



Universidad Autónoma de Querétaro

Facultad de Ingeniería

Licenciatura en Matemáticas Aplicadas

“Análisis de sensibilidad en el diseño óptimo experimental para sistemas de ecuaciones diferenciales”

TESIS

Que como parte de los requisitos para obtener el título de
Licenciado en Matemáticas Aplicadas

Presenta:

Gilberto Guillermo Sánchez de la Isla

Dirigido por:

Dr. Eduardo Castaño Tostado

SINODALES

Dr. Eduardo Castaño Tostado

Director

Firma

M. en C. Sara Silva Hernández

Sinodal

Firma

M. en C. Bernardo Chávez Castillo

Sinodal

Firma

LMA. Wilfrido Jacobo Paredes García

Sinodal

Firma

Dr. Aurelio Domínguez González
Director de la Facultad

M. en D. Patricia Spíndola Yáñez
Coord. de la Lic. en Matemáticas Aplicadas

RESUMEN

La experimentación juega un papel fundamental en todos los campos de la investigación, el desarrollo tecnológico e innovación. El objetivo de la experimentación es obtener información de calidad que permita desarrollar nuevos productos y procesos, comprender mejor un sistema. El diseñar un experimento nos permite prever cuestiones fundamentales para su desarrollo pleno, como lo son: el costo, el tiempo con el que se cuenta para el desarrollo, y la información que se busca a partir del experimento. No obstante, aun cuando es posible reunir y procesar grandes cantidades de datos, no siempre está claro dentro de un fenómeno dinámico en el tiempo, cuándo deben recopilarse dichos datos. Así, parte del diseño experimental es decidir en qué tiempos y con qué frecuencia debe observarse la dinámica del fenómeno para no perder información importante y/o desperdiciar recursos valiosos.

Apoyándose en las herramientas que proporcionan tanto el Diseño Estadístico Experimental, lo que corresponde al Diseño Óptimo, se estudiará cómo obtener un conjunto de tiempos de observación de un fenómeno de interés y cómo este conjunto se ve afectado por una mala especificación del modelo versus el fenómeno. El objetivo de la tesis es estudiar las etapas de modelación matemático – estadística, en particular, la teoría del diseño óptimo de experimentos y su aplicación para comprender fenómenos dinámicos, representados mediante un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias con valores iniciales.

Se utilizaron sistemas de ecuaciones teóricos como el modelo Lotka-Volterra (presa depredador), con diversos parámetros iniciales, de manera que se aprecia la variabilidad del modelo de acuerdo a estos cambios; el modelo presa-depredador corregido, donde un sesgo sistemático cambia el comportamiento del modelo original y se pueden observar las modificaciones en la dinámica del mismo; y por último se analizó un modelo aplicado basándose en datos obtenidos en la práctica, para apoyar las observaciones obtenidas con los modelos teóricos. En general los resultados obtenidos muestran que los modelos con comportamiento cíclico como el Lotka-Volterra presentan problemas ante ciertos criterios para el Diseño Óptimo, de igual manera se presentan algunas opciones para dichos problemas, como realizar un muestreo, reducir el tamaño de malla para las unidades de tiempo o agregar un parámetro que modifique la dinámica del sistema. Además de que se puede apreciar la importancia de tener un modelo matemático con ecuaciones bien definidas, que se ajusten completamente a los datos experimentales con los que se cuentan.

(Palabras clave: sensibilidad, diseño óptimo, modelación matemática, sistema de ecuaciones diferenciales, presa depredador, presa depredador corregido, ácido láctico).

DEDICATORIA

A mis padres, que les debo todo lo que fui, todo lo que soy y sobretodo todo lo que algún día
llegaré a ser.

A mis hermanos, esperando que de alguna manera pueda inspirarlos a lograr sus propósitos
así como yo completé éste.

AGRADECIMIENTOS

A Dios por darme la oportunidad de completar esta experiencia con un gran aprendizaje en todos los aspectos de mi vida.

A mis padres, que con su ejemplo me enseñaron la importancia del trabajo duro y el sacrificio para poder alcanzar cualquier meta propuesta.

A toda mi familia, por el apoyo que han mostrado a lo largo de estos años, por esos pequeños detalles que hacen la diferencia; en especial a mi tío Agustín por ser un ejemplo de dedicación.

Al Dr. Eduardo Castaño por haberme aceptado primero como su alumno, y posteriormente por haber aceptado dirigir este trabajo de tesis. Gracias por el gran aprendizaje y las lecciones obtenidas a lo largo del camino.

A mis sinodales M. en C. Sara Silva, M. en C. Bernardo Chávez y LMA Jacobo Paredes, por las clases, por la ayuda brindada a lo largo de la licenciatura y por sus consejos y el tiempo brindado a este trabajo.

A todos los maestros de la Licenciatura en Matemáticas Aplicadas de la UAQ, por todo lo aprendido, la dedicación y la paciencia que demuestran con nosotros, sus alumnos.

A mis amigos de la preparatoria; Daniel, Miriam, José Manuel, Aceneth, Raquel, que me apoyaron en una etapa importante de mi vida y que siguen siempre dispuestos a brindarme su amistad.

A las “Wallflowers”; Chenci, Anilu y Daniela por siempre estar ahí para mí y por todo el apoyo incondicional.

A todos los amigos que formaron y forman parte de mi vida durante toda esta experiencia de la licenciatura; Héctor, Mariana, Pablo, Jimena, Idalia, Ely, Iván, Victor, Ana Luisa, Cabral, Adriana, Lupita, July, Fausto y tantos otros que no he podido mencionar por nombre, pero que agradezco infinitamente el haberme encontrado con ellos y de igual manera agradezco lo que cada uno de ellos ha aportado a mi vida. Mención especial a Maris por el apoyo que me ha dado y el crecimiento en mi vida por todo lo aprendido juntos.

A Pau y Toño, por las lecciones, el apoyo y todas las experiencias; por toda la influencia que han tenido en mí, los quiero chavos.

Índice

1. Introducción	2
1.1 Diseño Estadístico de Experimentos	3
1.2 Diseño Óptimo de Experimentos	5
1.2.1 Criterio A-Óptimo	6
1.3 Objetivo del trabajo de tesis	6
1.4 Uso del software Easy Fit.....	7
1.4.1 Inicio	7
1.4.2 Simulación	9
1.4.3 Estimación de parámetros.....	10
1.4.4 Diseño Óptimo Experimental	10
2. Modelo Presa-Depredador	11
2.1 Modelo Presa-Depredador: el Desarrollo	13
2.2 Simulación y Estimación de Parámetros	15
2.3 Diseño óptimo de los tiempos de observación en el tiempo.....	20
2.4 Observaciones y Hallazgos	23
3. Modelo Presa-Depredador Corregido	28
3.1 Modelo Presa-Depredador Corregido: el Desarrollo	28
3.2 Simulación y Estimación de Parámetros	30
3.3 Diseño óptimo de los tiempos de observación	33
3.4 Observaciones y Hallazgos	35
4. Modelo Presa-Depredador: Revisado	38
4.1 Modelo Presa-Depredador: Revisado	38
4.2 Modelo Presa-Depredador vs Modelo Presa Depredador Corregido.....	42
4.3 Modelo Presa-Depredador Corregido con error experimental.....	44
5. Modelo Biomasa-Sustrato-Producto	56
5.1 Aplicación.....	56
5.2 Modelo Enzima-Sustrato: el Desarrollo.....	58
5.3 Simulación y Estimación de Parámetros	59
5.4 Diseño Óptimo.....	63
5.5 Conclusiones y Hallazgos	65
6. Conclusiones	69
7. Bibliografía	71

1. Introducción

La experimentación juega un papel fundamental en todos los campos de la investigación, el desarrollo tecnológico e innovación. El objetivo de la experimentación es obtener información de calidad que permita desarrollar nuevos productos y procesos, comprender mejor un sistema y tomar decisiones sobre cómo optimizarlo y mejorar su calidad. El diseñar un experimento nos permite prever cuestiones fundamentales para su desarrollo pleno, como lo son: el costo, el tiempo con el que se cuenta para el desarrollo, y la información que se busca a partir del experimento.

Durante la última década, las técnicas de recolección y procesamiento de datos han mejorado. De igual manera, recientes avances en ecuaciones diferenciales y en la solución numérica de las ecuaciones integrales han permitido simular procesos complejos de mejor manera. Como resultado, actualmente se está en condiciones de hacer frente a problemas inversos, modelos matemáticos con características desconocidas, las cuales deben ser obtenidas en función de los datos observados, que no habíamos considerado antes.

No obstante, aun cuando es posible reunir y procesar grandes cantidades de datos, no siempre está claro dentro de un fenómeno dinámico en el tiempo, cuándo deben recopilarse dichos datos. Así, parte del diseño experimental es decidir en qué tiempos y con qué frecuencia debe observarse la dinámica del fenómeno para no perder información importante y/o desperdiciar recursos valiosos.

En un experimento, la etapa de diseño debe de ser la más importante, pues una planeación correcta del experimento, nos permitirá aumentar las probabilidades de que éste sea exitoso.

Sin embargo, la teoría de diseño experimental se ha desarrollado suponiendo que el modelo especificado es el más apropiado para describir al fenómeno de interés, cuando lo que en realidad sucede es que el modelo es especificado tentativamente, esperando que se apegue al fenómeno.

Apoyándose en las herramientas que proporcionan tanto el Diseño Estadístico Experimental, lo que corresponde al Diseño Óptimo, se estudiará cómo obtener un conjunto de tiempos de observación de un fenómeno de interés y cómo este conjunto se ve afectado por una mala especificación del modelo versus el fenómeno.

1.1 Diseño Estadístico de Experimentos

Un experimento, como lo presenta Montgomery [1], puede definirse como una prueba o serie de pruebas en las que se hacen cambios en las variables de entrada de un proceso o sistema para observar las razones de los cambios que pudieran observarse en la respuesta de salida.

Para realizar un experimento, el primer paso a tomar es realizar una descripción precisa y completa de los elementos que interactúan y forman parte del fenómeno bajo estudio como en la Figura 1.1. Al experimento se introducen variables de entrada cuyos comportamientos pueden verse alterados por los factores que están en juego a lo largo de todo el proceso. Algunos pueden ser controlables (x_1, x_2, \dots, x_p) mientras que existen factores externos que no pueden ser controlados (z_1, z_2, \dots, z_q). Al finalizar el proceso, se obtiene una variable de salida y la respuesta a la interacción de los factores con las variables de entrada.

En términos generales, del experimento se quieren determinar aquellos factores (controlables o no) que presentan mayor influencia sobre la respuesta.

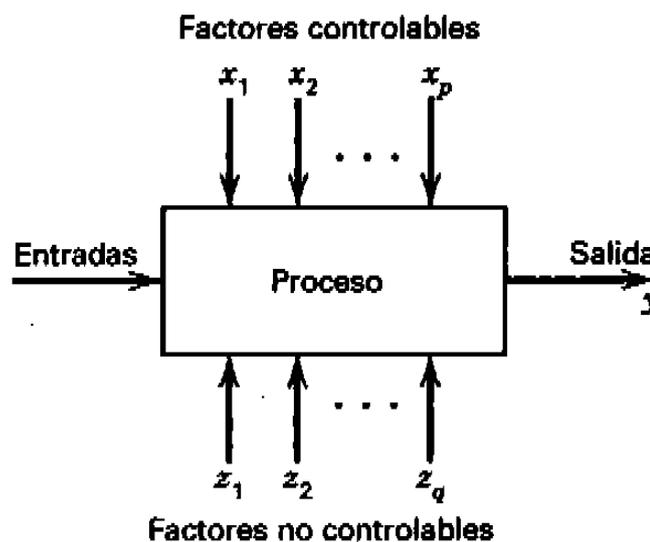


Figura 1.1. Representación sistemática de un proceso o experimento.

Cómo elucidar de manera eficiente estos factores es la materia de la teoría del Diseño Estadístico de Experimentos.

Por ejemplo, se tiene un proceso cuya respuesta de interés es el rendimiento; se quiere delimitar la región donde el rendimiento se maximiza. Todo depende de la naturaleza del sistema descrito por el experimento y los términos en los que se expresa el modelo que describe dicho experimento.

Para todo experimento, es posible utilizar un esquema general de ideas para realizar la planeación del proceso. Al seguir los siguientes pasos (Salvador [2]), podemos garantizar un mejor conocimiento del fenómeno y un mejor entendimiento de la solución final del problema.

- Definición de objetivos experimentales. Es importante planear el problema de forma concreta y definir los objetivos, alcances y limitantes del experimento. Se deben obtener datos que muestren el impacto del problema, para lo cual es necesario medir y definir el punto de partida.
- Factores. Posteriormente se deben determinar los factores a analizarse de acuerdo a la influencia que tienen sobre las variables respuesta a ser medidas en cada punto de diseño.
- Selección del diseño. Aquí es seleccionado el diseño experimental adecuado a la información con la que se cuenta, tanto datos experimentales como parámetros y factores a estudiar; de manera que se ajusten al objetivo del experimento.
- Definición de las variables respuesta. La variable respuesta es aquella variable que se mide en cada observación del experimento. Al definir correctamente a una variable respuesta, se está estableciendo efectivamente qué factores influyen en ésta.
- Aleatorización. El proceso de aleatorización es fundamental en el desarrollo del experimento, pues permite que la información obtenida provenga de las variables de entrada del modelo y no de factores externos no controlados del sistema.

