \hat{u}_i = \mu_i - \rho\hat{z}_i. \end{aligned}$$

Esto significa que $\hat{u} = \text{máx}\{0, \mu - \rho\hat{z}\}$.

Finalmente, observamos que de (5.34) y (5.20):

$$\|\hat{z} - x\| \leq \|\hat{z} - \bar{x}\| + \|\bar{x} - x\| \leq \|(\hat{z}, \hat{u}) - (\bar{x}, \bar{\mu})\| + \|\bar{x} - x\| \leq \hat{\varepsilon} + \hat{\varepsilon} = 2\hat{\varepsilon} \leq \Delta.$$

Esto concluye la prueba. ■

Para razones prácticas mostraremos que cualquier par primal–dual que satisface las condiciones de inexactitud y localización provee una aproximación de la solución estudiada.

Lema 5.2.2 *Supongamos que $(\bar{x}, \bar{\mu})$ satisface SSOSC (5.7), $x \in \bar{x} + \hat{\varepsilon}B$ y $(\mu, \rho) \in R_{\bar{\mu}}$. Entonces para cualquier $(\tilde{x}, \tilde{\mu}) \in (\bar{x}, \bar{\mu}) + \varepsilon_0 B$ que satisfaga*

$$\|Q\tilde{x} + q - \tilde{\mu}\| \leq \frac{1}{\rho} \|\tilde{\mu} - \mu\|, \quad \|\tilde{x} - x\| \leq \Delta, \quad (5.36)$$

con $\tilde{\mu} = \text{máx}\{0, \mu - \rho\tilde{x}\}$, cumple que

$$\|(\tilde{x} - \bar{x}, \tilde{\mu} - \bar{\mu})\| \leq \frac{2\sqrt{2}\tau_0}{\rho} \|\mu - \bar{\mu}\|. \quad (5.37)$$

Prueba. Sean \tilde{r} y \tilde{s}

$$\tilde{r} = -(Q\tilde{x} + q - \tilde{\mu}), \quad \tilde{s} = \frac{1}{\rho}(\tilde{\mu} - \mu).$$

Siguiendo el mismo razonamiento que en (5.11)-(5.15) deducimos que $(\tilde{x}, \tilde{\mu}) \in \Sigma(\tilde{r}, \tilde{s})$. Por otro lado,

$$\begin{aligned} \|\tilde{\mu} - \mu\| &\leq \|\tilde{\mu} - \bar{\mu}\| + \|\bar{\mu} - \mu\| = \|Q\tilde{x} + \tilde{r} - Q\bar{x}\| + \|\bar{\mu} - \mu\| \\ &\leq \|Q\| \|\tilde{x} - \bar{x}\| + \|\tilde{r}\| + \|\bar{\mu} - \mu\| \\ &\leq \|Q\| (\|\tilde{x} - x\| + \|x - \bar{x}\|) + \|\tilde{r}\| + \|\bar{\mu} - \mu\| \\ &\leq \|Q\| (\Delta + \hat{\varepsilon}) + \|Q\tilde{x} + q - \tilde{\mu}\| + \|\bar{\mu} - \mu\| \\ &\leq \|Q\| (\Delta + \hat{\varepsilon}) + \frac{1}{\rho} \|\tilde{\mu} - \mu\| + \rho\hat{\eta}, \end{aligned} \quad (5.38)$$

donde usamos la definición de \tilde{r} y $\bar{\mu}$, las propiedades de \tilde{x} y \bar{x} , el hecho de que $(\mu, \rho) \in R_{\bar{\mu}}$ y (5.36),

Así, usando (5.38) y el hecho que $\rho \geq \hat{\rho} > 2$ tenemos que:

$$\|\tilde{\mu} - \mu\| \leq \frac{\rho}{\rho - 1} [\|Q\| (\Delta + \hat{\varepsilon}) + \rho\hat{\eta}]. \quad (5.39)$$

Además, dado que $(\mu, \rho) \in R_{\bar{\mu}}$ y de la definición de $\hat{\rho}$ (5.20) tenemos que

$$2\sqrt{2} \|Q\| \left(\frac{\Delta + \hat{\varepsilon}}{\hat{\gamma}} \right) < \rho - 2. \quad (5.40)$$

Ahora deduciremos que,

$$\begin{aligned} \|(\tilde{r}, \tilde{s})\| &= \left\| \left(-(Q\tilde{x} + q - \tilde{\mu}), \frac{1}{\rho}(\tilde{\mu} - \mu) \right) \right\| \\ &= \sqrt{\|Q\tilde{x} + q - \tilde{\mu}\|^2 + \frac{1}{\rho^2} \|\tilde{\mu} - \mu\|^2} \\ &\leq \frac{\sqrt{2}}{\rho} \|\tilde{\mu} - \mu\| \leq \frac{\sqrt{2}}{\rho - 1} [\|Q\| (\Delta + \hat{\varepsilon}) + \rho\hat{\eta}] \\ &= \frac{1}{\rho - 1} \left[2\sqrt{2} \|Q\| \left(\frac{\Delta + \hat{\varepsilon}}{\hat{\gamma}} \right) + \rho \right] \frac{\hat{\gamma}}{2} \\ &\leq \frac{1}{\rho - 1} (\rho - 2 + \rho) \frac{\hat{\gamma}}{2} \\ &= \hat{\gamma} \leq \gamma_0, \end{aligned} \quad (5.41)$$

donde usamos la definición de \tilde{r} y \tilde{s} , la hipótesis (5.36), la desigualdad (5.39), la definición de $\hat{\eta}$ y al desigualdad (5.40)

Por el hecho de que $(\tilde{x}, \tilde{\mu}) \in \Sigma(\tilde{r}, \tilde{s})$, la hipótesis $(\tilde{x}, \tilde{\mu}) \in (\bar{x}, \bar{\mu}) + \varepsilon_0 B$ y (5.41), podemos usar la propiedad de Aubin y obtener que

$$(\tilde{x}, \tilde{\mu}) \in \Sigma(0, 0) + \tau_0 \|(\tilde{r}, \tilde{s})\| B. \quad (5.42)$$

Considerando (5.42) y parte del razonamiento en (5.41) se obtiene:

$$\|(\tilde{x}, \tilde{\mu}) - (\bar{x}, \bar{\mu})\| \leq \tau_0 \|(\tilde{r}, \tilde{s})\| \leq \frac{\sqrt{2}\tau_0}{\rho} \|\tilde{\mu} - \mu\|. \quad (5.43)$$

Ahora notando que de (5.43)

$$\begin{aligned} \|\tilde{\mu} - \mu\| &\leq \|\tilde{\mu} - \bar{\mu}\| + \|\bar{\mu} - \mu\| \leq \|(\tilde{x}, \tilde{\mu}) - (\bar{x}, \bar{\mu})\| + \|\bar{\mu} - \mu\| \\ &\leq \frac{\sqrt{2}\tau_0}{\rho} \|\tilde{\mu} - \mu\| + \|\bar{\mu} - \mu\|, \end{aligned}$$

lo que significa

$$\left(1 - \frac{\sqrt{2}\tau_0}{\rho}\right) \|\tilde{\mu} - \mu\| \leq \|\bar{\mu} - \mu\| \quad (5.44)$$

Ahora usando el hecho de que $\rho \geq \hat{\rho} > 2\sqrt{2}\hat{\varepsilon}/\hat{\gamma} \geq 4\sqrt{2}\tau_0 > 2\sqrt{2}\tau_0$ tenemos que $(1 - \sqrt{2}\tau_0/\rho)^{-1} < 2$. Por lo tanto,

$$\|\tilde{\mu} - \mu\| \leq \left(1 - \frac{2\sqrt{2}\tau_0}{\rho}\right)^{-1} \|\bar{\mu} - \mu\| < 2\|\bar{\mu} - \mu\|. \quad (5.45)$$

Combinando (5.43) con (5.45) obtenemos

$$\|(\tilde{x}, \tilde{\mu}) - (\bar{x}, \bar{\mu})\| \leq \frac{\sqrt{2}\tau_0}{\rho} \|\tilde{\mu} - \mu\| \leq \frac{2\sqrt{2}\tau_0}{\rho} \|\bar{\mu} - \mu\|,$$

concluyendo la prueba. ■

A continuación probaremos la convergencia del algoritmo 5.2.1.