De esta manera, se puede establecer un modelo simple que describa las relaciones de las variables respuesta con los factores que actúan dentro del sistema. Para esto se especifica el modelo 1.1; donde y es la variable respuesta, mientras que η representa la parte sistemática, a ser especificada, del modelo como función de x , los factores que se presume influyen en y , y parametrizada por θ , que primariamente representa la cuantificación de los efectos de x sobre y en el modelo η ; mientras que ϵ es un componente de error experimental debido a factores considerados no importantes y por lo tanto no controlados en el experimento.

$$y = \eta(x, \theta) + \epsilon \quad (1.1)$$

El análisis de los resultados experimentales permitirá obtener conclusiones sobre el sistema en estudio y decidir acciones futuras. Tanto por la importancia de las decisiones que se pueden tomar, como por el coste elevado de la experimentación, no parece adecuado dejar la elección de los experimentos y la evaluación de los resultados a la mera intuición del experimentador. Parece más razonable utilizar una metodología matemática y estadística que indique cómo diseñar la secuencia de experimentos de una forma óptima, de modo que se minimice tanto el coste de la experimentación como la influencia de factores no controlables sobre la información buscada.

En la práctica, no se conocen todas las variables que interactúan dentro de una dinámica, por lo cual siempre es importante proceder cautelosamente.

1.2 Diseño Óptimo de Experimentos

La teoría del diseño experimental surge con base en la necesidad de eliminar el efecto de las variables no controladas para poder discriminar entre los factores que afectan más a la variable respuesta. El problema es que, para cubrir esta necesidad, el experimento crece tanto en supuestos como en coste de la experimentación. El Diseño Óptimo de Experimentos se enfoca en la obtención de los mejores estimadores de los efectos sobre la variable respuesta con diversos criterios de optimalidad, por ejemplo estimadores con menor varianza.

La teoría del diseño óptimo de experimentos ofrece una alternativa válida para obtener la información necesaria en estos estudios con un menor número de pruebas. La misma se basa en un conjunto de métodos que parten de la especificación del modelo que describe la relación entre los factores y las características de calidad, la elección de un criterio de optimalidad para determinar en dónde experimentar y el número de corridas experimentales a realizar para estimar los parámetros relevantes del modelo, de modo de satisfacer el criterio definido [3].

Como lo menciona Rodríguez Díaz [4], la especificación del modelo para la búsqueda del diseño óptimo es un problema que no tiene solución general, es decir, todos los modelos son incorrectos finalmente, por lo que el diseño será óptimo relativamente al modelo especificado. Es de interés buscar un diseño que proporcione estimadores precisos para el modelo especificado pero que simultáneamente proporcione información sobre que tanto el modelo especificado es incorrecto en relación a aspectos esenciales del fenómeno.

Una vez especificado el modelo más adecuado, habrá que pensar en el método de estimación de $\hat{\theta}$, el estimador de θ del modelo (1.1), y pensar en sus propiedades, por ejemplo su varianza $V(\hat{\theta})$.

Posteriormente, ya formulado el problema de estimación de los parámetros del modelo, se debe elegir el criterio de optimización del diseño a ser utilizado para observar al fenómeno, para luego generar los datos.

Por tanto, el diseño óptimo de un experimento se desarrolla en tres etapas [4]

- Especificación del modelo (1.1).
- Elección de un criterio de optimización del diseño experimental para seleccionar las mejores x dónde observar a y .
- Implementación de un algoritmo para el cálculo del diseño óptimo.

1.2.1 Criterio A-Óptimo

Como se mencionaba anteriormente, existen distintos criterios de optimalidad en el diseño experimental con distintos criterios estadísticos.

Para poder hablar acerca de criterios de optimalidad, primeramente se definirá una función criterio (Rodríguez Díaz [4]).

Sea M una matriz de información asociada al modelo y a una configuración específica de x , denotada ésta por ξ . Sea Φ una función \mathcal{M} del espacio de matrices acotada inferiormente

$$\Phi: \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\} \quad (1.1)$$

Donde si:

$$V_{\xi}(g) \leq V_{\eta}(g) \text{ para todo funcional } g \Rightarrow \Phi[M(\xi)] \leq \Phi[M(\eta)] \quad (1.2)$$

Se dice que se trata de un criterio de Φ -optimización para obtener ξ . El diseño ξ que minimice $\Phi[M(\xi)]$ se denominará diseño Φ -óptimo.

Definida en general la función criterio, se puede operar con criterios diversos de optimización, los cuales permiten obtener diferentes grados de información a partir del criterio elegido.

Se define el criterio A-óptimo, el cual viene dado por la función criterio:

$$\Phi_A[M(\xi)] = \sum_{i=1}^m V_{\xi}(\hat{\theta}_i) = \begin{cases} TrM^{-1}(\xi) & \text{si } \det M(\xi) \neq 0 \\ \infty & \text{si } \det M(\xi) = 0 \end{cases} \quad (1.3)$$

Es decir, el criterio A-óptimo minimiza el promedio de las varianzas de los estimadores de los parámetros, pero no toma en cuenta las covarianzas entre ellos.

Para este trabajo, el criterio conocido como A-Óptimo es de gran importancia, pues es el que se implementa como criterio dentro de la herramienta de cálculo utilizada a la hora de realizar los cálculos del diseño óptimo.

1.3 Objetivo del trabajo de tesis

El objetivo de la tesis es estudiar las etapas de modelación matemático – estadística, en particular, la teoría del diseño óptimo de experimentos y su aplicación para comprender fenómenos dinámicos, representados mediante un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias con valores iniciales. En este caso específico, en referencia al modelo (1.1) y resulta ser un vector de variables respuesta que corresponden a la solución del sistema de ecuaciones diferenciales

En específico, se estudiará el caso en donde el único x es el tiempo de observación, con lo que el problema del diseño óptimo estadístico del experimento de interés es decidir cuándo observar al fenómeno, de forma que se capten los aspectos más importantes de su evolución temporal. De igual manera, interesa observar cómo estos tiempos son útiles; ya

sea ante una especificación incorrecta del modelo (1.1) para un fenómeno o ante la presencia excesiva de ruido experimental.

1.4 Uso del software Easy-Fit

Para estudiar de manera concreta el diseño óptimo de experimentos en fenómenos dinámicos, se eligió el software Easy-Fit Model Design versión 5.13, desarrollado por el profesor en Matemática Computacional Klaus Schittkowski (Schittkowski [6]). El software cuenta con rutinas y algoritmos computacionales que nos permiten estudiar y analizar sistemas dinámicos paso a paso. Dichas rutinas incluyen procesos para la simulación de la dinámica de un fenómeno, así como para la estimación de parámetros y diseño experimental para distintos tipos de modelos matemáticos.

1.4.1 Inicio

Deben definirse ciertas especificaciones que el programa requiere para realizar las rutinas de análisis.

Lo primero que hay que especificar es el tipo de modelo con el cual se representará nuestro fenómeno de estudio. Siete distintos tipos de modelos pueden ser utilizados, pero para el desarrollo de esta tesis, como ya se mencionó, el tipo de modelo elegido es un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias con valores iniciales (Figura 1.3.1).

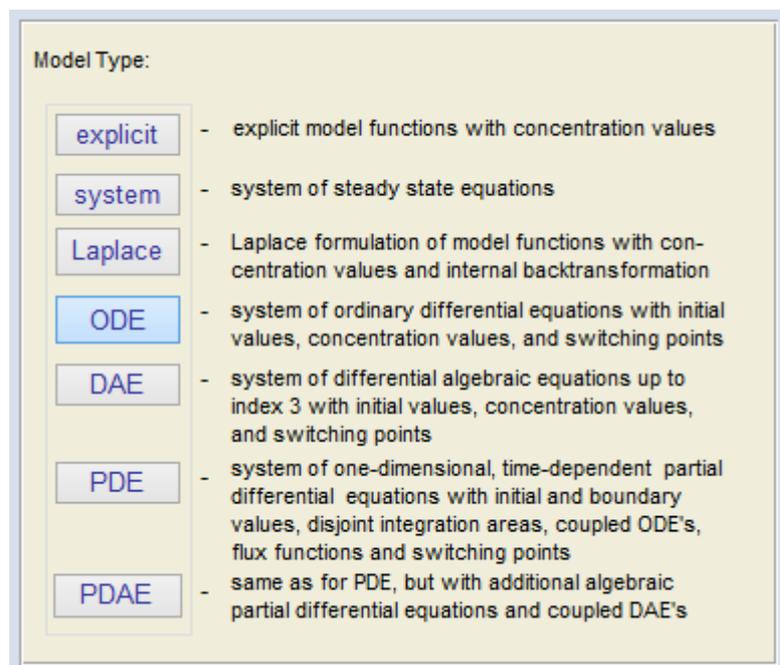


Figura 1.3.1. Tipos de modelos.

Una vez elegido el modelo para el caso de estudio, deben ser especificados los parámetros β del sistema en la tabla inicial de la interfaz del software; los nombres que toman en la estructura del modelo, sus valores iniciales así como las cotas inferiores o superiores. Una vez aplicada la rutina para obtener la estimación de β , el valor óptimo $\hat{\beta}$, así como su importancia dentro del modelo serán especificados. (Figura 1.3.2)

no	name	lower	starti	upper	optimal	
1	alp	0,00E+00	2,3185E+00	1,00E+06	2,3185E+00	3
2	bet	0,00E+00	1,3943E+00	1,00E+06	1,3943E+00	1
3	gamma	0,00E+00	8,4677E-01	1,00E+06	8,4677E-01	3
4	delta	0,00E+00	9,4331E-01	1,00E+06	9,4331E-01	2
*	x	0,00E+00	1,0000E+01	1,00E+06		0

Figura 1.3.2. Tabla de Parámetros del modelo

Para completar la información del modelo, deben especificarse las funciones del modelo; en el caso del tipo de modelo elegido para esta tesis, debe especificarse el sistema de ecuaciones, los parámetros β dentro del sistema, así como sus valores iniciales y el comportamiento que seguirá el fenómeno posterior al valor inicial.

Una vez identificada la información del modelo, debe especificarse la información experimental; el intervalo de unidades de tiempo en el cual se desarrollará el fenómeno, valores que representan una solución a cada una de las funciones del modelo, así como una ponderación (*weight*) para realizar la optimización para el diseño óptimo de dónde observar al fenómeno (Figura 1.3.3).

time	conc	value 1	weight 1	value 2	weight 2	value 3	weight 3	value 4	weight 4	value 5	weight 5
0	0	1	0,0000161	0,5	0,0000161	0	1	0	1	0	0
1	0	3,3416312	0,34	1,1793721	0,0000161	0	1	0	1	0	0
2	0	0,7544858	0,0000161	3,8524751	0,0000161	0	1	0	1	0	0
3	0	0,1773426	0,0000161	1,9047852	0,0000161	0	1	0	1	0	0
4	0	0,2780913	0,0000161	0,8404385	0,0000161	0	1	0	1	0	0
5	0	0,9707065	0,0000161	0,5012133	0,0000161	0	1	0	1	0	0
6	0	3,2982467	0,0000161	1,1305887	0,0000161	0	1	0	1	0	0
7	0	0,7980068	0,0000161	3,87721	0,0000161	0	1	0	1	0	0
8	0	0,1785067	0,0000161	1,9390883	0,0000161	0	1	0	1	0	0
9	0	0,2723441	0,0000161	0,853989	0,0000161	0	1	0	1	0	0
10	0	0,9423043	0,0000161	0,5027032	0,0000161	0	1	0	1	0	0
11	0	3,2515362	0,0000161	1,0847636	0,0000161	0	1	0	1	0	0
12	0	0,8445208	0,0000161	3,8987653	0,28	0	1	0	1	0	0
13	0	0,1798332	0,0000161	1,9739553	0,0000161	0	1	0	1	0	0
14	0	0,2668093	0,0000161	0,8678453	0,0000161	0	1	0	1	0	0
15	0	0,9147788	0,0000161	0,5044657	0,0000161	0	1	0	1	0	0
16	0	3,2018752	0,0000161	1,0417663	0,0000161	0	1	0	1	0	0
17	0	0,8941746	0,0906	3,9168349	0,0000161	0	1	0	1	0	0
18	0	0,1813322	0,0000161	2,0093815	0,0000161	0	1	0	1	0	0
19	0	0,2614877	0,0000161	0,8820124	0,0000161	0	1	0	1	0	0
20	0	0,8881272	0,0000161	0,5065016	0,0000161	0	1	0	1	0	0
21	0	0,8881272	0,0000161	0,5065016	0,0000161	0	1	0	1	0	0
22	0	3,1496514	0,0000161	1,0014955	0,0000161	0	1	0	1	0	0
23	0	0,9471057	0,0000161	3,9310774	0,0000161	0	1	0	1	0	0
24	0	0,1830118	0,0000161	2,045345	0,0000161	0	1	0	1	0	0
25	0	0,2563668	0,0000161	0,8964899	0,0000161	0	1	0	1	0	0
26	0	0,8623078	0,0000161	0,5087939	0,0000161	0	1	0	1	0	0
27	0	3,0952539	0,289	0,9637697	0,0000161	0	1	0	1	0	0

Figura 1.3.3. Información experimental

Una vez especificados estos aspectos para el modelo de estudio, se puede proceder a las rutinas para el estudio del diseño óptimo de experimentos.

1.4.2 Simulación

El software ofrece la posibilidad de mostrar la solución del sistema partiendo ya sea del conjunto de parámetros dados inicialmente o partir de los parámetros estimados con la ayuda del software Easy-Fit (Schittkowski [6]).

Si los datos anteriores se introducen correctamente, el programa generará los siguientes estadísticos:

- Estimación de la matriz de varianzas y covarianzas para los parámetros del modelo.
- Estimación de la matriz de correlación para los parámetros del modelo.
- Varianza estimada para los residuos.
- Intervalos de confianza para β con diversos niveles de confianza especificados (1%, 5%, 10%).

El número de parámetros del modelo para el cual se calcula la matriz de covarianza y los intervalos de confianza es comúnmente el número de parámetros totales para el modelo, pero este número puede restringirse, en caso de tener parámetros de diseño y parámetros de modelo.

1.4.3 Estimación de parámetros

Partiendo de la información experimental dada e introducida al software, tiempos de observación y valores de solución, se calculan los estimadores mediante el criterio de minimización de la suma de errores al cuadrado (mínimos cuadrados ordinarios). Por otra parte, el algoritmo de estimación paramétrica provee además los intervalos de confianza para cada uno de los parámetros.

Una vez computado el ajuste de mínimos cuadrados para determinar los valores óptimos de los parámetros y partiendo del modelo de estimación de parámetros y los datos correspondientes, se evalúa qué tan significativos son cada uno de los parámetros iniciales dentro de la dinámica del modelo. Una vez identificados, se toma el parámetro más significativo y se estima de nueva cuenta, hasta determinar completamente valores óptimos que conformen $\hat{\beta}$.

1.4.4 Diseño Óptimo Experimental

El diseño experimental ayuda a determinar los tiempos óptimos de observación para identificar la dinámica de un fenómeno. El algoritmo computacional identifica los valores óptimos del tiempo para conducir nuestro experimento.

Asignando un factor de ponderación inicial a cada uno de los tiempos experimentales propuestos dentro del intervalo de tiempo; el software permite, utilizando derivadas parciales de nuestra función objetivo (calculada a partir de la matriz de covarianzas de los parámetros), reemplazar los valores iniciales para el factor de ponderación (pesos) por valores estimados de dichos pesos, los cuales permiten jerarquizar e identificar los tiempos verdaderamente importantes para conducir el experimento.

2. Modelo Presa-Depredador

Pocos son los fenómenos descritos completamente sólo con un número. Tomando como ejemplo el tamaño de una población de conejos; la magnitud del tamaño de la población se expresa por un solo número, pero lo que este número no está considerando, son aspectos importantes para la población, como lo es, por ejemplo, la tasa de crecimiento de dicha población.

Para poder describir la tasa de crecimiento de la población, no sólo se piensa en cuántos conejos se tienen, también se debe pensar en otras variables que afectan el “cómo” y el “de qué forma” crece la población; por ejemplo, el clima, la alimentación, la temperatura y quizás una de las más importantes, la población de depredadores.

Según esto, para poder estudiar el crecimiento de la población de conejos, se debe proponer un modelo que se ajuste a estas variables que se quieren incluir.

Como modelo de partida, se toman solamente dos variables; la población de conejos y la población de depredadores, en este caso zorros. Dentro de dicho modelo, ya elegidas las variables a modelarse, tenemos variables que caen en tres categorías básicas; variables independientes, variables dependientes o de respuesta y parámetros.

En el contexto de fenómenos dinámicos, como variable independiente se tiene al tiempo; mientras que las variables respuesta son las poblaciones de conejos y zorros. Se estudiará la población de ambos conejos y zorros en cierto lapso, y se observará su comportamiento con el paso del tiempo, para ambas poblaciones.

Los parámetros son cantidades que no varían con el paso del tiempo (o cualquiera que sea la variable independiente) pero que pueden ser estimadas según sea necesario para el modelo, por lo que determinar el comportamiento de las variables dependientes cuando se modifican los valores de los parámetros puede ser el aspecto más importante del estudio del modelo.

El modelo a considerar estará expresado en ecuaciones diferenciales, por lo que se espera encontrar derivadas de las variables respuesta en nuestras ecuaciones. Esto se entiende, ya que al estar buscando explicar la tasa de crecimiento, se contará con el concepto de derivada de una función para poder lograrlo.

Ecuaciones del modelo

Se denotará a la variable representativa de la población de conejos con la letra R , por su nombre en inglés “*rabbits*”, y a la variable representativa de la población de zorros con la letra F , por su nombre en inglés “*foxes*”.

Para formular el modelo en términos matemáticos, se describen ciertos parámetros, además de nuestras variables dependientes F y R y la variable independiente t , para explicar el comportamiento de las poblaciones de cada especie. Como primer caso se tiene el comportamiento de las especies en ausencia de interacción entre ambas; la población de

conejos crecerá de manera exponencial pues no corren el peligro de ser atacados por la población de zorros, mientras que la población de zorros se verá afectada por la falta de presas de las cuales alimentarse, por lo que en caso de no haber interacciones los zorros morirán.

De manera que contamos con los siguientes parámetros para explicar ambas condiciones:

α = Tasa de crecimiento de la población de la presa en ausencia de depredadores

γ = Tasa de mortalidad del depredador, causada por la ausencia de presas

(Al momento de ser formulado el modelo, suponemos que todos los parámetros serán siempre positivos).

La tasa de crecimiento de la población se denota usando la derivada de la variable dependiente, con respecto de la variable independiente, $\frac{dR}{dt}$ para la población de conejos y $\frac{dF}{dt}$ para la población de zorros. La proporcionalidad a la población se expresa como el producto de la constante de crecimiento y la variable de población. Para nuestro modelo,

$$\frac{dR}{dt} = \alpha R \quad (2.1)$$

$$\frac{dF}{dt} = -\gamma F$$

(El símbolo para la población de zorros es negativo, pues partimos del supuesto de que la población de zorros disminuirá al no tener presas de las cuales alimentarse).

Supuesto esto, se obtienen dos ecuaciones que permiten modelar el comportamiento de la población de ambas especies, pero dichas ecuaciones no explican completamente el modelo. Falta pues, considerar las situaciones en las que existen interacciones entre sujetos de ambas especies, tomando mayor consideración aquellas en las que el conejo es devorado por el zorro, así como el beneficio que recibe cada zorro por haber atrapado una presa.

De manera que, se cuenta con los parámetros para estas nuevas condiciones para las poblaciones:

β = Constante de proporcionalidad que mide el número de interacciones en las que el conejo es devorado

δ = Constante de proporcionalidad que mide el beneficio a la población de zorros por cada conejo devorado.

Ahora bien, la tasa a la cual los conejos son comidos es proporcional a la tasa a la cual los conejos y zorros interactúan, por lo que se requiere de un término que represente dicha interacción entre ambas poblaciones. Utilizando el producto de R por F , denotado por RF para representar dicha interacción, de forma que, RF crece/decrece si cualquiera F o R crecen/decrecen, o desaparece si $R=0$ o $F=0$. Es decir, cuando existe una mayor población

de una de las especies, la probabilidad de que haya una interacción aumenta, pero ésta se vuelve nula si alguna de las poblaciones desaparece.

De esta forma, $-\beta RF$ representa la interacción en la cual los conejos son comidos por cada interacción de las poblaciones y δRF representa la interacción en la cual la población de zorros reciben un beneficio por cada conejo comido; β y δ son valores no negativos.

Dadas estas suposiciones, se presentan las ecuaciones diferenciales que sirven para modelar el sistema:

$$\frac{dR}{dt} = \alpha R - \beta RF \quad (2.2)$$

$$\frac{dF}{dt} = -\gamma F + \delta RF$$

Se dice que este sistema está acoplado ya que ambas tasas de crecimiento dependen de las variables R y F simultáneamente.

Debido a que $\beta > 0$, el término $-\beta RF$ es “no positivo”, así que si el número de zorros aumenta, la tasa de crecimiento de la población de conejos decrece. De la misma manera, como $\delta > 0$, el término δRF es “no negativo”, por lo que si el número de conejos crece, la tasa de crecimiento de la población de zorros también crecerá.

De manera que, considerando las condicionantes para el comportamiento de las poblaciones de ambas especies, los supuestos para el modelo son:

- i. Si no hay zorros en el entorno, los conejos se reproducirán a una tasa proporcional al tamaño de su población. No se ven afectados por la sobrepoblación.
- ii. Los zorros devoran a los conejos, y la tasa a la que los conejos son comidos es proporcional a la tasa a la cual los zorros y conejos interactúan.
- iii. Sin conejos que puedan ser comidos, la población de zorros decrece a una tasa proporcional a sí misma.
- iv. La tasa a la cual los zorros nacen es proporcional al número de conejos comidos por zorros, la cual es proporcional a la tasa en la que ambas poblaciones interactúan.

2.1 Modelo Presa-Depredador: el Desarrollo

Ya que se trata de un sistema acoplado, no se puede determinar la solución de una ecuación por separado de la otra, sino que deben ser resueltas simultáneamente.

Para facilitar el análisis, se asignan valores a los parámetros ya definidos, en este caso $\alpha = 2$, $\beta = 1.2$, $\gamma = 1$, $\delta = 0.9$. Los valores de los coeficientes dependen de las especies a estudiarse, en este caso se determinaron estos valores estrictamente como caso de estudio.

De esta forma el modelo queda

$$\frac{dR}{dt} = 2R - 1.2RF \quad (2.3)$$

$$\frac{dF}{dt} = -F + 0.9RF$$

Una interpretación rápida del sistema; el término $2R$ representa un crecimiento exponencial de la población de conejos en la ausencia de depredadores, mientras que el término $-1.2RF$ corresponde al efecto negativo en la población de conejos causada por una interacción con la población de depredadores. De la misma forma, el término $-F$ corresponde al supuesto de que la población de zorros desaparece en la ausencia de presas para devorar, mientras que el término $0.9RF$ corresponde al efecto positivo en la población causado por una interacción con la población de presas.

Como se mencionó anteriormente, la presencia del término RF vuelve a este sistema difícil de resolver. Es imposible encontrar explícitamente fórmulas para las soluciones, pero se pueden considerar ciertas condiciones iniciales que nos permitan proporcionar soluciones simples.

Un ejemplo, si $R = 0$, $F = 0$, ambas tasas de crecimiento de las poblaciones se vuelven cero. Luego $R(t) = 0$ y $F(t) = 0$ se vuelven soluciones al sistema. Llamaremos a este par de funciones, $R(t) = 0$ y $F(t) = 0$, soluciones de equilibrio al sistema. Dichas soluciones tienen sentido; si ambas poblaciones desaparecen, no se espera que alguna de las poblaciones crezca.

Ya que el término RF está involucrado en ambas ecuaciones, se presenta la necesidad de dos valores R_0 y F_0 para determinar la forma en la cual ambas poblaciones evolucionan con el tiempo. En otras palabras, una condición inicial para determinar una solución para este sistema es el par de números R_0 y F_0 , los cuales se utilizan para determinar los valores iniciales de dR/dt y dF/dt .

Estas condiciones proporcionan una solución del sistema, la cual consiste en dos funciones $F(t)$ y $R(t)$ que satisfacen el sistema de ecuaciones.

Asignando valores, $R_0 = 1$, $F_0 = 0.5$, se implementa un método numérico, mediante el software estadístico R, para aproximar valores para las soluciones $R(t)$ y $F(t)$, en 31 unidades de tiempo para cada una de las poblaciones.

A continuación se presentan los valores aproximados para las funciones $R(t)$ y $F(t)$ asumiendo los valores de los parámetros y las condiciones iniciales comentadas.

Valores aproximados para la solución de sistema

Tiempo	R (t)	F (t)
0	1	0.5
1	3.3416312	1.1793721
2	0.7544858	3.8524751
3	0.1773426	1.9047852
4	0.2780913	0.8404385
5	0.9707065	0.5012133
6	3.2982467	1.1305887
7	0.7980068	3.87721
8	0.1785067	1.9390883
9	0.2723441	0.853989
10	0.9423043	0.5027032
11	3.2515362	1.0847636
12	0.8445208	3.8987653
13	0.1798332	1.9739553
14	0.2668093	0.8678453
15	0.9147788	0.5044657
16	3.2018752	1.0417663
17	0.8941746	3.9168349
18	0.1813322	2.0093815
19	0.2614877	0.8820124
20	0.8881272	0.5065016
21	3.1496514	1.0014955
22	0.9471057	3.9310774
23	0.1830118	2.045345
24	0.2563668	0.8964899
25	0.8623078	0.5087939
26	3.0952539	0.9637697
27	1.0034494	3.9412911
28	0.1848727	2.0818728
29	0.2514399	0.9112844
30	0.8372974	0.5113425

Tabla 2.1 Valores experimentales, soluciones a las ecuaciones del modelo

2.2 Simulación y Estimación de Parámetros

Utilizando la rutina de Simulación del software Easy-Fit, se aproxima una solución a cada una de las ecuaciones de nuestro modelo y se comparan con las mediciones iniciales que fueron introducidas al programa como información experimental.

Posterior al proceso de simulación, se cuenta con las gráficas que ilustran el comportamiento de ambas poblaciones en un intervalo de 30 unidades de tiempo, tomando los valores iniciales para β .