Teorema 5.2.3 *Supongamos que $(\bar{x}, \bar{\mu})$ satisface SSOSC (5.7). Si $x^0 \in \bar{x} + \hat{\varepsilon}B$ y $(\mu^0, \rho_0) \in R_{\bar{\mu}}$, luego el Algoritmo 5.2.1 termina en $(\bar{x}, \bar{\mu})$ o genera una sucesión $\{(x^k, \mu^k)\}$ que está bien definida y converge a $(\bar{x}, \bar{\mu})$.*

Prueba. Si $\sigma(x^k, \mu^k) = 0$ para alguna iteración k , entonces $(x^k, \mu^k) = (\bar{x}, \bar{\mu})$ y el Algoritmo 5.2.1 para. Por otro lado, consideremos el caso donde $\sigma(x^k, \mu^k) > 0$ para todo k .

Por inducción, probaremos que $x^k \in \bar{x} + \hat{\varepsilon}B$ y $(\mu^k, \rho_k) \in R_{\bar{\mu}}$ para todo k . Claramente, se cumple para $k = 0$ por hipótesis. Luego, asumamos que su validez para algún $k \geq 0$. Ahora, por Lema 5.2.1 existe $(x^{k+1}, \mu^{k+1}) \in (\bar{x}, \bar{\mu}) + \hat{\varepsilon}B \subset \varepsilon_0 B$ satisfaciendo el Paso 1 del Algoritmo 5.2.1. Más aún, por Lema 5.2.2 tenemos que

$$\left\| (x^{k+1} - \bar{x}, \mu^{k+1} - \bar{\mu}) \right\| \leq \frac{2\sqrt{2}\tau_0}{\rho_k} \left\| \mu^k - \bar{\mu} \right\| \leq 2\sqrt{2}\tau_0\hat{\eta},$$

donde la última desigualdad se deduce del hecho que $(\mu^k, \rho_k) \in R_{\bar{\mu}}$. Entonces, por (5.20) y el hecho que $2\sqrt{2}\tau_0 < \hat{\rho} \leq \rho_k \leq \rho_{k+1}$, obtenemos

$$\begin{aligned} \left\| x^{k+1} - \bar{x} \right\| &\leq 2\sqrt{2}\tau_0\hat{\eta} = \tau_0\hat{\gamma} \leq \hat{\varepsilon}, \\ \left\| \mu^{k+1} - \bar{\mu} \right\| &\leq 2\sqrt{2}\tau_0\hat{\eta} < \hat{\rho}\hat{\eta} \leq \rho_{k+1}\hat{\eta}. \end{aligned}$$

Así, $x^{k+1} \in \bar{x} + \hat{\varepsilon}B$ y $(\mu^{k+1}, \rho_{k+1}) \in R_{\bar{\mu}}$.

Nuevamente por el Lema 5.2.2 y el hecho que $\rho_0 \leq \rho_{k+1}$ para todo k tenemos:

$$\begin{aligned} \left\| \left(x^{k+1} - \bar{x}, \mu^{k+1} - \bar{\mu} \right) \right\| &\leq \frac{2\sqrt{2}\tau_0}{\rho_{k+1}} \left\| \mu^k - \bar{\mu} \right\| \leq \dots \\ &\leq \left(\frac{2\sqrt{2}\tau_0}{\rho_0} \right)^{k+1} \left\| \mu^0 - \bar{\mu} \right\|. \end{aligned}$$

Usando que $2\sqrt{2}\tau_0 < \hat{\rho} \leq \rho_0$ obtenemos $2\sqrt{2}\tau_0/\rho_0 < 1$ y podemos concluir que $(x^k, \mu^k) \rightarrow (\bar{x}, \bar{\mu})$ cuando $k \rightarrow \infty$. ■

5.3. Subproblemas.

En la k -ésima iteración de (5.2.1), para μ^k y ρ_k fijos definiremos x^{k+1} mediante la realización de una variante de un método de Newton para minimizar la función ϕ_k definida por:

$$\phi_k(x) = \bar{L}(x, \mu^k; \rho_k). \quad (5.46)$$

Notar que ϕ_k no es dos veces diferenciable, pero es “semismoothly diferenciable”, es decir, una función diferenciable con derivada “semismooth” [9].