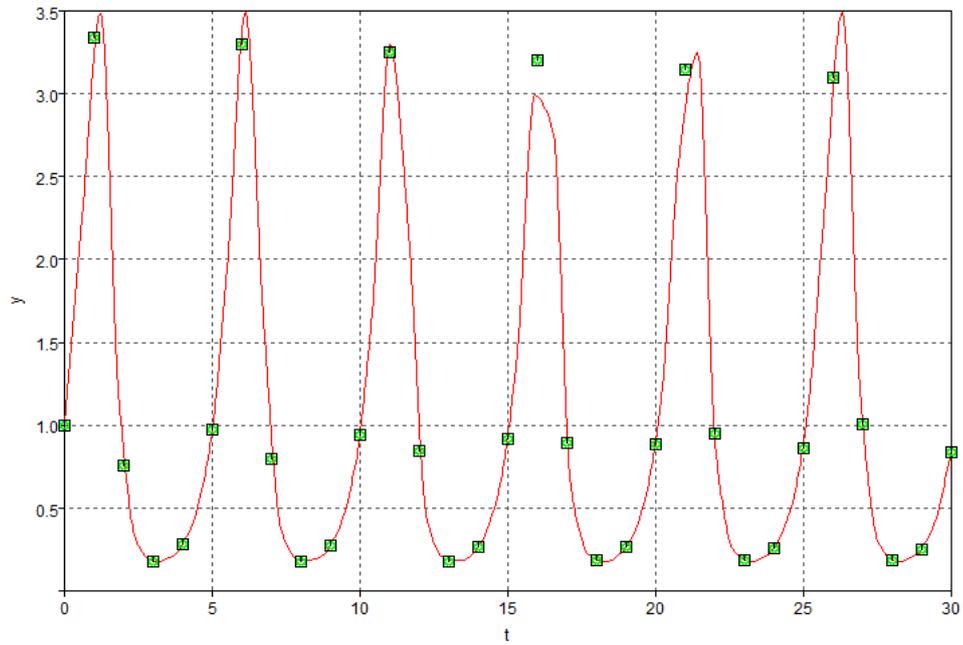


Figura 2.1 Población de conejos, tomando los valores iniciales para α y β

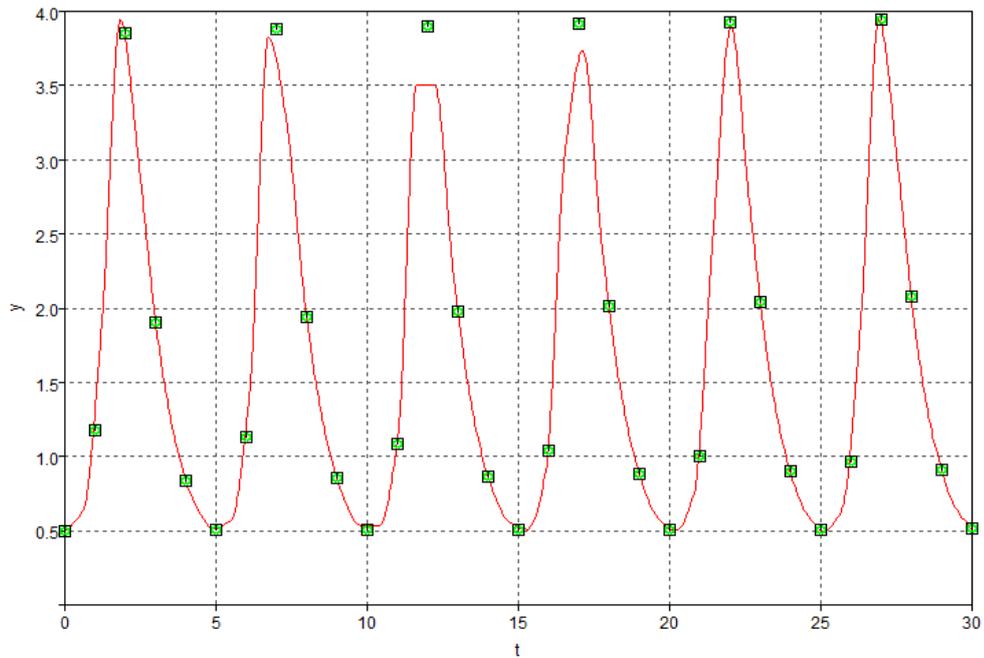


Figura 2.2 Población de zorros, tomando los valores iniciales para γ y δ

En cada gráfica se pueden observar dos elementos; los puntos verdes indican los valores calculados previamente (Tabla 2.1), que fueron introducidos al software como valores propuestos de solución al modelo presa-depredador, mientras que la gráfica en rojo representa la solución estimada por el software Easy-Fit, para cada unidad de tiempo considerada en el estudio de este sistema dinámico.

Se aprecia que la dinámica del modelo presenta un comportamiento cíclico; como se puede observar, cada cinco unidades de tiempo se presenta una subida y un descenso en cada una de las poblaciones. La población de conejos presenta una tendencia cíclica alrededor del

valor de una unidad poblacional, mientras que la población de zorros mantiene una tendencia alrededor de dos unidades poblacionales.

Una vez observadas las gráficas poblacionales, utilizando de nuevo el software Easy-Fit, se realiza una estimación para los valores de los parámetros, y se obtienen los valores para $\hat{\beta}$.

Estimated Params	StdDev	Confidence Intervals < 5 %>	
2.000000	0.2131106E-04	1.999957	2.000043
1.200000	0.1494103E-04	1.199970	1.200030
1.000000	0.8903400E-05	0.9999822	1.000018
0.900000	0.1012977E-04	0.8999797	0.9000203

Como se puede observar, el software recuperó adecuadamente los valores reales del sistema tanto desde el punto de vista de estimación puntual como mediante los intervalos de confianza respectivos. Esto muestra la eficiencia del software en la tarea de estimación de parámetros.

Partiendo del modelo de estimación de parámetros, y utilizando la matriz de correlaciones de los parámetros estimados, se busca identificar si el modelo cuenta con parámetros redundantes, que no aportan mayor información al modelo. Se presenta un procedimiento para descubrir los niveles de significancia de los parámetros del modelo y posteriormente eliminar los redundantes.

Se obtiene la matriz de correlación una vez estimados los parámetros del modelo

Correlation Matrix:

names	numbers	value
alp - bet	1 - 2	0,91520
alp - gamma	1 - 3	-0,98510
alp - delta	1 - 4	-0,57220
bet - gamma	2 - 3	-0,95910
bet - delta	2 - 4	-0,64730
gamma - delta	3 - 4	0,56820

Figura 2.3 Matriz de correlaciones para los parámetros del modelo presa depredador

Se observa que existen correlaciones muy grandes para ciertos pares de parámetros, en especial “ α - $\beta = 0.91529$ ”, “ α - $\gamma = -0.98510$ ” y “ β - $\gamma = -0.95910$ ”. Según estas tres correlaciones determinadas altas, y lo que representan cada uno de los parámetros, se pueden realizar observaciones iniciales acerca del comportamiento del modelo.

La tasa de crecimiento de la población de conejos (α), depende directamente del número de interacciones en las que el conejo es devorado (β), esto es, entre más interacciones haya en las que el conejo sobreviva, la población de presas crecerá.

La tasa de mortalidad del depredador (γ) es inversamente proporcional a la tasa de crecimiento de presas (α), de forma que mientras menos presas haya para devorar, la tasa en la que los zorros mueren será mayor.

Por último, la tasa de mortalidad del depredador (γ) es inversamente proporcional al número de interacciones en las que el conejo es devorado (β), esto se cumple siguiendo la misma lógica de la correlación anterior; mientras menos conejos sobrevivan en los encuentros con los zorros, la tasa de mortalidad de estos depredadores se disparará.

Estas correlaciones con valores tan significativos, nos hacen pensar en la existencia de parámetros del modelo que son redundantes, por lo que es necesario realizar el análisis de significancia de los parámetros.

Por otra parte, se muestra la matriz de covarianzas de los parámetros

Covariance Matrix:

names	numbers	value
alp - alp	1 - 1	4,54E-10
bet - alp	2 - 1	2,91E-10
bet - bet	2 - 2	2,23E-10
gamma - alp	3 - 1	-1,87E-10
gamma - bet	3 - 2	-1,28E-10
gamma - gamma	3 - 3	7,93E-11
delta - alp	4 - 1	-1,24E-10
delta - bet	4 - 2	-9,80E-11
delta - gamma	4 - 3	5,13E-11
delta - delta	4 - 4	1,03E-10

Figura 2.4 Matriz de covarianzas para los parámetros del modelo presa depredador

Para entender el proceso que realiza el software al realizar este análisis de significancia, se toma como punto de partida la matriz de información de Fisher obtenida a partir de los valores de los parámetros.

De acuerdo con el Teorema de Cramer y Rao, puede tomarse una función de la inversa de la matriz de información de Fisher como una cota inferior para la matriz de covarianzas para el estimador de los parámetros.

De esta forma, se toma la norma L_2 para la inversa de la matriz de información.

$$\|(\hat{I}_F^{-1})\|_2^2 = |\lambda_{max}(\hat{I}_F)^{-1}| = \frac{1}{|\lambda_{min}(\hat{I}_F)|} \quad (2.4)$$

Donde λ_{max} y λ_{min} representan el eigenvalor más grande de la matriz y el eigenvalor más pequeño de la matriz respectivamente. Se busca reducir el tamaño de la matriz de covarianzas para los parámetros del modelo, eliminando los parámetros que corresponden a

los eigenvectores con coeficientes grandes de la matriz correspondiente \hat{I}_F . El orden en el que los parámetros son eliminados de \hat{I}_F^{-1} puede tomarse como un indicador acerca de su nivel de significancia, al último parámetro en ser eliminado de \hat{I}_F^{-1} se le asigna la más alta prioridad en el modelo (Schittkowski [10]).

Este orden nos ayuda a determinar qué parámetros de $\hat{\beta}$ pueden ser eliminados o si se necesitan datos experimentales adicionales.

Los valores de la matriz de covarianza se toman, y según sus eigenvalores y eigenvectores calculados, son jerarquizados y eliminados de la inversa de la matriz de información de Fisher.

Como se observó en la matriz de covarianzas, los valores para cada una de las covarianzas son muy pequeños; al entrar a la rutina de estimación de parámetros se genera eigenvalores para la matriz información de Fisher muy pequeños (Figura 2.4), lo que vuelve difícil computar eigenvectores que permitan jerarquizar la importancia de los valores de los parámetros para el modelo.

De forma que los valores de los parámetros obtenidos inicialmente por la rutina de estimación de parámetros $\alpha = 2$, $\beta = 1.2$, $\gamma = 1$, $\delta = 0.9$, no se consideran redundantes para el modelo.

De tal manera, se pueden observar las gráficas poblacionales con los valores de $\hat{\beta}$.

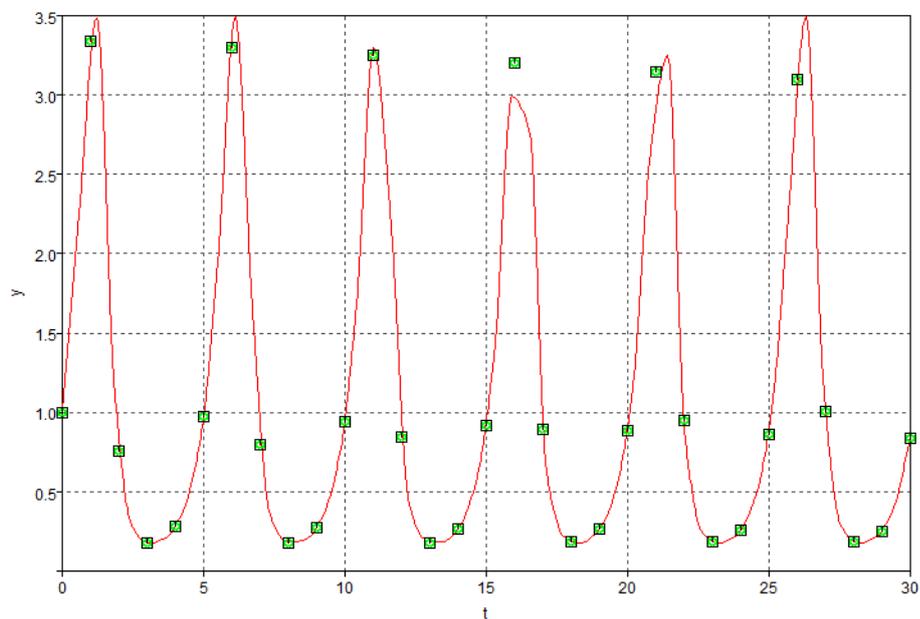


Figura 2.5 Población de conejos, tomando los valores óptimos de α y β

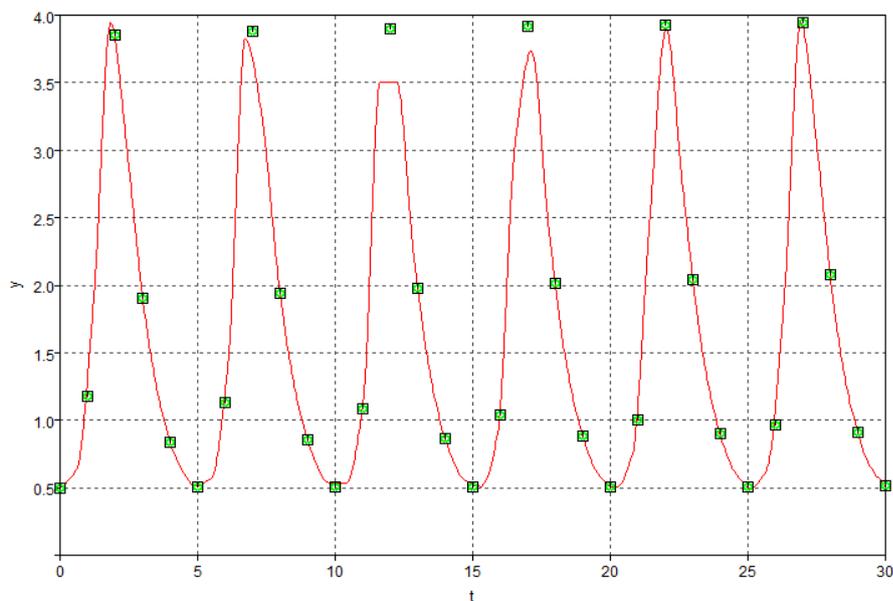


Figura 2.6 Población de zorros, tomando los valores óptimos de γ y δ

2.3 Diseño óptimo de los tiempos de observación en el tiempo

Hasta ahora se ha considerado un conjunto de datos experimentales y se han tratado de calcular los parámetros del modelo vía ajuste de mínimos cuadrados. Sin embargo, el diseño inicial, es decir, en qué puntos es mejor observar la dinámica del modelo, puede no ser el mejor.

Distintos criterios pueden ser aplicados a nuestra matriz de covarianza, por lo que se contará con el software Easy-Fit para poder desarrollar el diseño óptimo. Este software utiliza el criterio A-óptimo, que minimiza la suma de las varianzas de los parámetros estimados (la traza de la matriz de varianzas y covarianzas).

Para ubicar los tiempos de observación óptimos se agregan pesos a una malla de valores (tiempos) sugerida inicialmente; el objetivo es reestimar los pesos para determinar cuáles de ellos son relevantes para nuestro experimento.

Valores Experimentales para el Diseño				
Tiempo	R (t)	Factor de Peso	F (t)	Factor de Peso
0	1	1	0.5	1
1	3.3416312	1	1.1793721	1
2	0.7544858	1	3.8524751	1
3	0.1773426	1	1.9047852	1
4	0.2780913	1	0.8404385	1
5	0.9707065	1	0.5012133	1
6	3.2982467	1	1.1305887	1
7	0.7980068	1	3.87721	1
8	0.1785067	1	1.9390883	1
9	0.2723441	1	0.853989	1
10	0.9423043	1	0.5027032	1

Valores Experimentales para el Diseño				
Tiempo	R (t)	Factor de Peso	F (t)	Factor de Peso
11	3.2515362	1	1.0847636	1
12	0.8445208	1	3.8987653	1
13	0.1798332	1	1.9739553	1
14	0.2668093	1	0.8678453	1
15	0.9147788	1	0.5044657	1
16	3.2018752	1	1.0417663	1
17	0.8941746	1	3.9168349	1
18	0.1813322	1	2.0093815	1
19	0.2614877	1	0.8820124	1
20	0.8881272	1	0.5065016	1
21	3.1496514	1	1.0014955	1
22	0.9471057	1	3.9310774	1
23	0.1830118	1	2.045345	1
24	0.2563668	1	0.8964899	1
25	0.8623078	1	0.5087939	1
26	3.0952539	1	0.9637697	1
27	1.0034494	1	3.9412911	1
28	0.1848727	1	2.0818728	1
29	0.2514399	1	0.9112844	1
30	0.8372974	1	0.5113425	1

Tabla 2.2 Valores experimentales, con factor de peso igual a 1

Se asigna un peso igual a uno para cada punto de diseño experimental inicial, esto para que el programa reconozca a este punto de diseño como disponible dentro del experimento. Como paso inicial, es importante asignar como valor inicial al uno, pues al reconocer el programa al punto de diseño como disponible, una vez calculado el peso óptimo para cada punto, este se multiplicará por el valor especificado como valor inicial, por lo que si el valor inicial es distinto a uno, el factor de peso obtenido no será el correcto.

Se utilizó la rutina de Diseño de Experimentos del software Easy-Fit para calcular la función objetivo y los pesos para el diseño óptimo.

La función objetivo, o sea la traza de la matriz de covarianzas, está dada por

$$F(X) = 0.023779879$$

De entre los 62 puntos que conforman inicialmente el diseño, el software discriminará un máximo de N puntos de diseño significativos, donde N es el número de parámetros de diseño definidos en el modelo. N=4 en el caso del modelo presa – depredador ya comentado.

Mientras que los pesos obtenidos por la rutina de Diseño óptimo, que son las derivadas parciales de la función objetivo en cada punto de Diseño, son:

Valores Experimentales para el Diseño				
Tiempo	R (t)	Factor de Peso	F (t)	Factor de Peso
0	1	0.0000161	0.5	0.0000161
1	3.3416312	0.343	1.1793721	0.199
2	0.7544858	0.0000161	3.8524751	0.0000161
3	0.1773426	0.0000161	1.9047852	0.0000161
4	0.2780913	0.0000161	0.8404385	0.0000161
5	0.9707065	0.0000161	0.5012133	0.0000161
6	3.2982467	0.0000161	1.1305887	0.0000161
7	0.7980068	0.0000161	3.87721	0.0000161
8	0.1785067	0.0000161	1.9390883	0.0000161
9	0.2723441	0.0000161	0.853989	0.0000161
10	0.9423043	0.0000161	0.5027032	0.0000161
11	3.2515362	0.0000161	1.0847636	0.0000161
12	0.8445208	0.2	3.8987653	0.0000161
13	0.1798332	0.0000161	1.9739553	0.0000161
14	0.2668093	0.0000161	0.8678453	0.0000161
15	0.9147788	0.0000161	0.5044657	0.0000161
16	3.2018752	0.0000161	1.0417663	0.0000161
17	0.8941746	0.0000161	3.9168349	0.0000161
18	0.1813322	0.0000161	2.0093815	0.0000161
19	0.2614877	0.0000161	0.8820124	0.0000161
20	0.8881272	0.0000161	0.5065016	0.0000161
21	3.1496514	0.0000161	1.0014955	0.0000161
22	0.9471057	0.0000161	3.9310774	0.0000161
23	0.1830118	0.0000161	2.045345	0.0000161
24	0.2563668	0.0000161	0.8964899	0.0000161
25	0.8623078	0.0000161	0.5087939	0.0000161
26	3.0952539	0.0000161	0.9637697	0.0000161
27	1.0034494	0.0000161	3.9412911	0.256
28	0.1848727	0.0000161	2.0818728	0.0000161
29	0.2514399	0.0000161	0.9112844	0.0000161
30	0.8372974	0.0000161	0.5113425	0.0000161

Tabla 2.3 Valores experimentales, con los pesos encontrados para cada punto de diseño

El software reconoce como puntos de diseño significativos, para la población de conejos a los tiempos 1 y 12, mientras que para la población de zorros reconoce a los tiempos 1 y 27.

2.4 Observaciones y Hallazgos

Para nuestro modelo presa-depredador, representado por las especies de conejos y zorros, se definieron cuatro parámetros fundamentales ($N=4$) para modelar los posibles escenarios de interacción entre ambas especies.

Después de asignar un valor arbitrario a los parámetros, $\alpha = 2$, $\beta = 1.2$, $\gamma = 1$, $\delta = 0.9$, con la ayuda de valores iniciales $R(0) = 1$, $F(0) = 0.5$ y utilizando el software Easy-Fit, se pueden obtener los valores estimados de los parámetros del modelo $\hat{\beta}$.

Dichos valores estimados, son $\alpha = 2$, $\beta = 1.2$, $\gamma = 2$, $\delta = 0.9$. Los parámetros son identificados según su significancia dentro del modelo. El software no reconoció a ninguno de los parámetros como más importante dentro del modelo.

Los cuatro tiempos de observación de diseño determinados como de mayor peso para poder describir las dinámicas de estas poblaciones se muestran en la Tabla 2.4. Estos pierden la dinámica real operante; debido a que los valores experimentales no contienen error, no es necesario replicar el experimento.

Valores Experimentales para el Diseño				
Tiempo	R (t)	Factor de Peso	F (t)	Factor de Peso
0	1	0.0000161	0.5	0.0000161
1	3.3416312	0.343	1.1793721	0.199
12	0.8445208	0.2	3.8987653	0.0000161
27	1.0034494	0.0000161	3.9412911	0.256

Tabla 2.4 Valores iniciales y puntos de diseño con factor de peso significativo.

El problema está en que entre cada una de las oscilaciones recuperadas con los puntos de diseño, se pierde una gran cantidad de información, por lo que los puntos de diseño tomados, no son suficientes para modelar la dinámica completa de la naturaleza del modelo de estudio (Figuras 2.7 y 2.8).

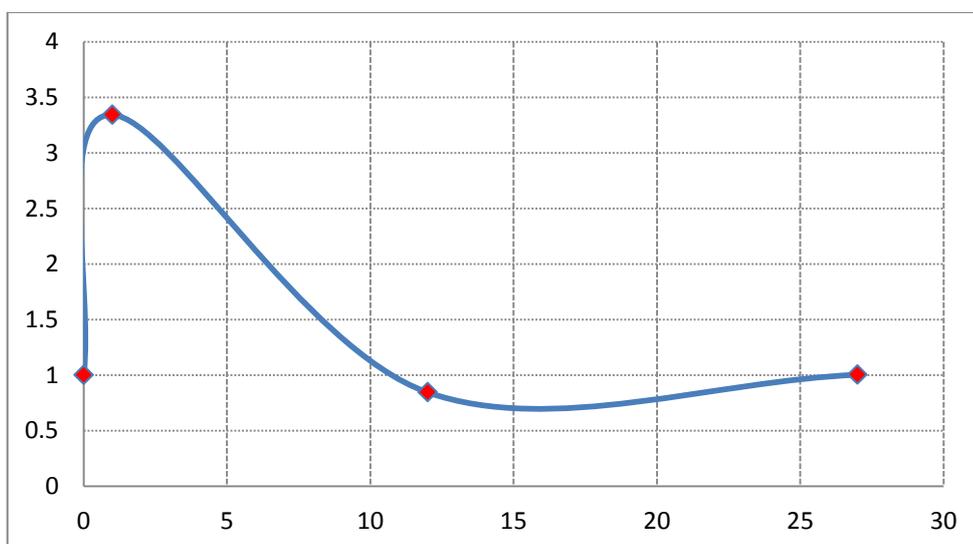


Figura 2.7 Puntos de diseño significativos para la población de conejos

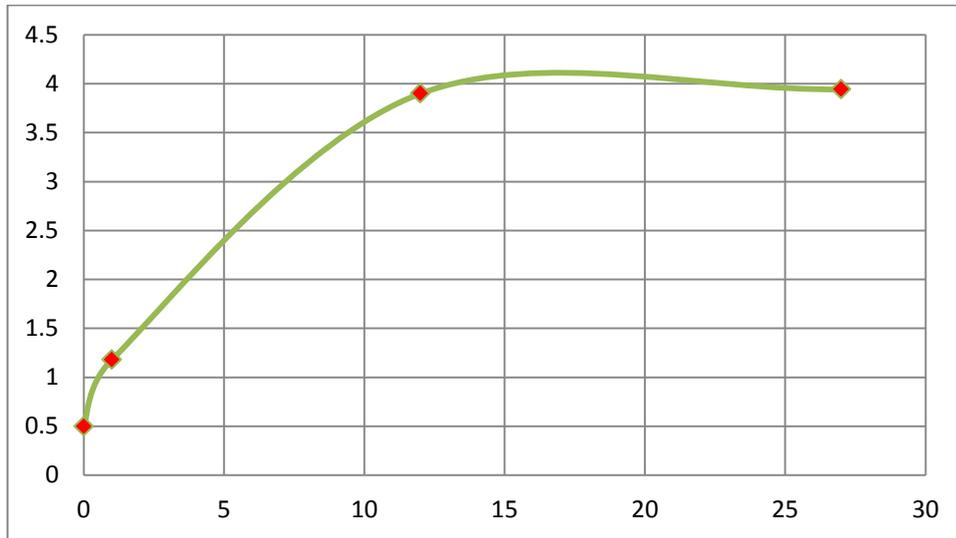


Figura 2.8 Puntos de diseño significativos para la población de zorros

Dicho problema, la falta de ajuste y la pérdida de información, se debe principalmente a la dinámica del modelo, es decir, al comportamiento cíclico por cada cinco unidades de tiempo. Es importante notar que el diseño óptimo de experimentos sólo garantiza un mínimo de observaciones que deberá ser complementada por el investigador según los recursos y objetivos concretos.

Es importante notar, que se tomaron valores arbitrarios para los parámetros iniciales del modelo, siendo estos: $\alpha = 2$, $\beta = 1.2$, $\gamma = 1$, $\delta = 0.9$.

Se puede analizar el mismo problema con diferentes valores para los parámetros, ya sea para valores mayores, como para valores menores a los propuestos como primer caso de estudio.

Sean por ejemplo $\alpha = 2.8$, $\beta = 2.1$, $\gamma = 1.7$, $\delta = 1.2$. Con la ayuda del software Easy-Fit, se estiman los valores para $\hat{\beta}$

Estimated Params	StdDev	Confidence Intervals < 5 %>	
2.800042	0.7962530E-05	2.800026	2.800058
2.100023	0.7843981E-05	2.100007	2.100039
1.699967	0.4586691E-05	1.699957	1.699976
1.199979	0.3050674E-05	1.199973	1.199985

Se puede apreciar que los valores iniciales varían, aunque la diferencia es muy pequeña. Se puede aplicar el diseño óptimo para obtener los puntos de diseño importantes para este nuevo modelo presa-depredador.

Se obtiene la función objetivo; $F(X) = 0.033058625$, así como los puntos de diseño.