Luego, vale el gradiente generalizado de Clarke

$$\partial\phi'_k(x) \subset \text{conv} \left\{ Q + \rho I(S) \mid \text{para } S \subset \mathcal{I}_{\geq}(x, \mu^k; \rho_k) \right\},$$

donde $I(S)$ es una matriz diagonal cuyos elementos en la diagonal son

$$[I(S)]_{ii} = \begin{cases} 1, & i \in S, \\ 0, & i \notin S, \end{cases}$$

y

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{\geq}(x, \mu; \rho) &= \{i \in \{1, \dots, n\} \mid \mu_i - \rho x_i \geq 0\}, \\ \mathcal{I}_{<}(x, \mu; \rho) &= \{i \in \{1, \dots, n\} \mid \mu_i - \rho x_i < 0\}. \end{aligned}$$

A continuación realizaremos un método de Newton de búsqueda lineal “semismooth” para minimizar la función ϕ_k . Para ser más precisos, seguiremos el método de Newton truncado explicad en [17] que encuentra una dirección de descenso p^k para ϕ_k en x^k resolviendo inexactamente el problema auxiliar

$$\underset{p}{\text{minimizar}} \quad \frac{1}{2} \langle V^k p, p \rangle + \langle \phi'_k(x^k), p \rangle,$$

donde $V^k \in \partial\phi'_k(x^k)$. La salida aceptada p^k debe satisfacer además

$$\|V^k p^k + \phi'_k(x^k)\| \leq \text{mín} \left\{ 0,5, \sqrt{\|\phi'_k(x^k)\|} \right\} \|\phi'_k(x^k)\|,$$

La elección de este test de parada garantiza que p^k es una dirección de descenso.

Para simplificar la notación diremos que d es una solución de

$$\|Ad + b\| \leq \text{mín} \left\{ 0,5, \sqrt{\|b\|} \right\} \|b\|, \quad \text{InexLin}(A, b)$$

para algún vector d dado por la iteración anterior de un método de Gradiente Conjugado.

5.3.1. El algoritmo de búsqueda lineal tipo Newton

Dados $\mu \in \mathbb{R}_+^n$, $\rho > 0$, $c \geq 0$ y una función “semismoothly” continuamente diferenciable $\phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, consideremos el problema de encontrar $\tilde{y} \in \mathbb{R}^n$ y $\tilde{\mu} \in \mathbb{R}_+^n$ tales que

$$\|\phi'(\tilde{y})\| \leq \frac{1}{\rho} \|\tilde{\mu} - \mu\|, \quad (5.47)$$

El algoritmo que utilizaremos para resolver este problema está basado en el método de Newton explicado anteriormente.

Algoritmo 5.3.1 $LSNM(\phi, \mu, \rho)$

Paso 1:

Hacer $j = 0$ y dar una punto inicial y^0 .

Paso 2: *Criterio de parada*

Definir $\tilde{y} = y^j$, $\tilde{\mu} = \max\{0, \mu - \rho y^j\}$ y parar si (5.47) se satisface.

Paso 3: *Resolver el problema lineal inexacto*

Tomar $V^j \in \partial\phi'(y^j)$ y definir d^j como una solución de $\text{InexLin}(V^j, \phi'(y^j))$.

Paso 4:

Hacer $y^{j+1} = y^j + \alpha_j d^j$, donde α_j satisface la condición de backtracking de la regla de Wolfe o la de Armijo¹.

Paso 5:

Definir $j \leftarrow j + 1$; ir al Paso 2.