Valores Experimentales para el Diseño				
Tiempo	R (t)	Factor de Peso	F (t)	Factor de Peso
0	1	0.0000161	0.5	0.0000161
6	0.6469552	0.161	0.6063517	0.0000161
17	1.6839955	0.0000161	2.8531555	0.187
24	0.3609732	0.145	1.5416315	0.0000161
26	3.6563156	0.183	1.4648025	0.0000161
29	3.5563482	0.0000161	1.0302045	0.322

Observando la gráfica, se puede comprobar que de nuevo el comportamiento cíclico del modelo presa depredador, a pesar de que fueron modificados los parámetros iniciales, dificulta la obtención de puntos de diseño que modelen de manera completa la dinámica de las poblaciones tanto de conejos como de zorros (Figuras 2.9 y 2.10)

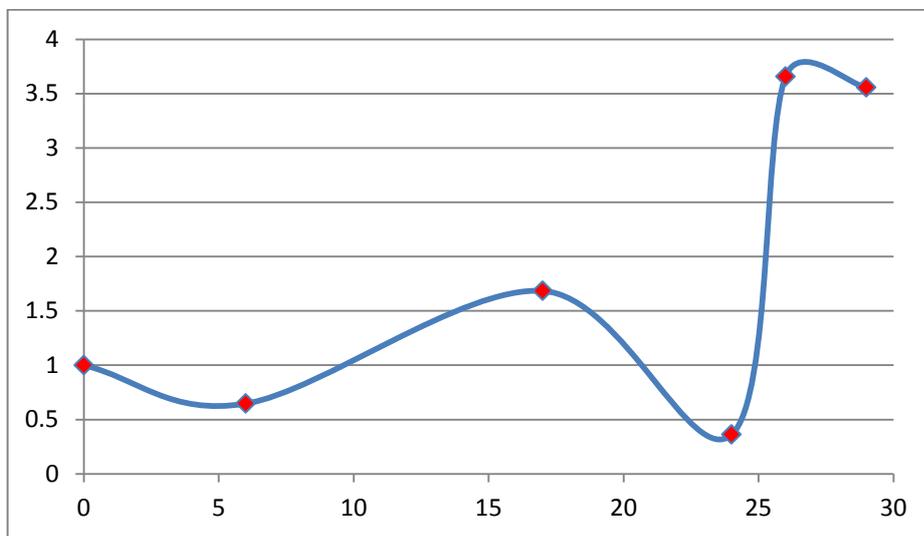


Figura 2.9 Puntos de diseño significativos para la población de conejos con parámetros iniciales $\alpha = 2.8$, $\beta = 2.1$

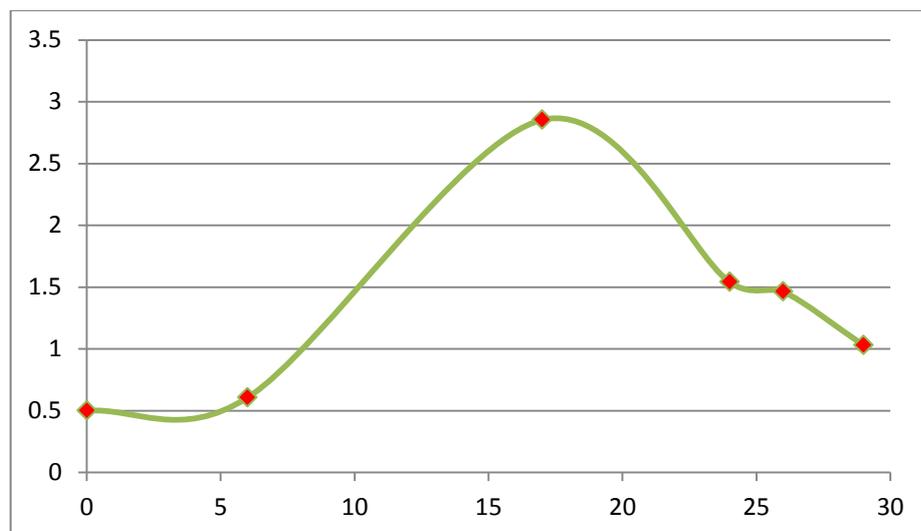


Figura 2.10 Puntos de diseño significativos para la población de zorros con parámetros iniciales $\gamma = 1.7$, $\delta = 1.2$

De la misma manera, supóngase valores menores para β de los propuestos inicialmente, póngase por caso $\alpha = 1.4$, $\beta = 0.8$, $\gamma = 0.5$, $\delta = 0.4$ como parámetros iniciales para el modelo, y con la ayuda del software Easy-Fit, se estiman los valores para $\hat{\beta}$

Estimated Params	StdDev	Confidence Intervals < 5 %>	
1.400000	0.3548197E-05	1.399993	1.400007
0.800000	0.2629923E-05	0.7999947	0.8000053
0.500000	0.1007883E-05	0.4999980	0.5000020
0.400000	0.9256443E-06	0.3999981	0.4000019

Donde se aprecia que los valores estimados para los parámetros se mantienen iguales a los valores iniciales, de manera que $\beta = \hat{\beta}$.

Supuesto esto, se puede aplicar el diseño óptimo para determinar la función objetivo y con ella, los puntos de diseño más importantes para este modelo.

De forma que, la función objetivo calculada $0.30880044 \times 10^{-10}$ nos permite calcular los puntos de diseño significativos

Valores Experimentales para el Diseño				
Tiempo	R (t)	Factor de Peso	F (t)	Factor de Peso
0	1	0.0000161	0.5	0.0000161
2	4.8609743	0.0000161	1.7702517	0.279
18	1.3397861	0.337	0.4948764	0.0000161
20	4.3873697	0.234	2.6470094	0.0000161
27	1.5505669	0.149	0.5004708	0.0000161

Se puede observar que, a pesar de que las gráficas que representan los puntos de diseño significativos (Figuras 2.11 y 2.12) si presentan un par de ciclos, no alcanzan a modelar el comportamiento total del modelo, existe una perdida inminente de información.

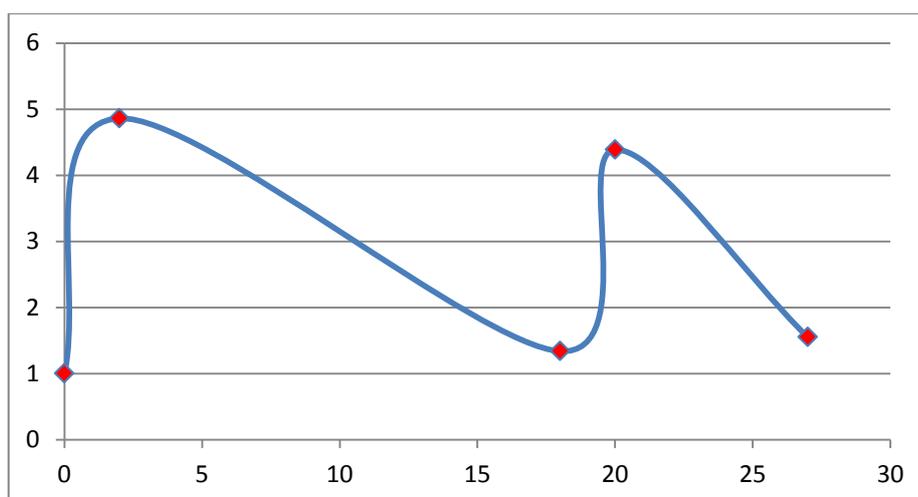


Figura 2.11 Puntos de diseño significativos para la población de conejos con parámetros iniciales $\alpha = 1.4$, $\beta = 0.8$

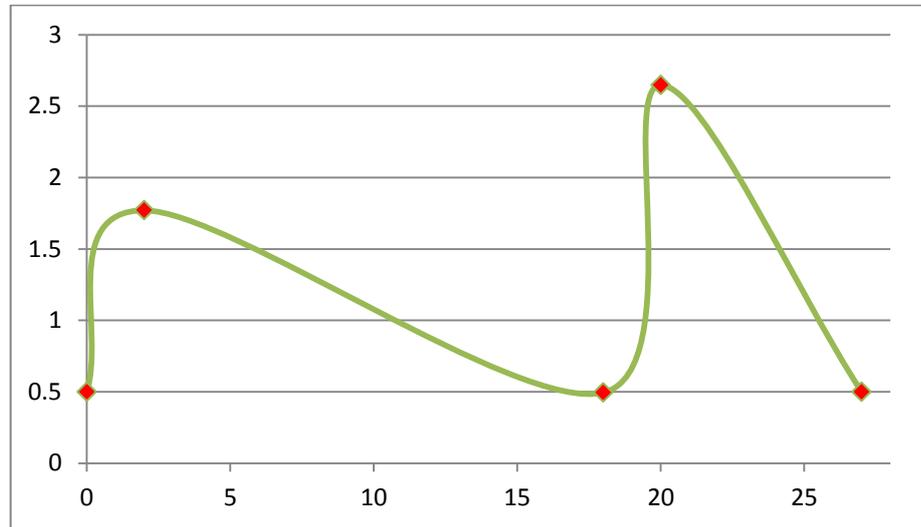


Figura 2.12 Puntos de diseño significativos para la población de zorros con parámetros iniciales $\gamma = 0.5$, $\delta = 0.4$

De esta manera, se puede pensar que sin importar los valores de los parámetros iniciales, el criterio A-óptimo, utilizado para el diseño óptimo dentro del software Easy-Fit, no resulta suficiente para modelar de manera satisfactoria el comportamiento de las poblaciones de conejos y zorros que interactúan según los supuestos de un modelo con comportamiento cíclico, como lo es el modelo presa-depredador.

3. Modelo Presa-Depredador Corregido

Ahora se considerará una modificación al modelo Presa-Depredador; suponiendo que en ausencia de depredadores ($F=0$), la población de presas sigue un crecimiento logístico en vez de un crecimiento exponencial. Al tratarse de un modelo con crecimiento logístico, se dice que la población aumenta exponencialmente hasta el punto en que pierde su capacidad de crecimiento al volverse muy numerosa, lo que provoca que la población se estabilice, dando como resultado un estado de equilibrio.

3.1 Modelo Presa-Depredador Corregido: el Desarrollo

Al tomar en cuenta las variaciones en los supuestos para el modelo Presa-Depredador original, en lugar de tener una ecuación poblacional del tipo $\frac{dP(t)}{dt} = \alpha(P(t))$, se redefinirá la expresión anterior basándonos en el modelo de Verhulst (Bonilla y Zaragoza [11]):

$$\frac{dP}{dt} = \left[\alpha P \left(1 - \frac{P}{K} \right) \right] \quad (3.1)$$

Donde,

t = Tiempo (variable independiente)

P = Población (variable dependiente)

α = Coeficiente de la razón de crecimiento de la población (parámetro)

K = Capacidad de carga del sistema (límites territoriales y de recursos que tienen las poblaciones para seguir creciendo)

La solución analítica para este problema de valor inicial estará dada por

$$P(t) = \frac{K}{1 + e^{-\alpha(t-t_m)}}; \quad (3.2)$$

Donde el límite;

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(t) = K$$

Permite mostrar que mediante el modelo de crecimiento logístico se llega a una constante, esto es el estado de equilibrio.

Así, adaptando la ecuación del modelo original (2.2) para describir un crecimiento logístico para la población de presas, se obtiene;

$$\frac{dR}{dt} = \left[\alpha R \left(1 - \frac{R}{K} \right) \right] - \beta RF \quad (3.3)$$

$$\frac{dF}{dt} = -\gamma F + \delta RF$$

Con los mismos parámetros a considerar,

α = Tasa de crecimiento de la población de la presa en ausencia de depredadores
 β = Constante de proporcionalidad que mide el número de interacciones en las que el conejo es devorado

γ = Tasa de mortalidad del depredador, causada por la ausencia de presas

δ = Constante de proporcionalidad que mide el beneficio a la población de zorros por cada conejo devorado.

Para este modelo, al igual que con el modelo de crecimiento exponencial, se necesitan considerar ciertas condiciones iniciales para poder encontrar la solución al sistema. Para poder realizar una posterior comparación, se preservan los mismos valores para los parámetros a ser estimados, esto es $\alpha = 2$, $\beta = 1.2$, $\gamma = 1$, $\delta = 0.9$ y $K=2$, por lo que nuestras ecuaciones en 3.3 quedan;

$$\frac{dR}{dt} = \left[2R \left(1 - \frac{R}{2} \right) \right] - 1.2RF \quad (3.4)$$

$$\frac{dF}{dt} = -F + 0.9RF$$

Se deben de proponer valores para R_0 y F_0 como valores iniciales para nuestro problema, tomando $R_0 = 0.1$ y $F_0 = 0.5$. Por lo que, utilizando el software estadístico R, se obtiene una aproximación a la solución para el modelo con los valores propuestos para los parámetros α , β , δ , γ . Esta solución es usada para la comparación y el análisis usando el software para diseño óptimo de experimentos y la estimación de parámetros mediante Easy-Fit.

Valores aproximados para la solución de sistema

Tiempo	R (t)	F (t)
0	0.1	0.5
1	0.3979958	0.2232959
2	1.1291113	0.1601251
3	1.6208004	0.2122997
4	1.6440735	0.3470276
5	1.4913968	0.5266839
6	1.3092231	0.6823807
7	1.1721945	0.7630313
8	1.1026051	0.7775542
9	1.0848697	0.7632899
10	1.0922298	0.7472302
11	1.1041826	0.7387094
12	1.1116333	0.7369083
13	1.1138369	0.7382197
14	1.113202	0.7399085
15	1.1119534	0.7408773

Valores aproximados para la solución de sistema			
Tiempo	R (t)	F (t)	
16	1.1111236	0.7411285	
17	1.1108446	0.7410182	
18	1.1108851	0.7408441	
19	1.1110109	0.7407352	
20	1.1111024	0.7407019	
21	1.1111376	0.74071	
22	1.1111366	0.7407281	
23	1.1111234	0.740741	
24	1.1111122	0.7407458	
25	1.1111074	0.7407449	
26	1.1111077	0.7407424	
27	1.1111095	0.7407407	
28	1.111111	0.7407401	
29	1.1111116	0.7407401	
30	1.1111117	0.7407404	

Tabla 3.1 Valores experimentales, soluciones propuestas para las ecuaciones del modelo

3.2 Simulación y Estimación de Parámetros

Ya que se cuenta con los datos de la solución, se realizará un proceso de estimación, para comparar los valores de inicio con los valores estimados por el software.

Para cada uno de los parámetros iniciales de β , se obtiene un intervalo de confianza, al igual que la desviación estándar calculada para el valor de la solución simulada por el software comparado con los valores para la solución introducidos.

Estimated Params	StdDev	Confidence Intervals < 5 %>	
2.000000	0.2331123E-05	1.999995	2.000005
1.200000	0.1585668E-05	1.199997	1.200003
1.000000	0.3117295E-05	0.9999938	1.000006
0.900000	0.2719892E-05	0.8999946	0.9000054

Analizando los intervalos de confianza, se observa que ningún intervalo incluye al cero, de manera que todos los parámetros pueden ser considerados como significativos dentro del sistema. La desviación estándar obtenida para cada parámetro es muy pequeña, lo que nos habla de un buen ajuste en el comparativo entre la solución simulada y la solución propuesta. De igual forma los intervalos de confianza son muy reducidos, por lo que se puede pensar que los valores propuestos para cada parámetro son muy cercanos a ser los óptimos.

Obtenidos estos valores, se presentan las gráficas poblacionales obtenidas.

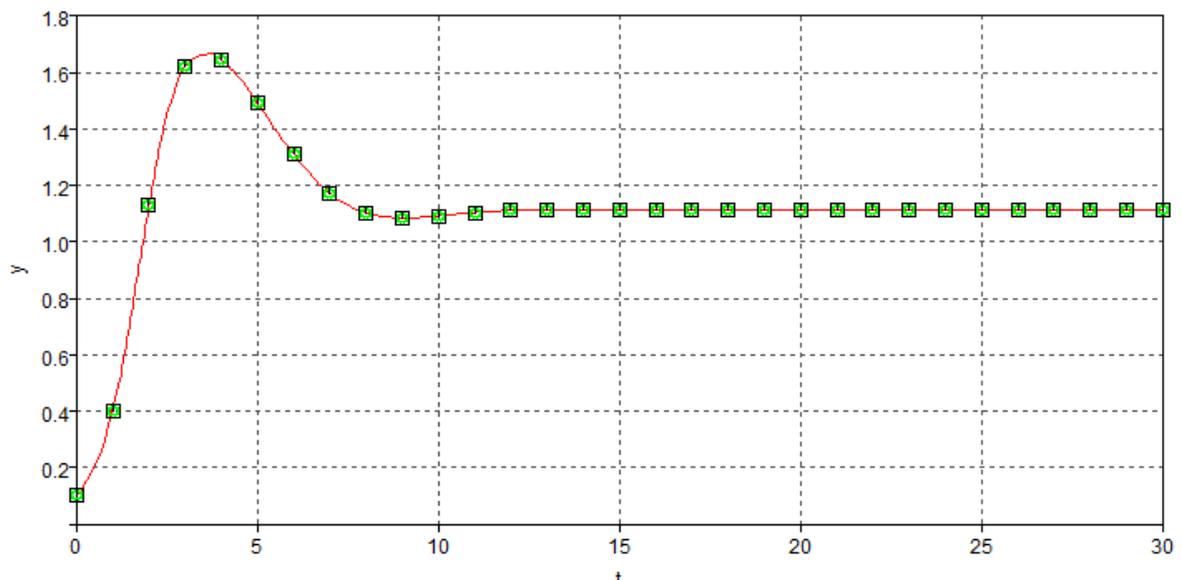


Figura 3.1 Población de conejos, tomando los valores iniciales para $\alpha=2$ y $\beta=1.2$

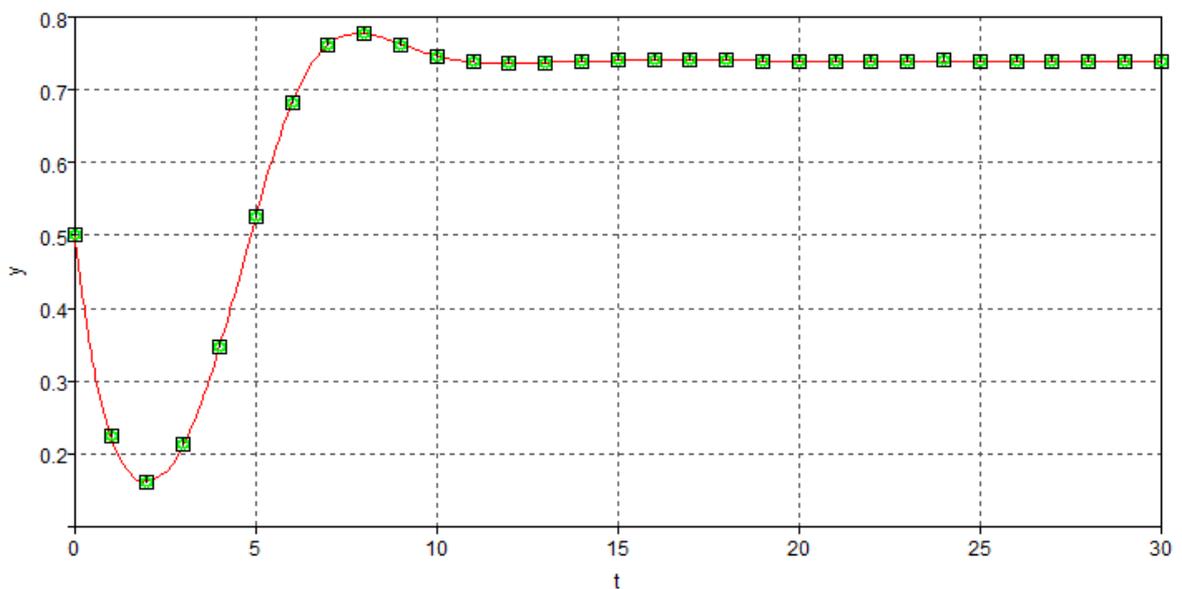


Figura 3.2 Población de Zorros, tomando los valores iniciales para $\gamma=1$ y $\delta=0.9$

Se puede apreciar que, en efecto, el ajuste entre la solución propuesta para el modelo (puntos verdes) y la solución simulada por el software Easy-Fit (línea roja) es casi perfecta.

Una vez observado esto, se realiza la estimación de parámetros

Estimated Params	StdDev	Confidence Intervals < 5 %>	
2.000000	0.2331123E-05	1.999995	2.000005
1.200000	0.1585668E-05	1.199997	1.200003
1.000000	0.3117295E-05	0.9999938	1.000006
0.9000000	0.2719892E-05	0.8999946	0.9000054

Se aprecia que los valores óptimos calculados por el software $\hat{\beta}$, se mantuvieron iguales a los valores propuestos introducidos al sistema β , confirmando la eficiencia del software respecto a la solución inicial, lo cual era de esperarse, puesto que los datos generados no contenían ruido.

Posteriormente se observa la matriz de correlaciones de los parámetros, para determinar la posible existencia de parámetros redundantes dentro del modelo.

Dichos valores para la matriz de correlación son:

Correlation Matrix:

names	numbers	value
alp - bet	1 - 2	0.86430
alp - gamma	1 - 3	-0.53300
alp - delta	1 - 4	-0.55790
bet - gamma	2 - 3	-0.52330
bet - delta	2 - 4	-0.51540
gamma - delta	3 - 4	0.99480

Figura 3.3 Matriz de correlaciones para los parámetros del modelo presa depredador corregido

Se puede apreciar que, al igual que con el modelo de crecimiento exponencial, este modelo corregido cuenta con valores altos para ciertas correlaciones, lo que nos hace pensar de nuevo en que el modelo podría incluir parámetros redundantes.

Por otro lado, se cuenta con los valores para la matriz de covarianzas,

Covariance Matrix:

names	numbers	value
alp - alp	1 - 1	5.43E-12
bet - alp	2 - 1	3.20E-12
bet - bet	2 - 2	2.51E-12
gamma - alp	3 - 1	-3.87E-12
gamma - bet	3 - 2	-2.59E-12
gamma - gamma	3 - 3	9.72E-12
delta - alp	4 - 1	-3.54E-12
delta - bet	4 - 2	-2.22E-12
delta - gamma	4 - 3	8.44E-12
delta - delta	4 - 4	7.40E-12

Figura 3.4 Matriz de covarianzas para los parámetros del modelo presa depredador corregido

Se observa que los valores para las covarianzas son muy pequeños (Figura 3.4), por lo cual no generan valores significativos para los eigenvectores de la inversa de la matriz de información de Fisher. De esta manera, no se pueden eliminar ninguno de los parámetros

para poder jerarquizar, así, todos los parámetros son considerados con la misma importancia para este modelo corregido.

Al ser $\beta = \hat{\beta}$, resulta innecesario comparar las gráficas poblacionales iniciales con las gráficas con los valores de $\hat{\beta}$. Lo cual, de nuevo, era de esperarse dado que los datos generados no contenían ruido.

3.3 Diseño óptimo de los tiempos de observación

Se procede ahora a localizar los puntos de diseño óptimos para el modelo presa-depredador corregido. Partiendo de los datos experimentales, se asignará un factor de peso igual a 1, para cada uno de los 62 puntos de diseño con los que contamos, divididos en las 31 unidades de tiempo para cada una de las poblaciones.

Valores aproximados para la solución de sistema				
Tiempo	R (t)	Factor de Peso	F (t)	Factor de Peso
0	0.1	1	0.5	1
1	0.3979958	1	0.2232959	1
2	1.1291113	1	0.1601251	1
3	1.6208004	1	0.2122997	1
4	1.6440735	1	0.3470276	1
5	1.4913968	1	0.5266839	1
6	1.3092231	1	0.6823807	1
7	1.1721945	1	0.7630313	1
8	1.1026051	1	0.7775542	1
9	1.0848697	1	0.7632899	1
10	1.0922298	1	0.7472302	1
11	1.1041826	1	0.7387094	1
12	1.1116333	1	0.7369083	1
13	1.1138369	1	0.7382197	1
14	1.113202	1	0.7399085	1
15	1.1119534	1	0.7408773	1
16	1.1111236	1	0.7411285	1
17	1.1108446	1	0.7410182	1
18	1.1108851	1	0.7408441	1
19	1.1110109	1	0.7407352	1
20	1.1111024	1	0.7407019	1
21	1.1111376	1	0.74071	1
22	1.1111366	1	0.7407281	1
23	1.1111234	1	0.740741	1
24	1.1111122	1	0.7407458	1
25	1.1111074	1	0.7407449	1
26	1.1111077	1	0.7407424	1
27	1.1111095	1	0.7407407	1

Valores aproximados para la solución de sistema				
Tiempo	R (t)	Factor de Peso	F (t)	Factor de Peso
28	1.111111	1	0.7407401	1
29	1.1111116	1	0.7407401	1
30	1.1111117	1	0.7407404	1

Tabla 3.2 Valores experimentales, con factor de peso igual a 1

Ahora, utilizando la matriz de covarianzas de los parámetros, calculada al obtener la estimación de parámetros, se obtiene la función objetivo para este modelo, lo cual nos ayudará a calcular el factor de peso real para cada uno de los puntos de diseño.

$$F(X) = 0.0065398407$$

Una vez calculada la función objetivo, el programa nos proporciona los factores de peso óptimos para cada uno de los puntos de diseño.

Valores aproximados para la solución de sistema				
Tiempo	R (t)	Factor de Peso	F (t)	Factor de Peso
0	0.1	0.0000161	0.5	0.0000161
1	0.3979958	0.275	0.2232959	0.0000161
2	1.1291113	0.0000161	0.1601251	0.0000161
3	1.6208004	0.37	0.2122997	0.0000161
4	1.6440735	0.0000161	0.3470276	0.193
5	1.4913968	0.0000161	0.5266839	0.0000161
6	1.3092231	0.0000161	0.6823807	0.0000161
7	1.1721945	0.0000161	0.7630313	0.0000161
8	1.1026051	0.0000161	0.7775542	0.0000161
9	1.0848697	0.0000161	0.7632899	0.161
10	1.0922298	0.0000161	0.7472302	0.0000161
11	1.1041826	0.0000161	0.7387094	0.0000161
12	1.1116333	0.0000161	0.7369083	0.0000161
13	1.1138369	0.0000161	0.7382197	0.0000161
14	1.113202	0.0000161	0.7399085	0.0000161
15	1.1119534	0.0000161	0.7408773	0.0000161
16	1.1111236	0.0000161	0.7411285	0.0000161
17	1.1108446	0.0000161	0.7410182	0.0000161
18	1.1108851	0.0000161	0.7408441	0.0000161
19	1.1110109	0.0000161	0.7407352	0.0000161
20	1.1111024	0.0000161	0.7407019	0.0000161
21	1.1111376	0.0000161	0.74071	0.0000161
22	1.1111366	0.0000161	0.7407281	0.0000161
23	1.1111234	0.0000161	0.740741	0.0000161
24	1.1111122	0.0000161	0.7407458	0.0000161
25	1.1111074	0.0000161	0.7407449	0.0000161

Valores aproximados para la solución de sistema				
Tiempo	R (t)	Factor de Peso	F (t)	Factor de Peso
26	1.1111077	0.0000161	0.7407424	0.0000161
27	1.1111095	0.0000161	0.7407407	0.0000161
28	1.1111111	0.0000161	0.7407401	0.0000161
29	1.1111116	0.0000161	0.7407401	0.0000161
30	1.1111117	0.0000161	0.7407404	0.0000161

Tabla 3.5 Valores experimentales, con los pesos encontrados para cada punto de diseño

Se obtuvieron cuatro puntos de diseño con un factor de peso significativo. Para la población de conejos, se cuenta solamente con los tiempos de diseño 1 y 3; mientras que para la población de zorros, los tiempos de diseño que fueron determinados como significativos fueron los puntos 4 y 9.

3.4 Observaciones y Hallazgos

Se tomó como punto de partida el modelo presa-depredador original, aunque con uno de los supuestos iniciales modificado, el cual altera el comportamiento del sistema; suponiendo que en ausencia de depredadores ($F = 0$) la población de presas sigue un crecimiento logístico en vez de un crecimiento exponencial, la estructura de la ecuación para la población de conejos se ve modificada para adquirir la forma del modelo de Verhulst (ecuación 3.1).