5.4. El algoritmo del Lagrangiano aumentado

En esta sección daremos el algoritmo del programa principal. Las soluciones aproximadas de los subproblemas son definidas como puntos que satisfacen las condiciones en el paso 3, que están relacionadas con las condiciones KKT del problema de minimización de L . Luego las aproximaciones de los multiplicadores son calculadas en el paso 4. Finalmente en el paso 5 actualizamos el parámetro de penalización de acuerdo al progreso en términos del residuo natural.

Algoritmo 5.4.1 *Algoritmo principal del Lagrangiano aumentado*

¹Nosotros proponemos encontrar y^{j+1} usando Wolfe o Armijo dado que se puede aprovechar la estructura del problema.

Paso 0:

Sea x^0 un punto inicial arbitrario, μ^0 un multiplicador de Lagrange inicial y $\rho_0 > 0$ el parámetro de penalización.

Definir los parámetros $\tau > 0$, $\delta \in (0, 1)$, $\beta \in (0, 1)$ y $\gamma > 1$.

Paso 1:

Hacer $k = 0$, y calcular $\sigma_k = \sigma(x^0, \mu^0)$ como en (5.16).

Paso 2:

Si σ_k es menor que una tolerancia fijar devolver (x^k, μ^k) , de otro modo continuar.

Paso 3:

Resolver el subproblema

Calcular x^{k+1} resolviendo el subproblema (5.2.1) usando el algoritmo

$$\mathbf{LSNM}(\phi_k, \mu_k, \rho_k, c)$$

con punto inicial x^k y ϕ_k definido como en (5.46).

Paso 4:

Hacer

$$\mu^{k+1} = \text{máx}\{0, \mu^k - \rho_k x^{k+1}\},$$

y calcular el nuevo residuo natural

$$\sigma_{k+1} = \sigma(x^{k+1}, \mu^{k+1}).$$

Paso 5:

Actualizar el parámetro de penalización,

$$\text{si } \sigma_{k+1} > \beta \text{ mín}\{\sigma_0, \dots, \sigma_k\}, \text{ entonces } \rho_{k+1} = \gamma \rho_k,$$

en caso contrario $\rho_{k+1} = \rho_k$.

Paso 6:

Hacer $k = k + 1$ y volver al Paso 2.

5.5. Conclusiones y trabajos futuros

Como conclusión de este capítulo creemos que el método aquí propuesto es un buen método para resolver problemas de programación cuadrática con restricciones simples de gran tamaño. Por los resultados probados en esta parte, podemos decir que el algoritmo dado está bien definido y se probó la convergencia teórica de este. De igual manera que la gran mayoría de los métodos basados en el Lagrangiano aumentado, la principal complicación de este método es la elección apropiada de la aproximación inicial del multiplicador de Lagrange y el parámetro de penalización inicial.

Uno de los resultados a remarcar en este método es que, debido a la estructura del problema original, podemos definir el criterio de parada mediante un parámetro que es intrínseco. Esto debería dar una mejor aproximación a la solución, considerando que es un método que resuelve los subproblemas de manera inexacta.

Para un trabajo futuro, un objetivo es el de llevar a cabo una comparación con otros métodos clásicos con el fin de concluir que tan efectivo es este método y que ventajas ofrece respecto a los actuales. Además de esto, como el principal objetivo a trabajar, es de llevar a cabo la programación del Algoritmo 5.4.1 en el caso particular para resolver el problema de control desarrollado en el Capítulo 3 para las variables espacial y temporal de mayor dimensión.

Bibliografía

- [1] <http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs117/en/>.
- [2] J. Arino, C. Bowman, A. Gumel, and S. Portet. Effect of pathogen-resistant vectors on the transmission dynamics of a vector-borne disease. *Journal of biological dynamics*, 1(4):320–346, 2007.
- [3] D. P. Bertsekas. *Constrained optimization and Lagrange multiplier methods*. Computer Science and Applied Mathematics. Academic Press Inc., New York, 1982.
- [4] A. E. Carbajo, N. Schweigmann, S. I. Curto, A. De Garín, and R. Bejarán. Dengue transmission risk maps of argentina. *Tropical Medicine & International Health*, 6(3):170–183, 2001.
- [5] F. H. Clarke. *Optimization and nonsmooth analysis*, volume 5. Siam, 1990.
- [6] A. Dontchev and R. Rockafellar. Characterizations of strong regularity for variational inequalities over polyhedral convex sets. *SIAM Journal on Optimization*, 6(4):1087–1105, 1996.
- [7] L. Esteva and C. Vargas. Analysis of a dengue disease transmission model. *Mathematical biosciences*, 150(2):131–151, 1998.
- [8] L. Esteva and H. M. Yang. Mathematical model to assess the control of aedes aegypti mosquitoes by the sterile insect technique. *Mathematical biosciences*, 198(2):132–147, 2005.
- [9] F. Facchinei and J.-S. Pang. *Finite-dimensional variational inequalities and complementarity problems*, volume 2. Springer Science & Business Media, 2003.
- [10] Z. Feng and J. X. Velasco-Hernández. Competitive exclusion in a vector-host model for the dengue fever. *Journal of mathematical biology*, 35(5):523–544, 1997.
- [11] A. A. Lashari and G. Zaman. Optimal control of a vector borne disease with horizontal transmission. *Nonlinear Analysis: Real World Applications*, 13(1):203–212, 2012.
- [12] G. Macdonald. The analysis of equilibrium in malaria. *Tropical diseases bulletin*, 49(9):813–829, 1952.
- [13] C. Maguiña Vargas, F. Osoreo Plengue, L. Suárez Ognio, L. Soto Arquiniño, and K. Pardo Ruiz. Dengue clásico y hemorrágico: una enfermedad reemergente y emergente en el Perú. *Revista Medica Herediana*, 16(2):120–140, 2005.

- [14] R. Mifflin. Semismooth and semiconvex functions in constrained optimization. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 15(6):959–972, 1977.
- [15] J. D. Murray. *Mathematical Biology II: Spatial Models and Biomedical Applications, vol. 18 of Interdisciplinary Applied Mathematics*. Springer-Verlag New York Incorporated, 2001.
- [16] E. Newton and P. Reiter. A model of the transmission of dengue fever with an evaluation of the impact of ultra-low volume (ulv) insecticide applications on dengue epidemics. *The American Journal of Tropical Medicine and Hygiene*, 47(6):709–720, 1992.
- [17] J. Nocedal and S. J. Wright. *Numerical optimization*. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer, New York, second edition, 2006.
- [18] S. T. R. d. Pinho, C. P. Ferreira, L. Esteva, F. Barreto, V. M. e Silva, and M. Teixeira. Modelling the dynamics of dengue real epidemics. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 368(1933):5679–5693, 2010.
- [19] L. Qi and J. Sun. A nonsmooth version of newton’s method. *Mathematical programming*, 58(1-3):353–367, 1993.
- [20] M. Raffy and A. Tran. On the dynamics of flying insects populations controlled by large scale information. *Theoretical population biology*, 68(2):91–104, 2005.
- [21] H. S. Rodrigues, M. T. T. Monteiro, and D. F. Torres. Dynamics of dengue epidemics when using optimal control. *Mathematical and Computer Modelling*, 52(9):1667–1673, 2010.
- [22] R. Ross. The prevention of malaria. 1911.
- [23] D. Sun. A further result on an implicit function theorem for locally lipschitz functions. *Operations Research Letters*, 28(4):193–198, 2001.
- [24] R. C. Thomé, H. M. Yang, and L. Esteva. Optimal control of aedes aegypti mosquitoes by the sterile insect technique and insecticide. *Mathematical Biosciences*, 223(1):12–23, 2010.
- [25] A. Tran and M. Raffy. On the dynamics of dengue epidemics from large-scale information. *Theoretical Population Biology*, 69(1):3–12, 2006.
- [26] W. Wang and X.-Q. Zhao. A nonlocal and time-delayed reaction-diffusion model of dengue transmission. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 71(1):147–168, 2011.