De esta manera, se cuenta con una nueva ecuación que modela el comportamiento de la población de presas (conejos):

$$\frac{dR}{dt} = \left[\alpha R \left(1 - \frac{R}{K} \right) \right] - \beta RF$$

Donde K es la capacidad de carga del sistema, para este modelo presa-depredador corregido, al seguir un crecimiento logístico, se dice que el modelo llegará a un estado de equilibrio en el comportamiento de la población, ocasionado por las limitantes del modelo, las cuales pueden ser la escasez de recursos o de espacio para crecer ilimitadamente.

Para preservar la estructura del modelo presa-depredador original y permitir una posterior comparación, los valores iniciales β para los parámetros de diseño del modelo se mantienen iguales a los vistos en el capítulo 2, mientras que el valor asignado para la capacidad de carga es de $K=2$.

Este estado de equilibrio, o capacidad de carga del sistema, está principalmente definido por los valores de los parámetros iniciales, por lo que no importa que valores experimentales iniciales (R_0, F_0) se tomen para el modelo, el punto de equilibrio siempre será el mismo para ambas poblaciones. Para analizar el sistema en este trabajo de investigación, se tomó $R_0 = 0.1, F_0 = 0.5$.

Una vez propuestas las soluciones para el modelo corregido, se introducen los valores iniciales de los parámetros y los datos experimentales para realizar el análisis estadístico de

los parámetros. Se realiza la simulación y posterior comparación de los valores simulados con los datos experimentales.

Posteriormente, se realizó la estimación de parámetros. Se observa que el valor estimado por mínimos cuadrados de cada parámetro no varía a los parámetros iniciales, de esta manera la desviación estándar de cada parámetro ya optimizado se mantiene muy pequeña. Los valores óptimos $\hat{\beta}$ encontrados fueron $\alpha = 2$, $\beta = 1.2$, $\gamma = 1$, $\delta = 0.9$.

La alta calidad del ajuste y la semejanza entre los datos experimentales y los valores simulados, resulta en la observada igualdad entre los valores de β y $\hat{\beta}$.

Por otra parte, aunque los valores para la matriz de correlaciones resultaron ser significativos, los valores de la traza de la matriz de covarianzas resultaron ser muy pequeños, por lo que termina siendo imposible discriminar y jerarquizar cada uno de los parámetros para el modelo según su importancia dentro del modelo. Al no poder jerarquizar la significancia de cada parámetro, se puede pensar que los cuatro parámetros son igualmente importantes para el comportamiento del modelo en general.

Por último se realizó la parte de diseño óptimo, en búsqueda de los puntos de diseño más significativos para el modelo corregido. Una vez calculada la función objetivo, se asignan los pesos óptimos para cada uno de los puntos de diseño, y se identifican los puntos óptimos. El programa determinó cuatro puntos de diseño óptimos:

Valores Experimentales para el Diseño				
Tiempo	R (t)	Factor de Peso	F (t)	Factor de Peso
0	0.1	0.0000161	0.5	0.0000161
1	0.3979958	0.275	0.2232959	0.0000161
3	1.6208004	0.37	0.2122997	0.0000161
4	1.6440735	0.0000161	0.3470276	0.25
9	1.0848697	0.0000161	0.7632899	0.176
10	1.0922298	0.0000161	0.7472302	0.0000161

Tabla 3.4 Valores iniciales y puntos de diseño con factor de peso significativo

Como se puede ver en la tabla de datos experimentales (Tabla 3.1), y como se aprecia en las gráficas poblacionales, tanto la población de conejos como la población de Zorros se estabilizan alrededor del punto de diseño del tiempo 10. A partir de ese momento, el modelo llega a su capacidad de carga y adquiere un estado de equilibrio para las siguientes unidades de tiempo, por lo que este punto de diseño resulta de suma importancia para la explicación del comportamiento del sistema.

Al tiempo que la población de conejos decrece por las primeras interacciones entre especies en las que los conejos son devorados, la población de zorros aumenta por el beneficio de cada presa devorada. Posteriormente, ambas poblaciones se estabilizan según la capacidad de carga del sistema en el punto de equilibrio;

$$(R, F) \approx (1.11, 0.74).$$

Así, para el modelo completo, los puntos de diseño a ser considerados óptimos y que demuestran la dinámica de las poblaciones en el modelo para los tiempos anteriores al punto de equilibrio (Figuras 3.5 y 3.6), son los puntos en las unidades de tiempo $t = \{0, 3, 4, 9, 10\}$.

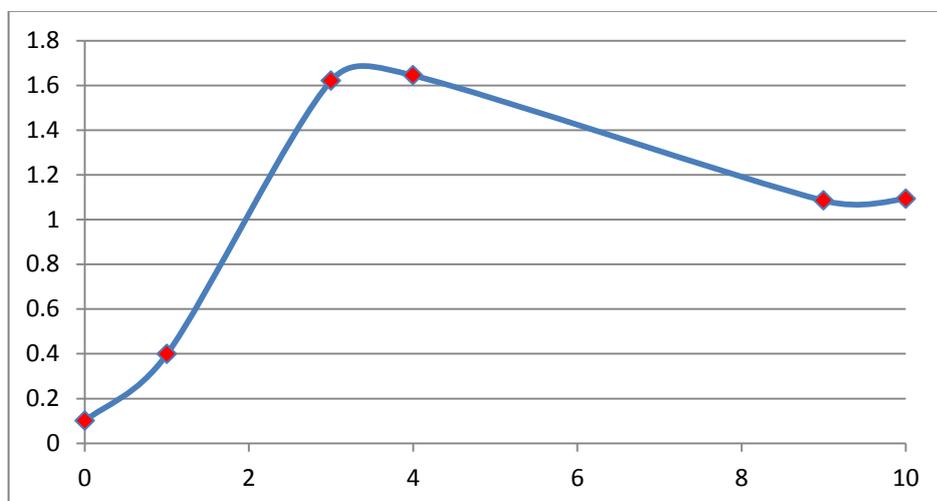


Figura 3.5 Puntos de diseño significativos para la población de conejos en el modelo corregido

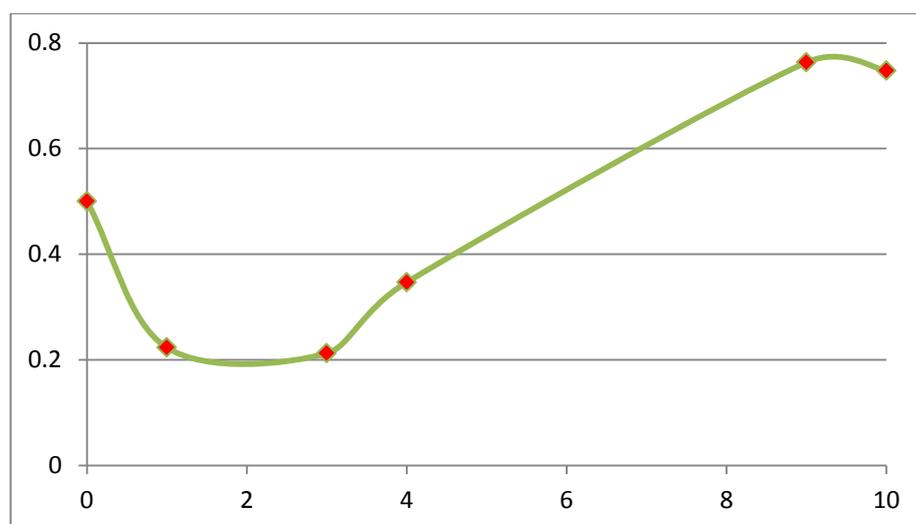


Figura 3.6 Puntos de diseño significativos para la población de zorros en el modelo corregido

4. Modelo Presa-Depredador: Revisado

En los capítulos anteriores de este trabajo se revisaron tanto el modelo presa-depredador como el modelo presa-depredador corregido, la simulación de los valores de respuesta para ambos modelos, las estimaciones de parámetros así como el diseño óptimo, sin embargo, se dejaron de lado aspectos importantes para el diseño experimental; como lo son el sesgo sistemático y el error muestral, temas que serán retomados en este capítulo.

De igual manera se retomará el Modelo Presa-Depredador para observar a detalle los resultados obtenidos con la rutina de diseño óptimo y la pérdida de información con los puntos de diseño estimados.

4.1 Modelo Presa-Depredador: Revisado

Como ya se analizó en el capítulo 2, los resultados para el diseño óptimo derivado del modelo Presa-Depredador (2.1) arrojaron la existencia de 4 puntos de diseño significativos, calculados mediante el software estadístico Easy-Fit utilizando el criterio A-óptimo.

Siendo los puntos de diseño los representados en el capítulo 2 de este trabajo, que se muestran en la tabla 2.4.

Valores Experimentales para el Diseño				
Tiempo	R (t)	Factor de Peso	F (t)	Factor de Peso
0	1	0.0000161	0.5	0.0000161
1	3.3416312	0.343	1.1793721	0.199
12	0.8445208	0.2	3.8987653	0.0000161
27	1.0034494	0.0000161	3.9412911	0.256

Tabla 2.4 Valores iniciales y puntos de diseño con factor de peso significativo.

Observando el comportamiento de los puntos óptimos generados, se puede apreciar un comportamiento oscilatorio similar a la dinámica del sistema, en el caso de la población de conejos, y una curva para el caso de la población de zorros, aunque con una clara pérdida de información, puesto que deja una cantidad considerable de puntos de diseño sin ser tomados en cuenta.

Para probar los puntos de diseño determinados como óptimos por el software, se realizó una gráfica comparando la población de conejos y la población de zorros, identificando en ésta los puntos óptimos para el modelo. A esta gráfica se le conoce como el atractor y será utilizada para identificar la tendencia y el comportamiento a largo plazo de un sistema después de cierta cantidad de iteraciones.

El objetivo de esta gráfica es visualizar el lugar que ocupan los puntos determinados como óptimos en la evolución temporal a largo plazo de las poblacionales.

Así pues, tomando los datos experimentales para el modelo presa depredador original (Tabla 2.1), se obtiene la siguiente gráfica.

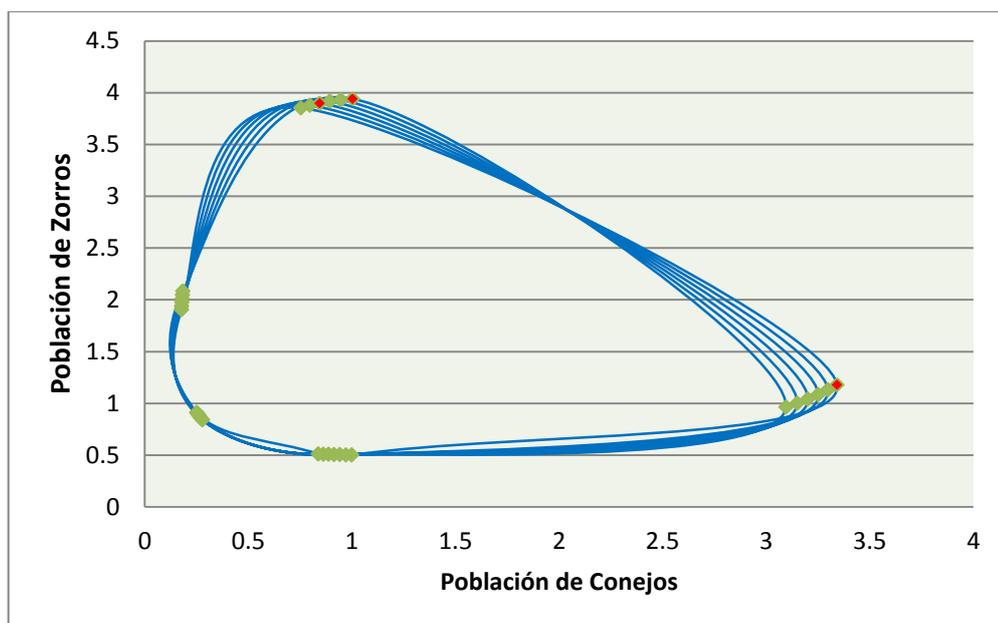


Figura 4.1 Atractor para el modelo Presa-Depredador

Como se puede observar, la gráfica consta de cinco concentraciones de puntos. Cada que la gráfica recorre el ciclo de los cinco puntos, representa una de las oscilaciones que suceden cada cinco unidades de tiempo dentro de las gráficas poblacionales (Figuras 2.1 y 2.2); donde los puntos verdes representan los valores poblacionales para cada una de las especies en cierta unidad de tiempo, mientras que en color rojo se presentan los cuatro tiempos de observación óptimos para el experimento (ubicados en tres unidades de tiempo (Tabla 2.4)).

Se aprecia que los puntos óptimos del diseño tampoco recuperan satisfactoriamente el comportamiento general de la interacción de las poblaciones. Esto debido a la naturaleza cíclica de los valores poblacionales obtenidos como solución al sistema.

De esta manera, podemos pensar que el criterio A-óptimo de diseño experimental, y por ende el software Easy-Fit utilizado para este trabajo, no funcionan correctamente con sistemas dinámicos con comportamiento cíclico.

Si a pesar de esas limitantes es de interés obtener los puntos de diseño óptimo para un problema cíclico, una solución sería muestrear en cada uno de los ciclos de la dinámica del sistema o en cada una de las iteraciones, utilizando un tamaño de malla menor, como se aprecia en las Figuras 4.2 y 4.3.

Se tomaron los valores experimentales para el modelo Presa-Depredador, así como los valores de β , considerando solamente los tiempos que abarcan el primer ciclo de la dinámica del sistema, los tiempos de 0 a 5 y tomando un tamaño de paso entre las unidades de tiempo de 0.2.

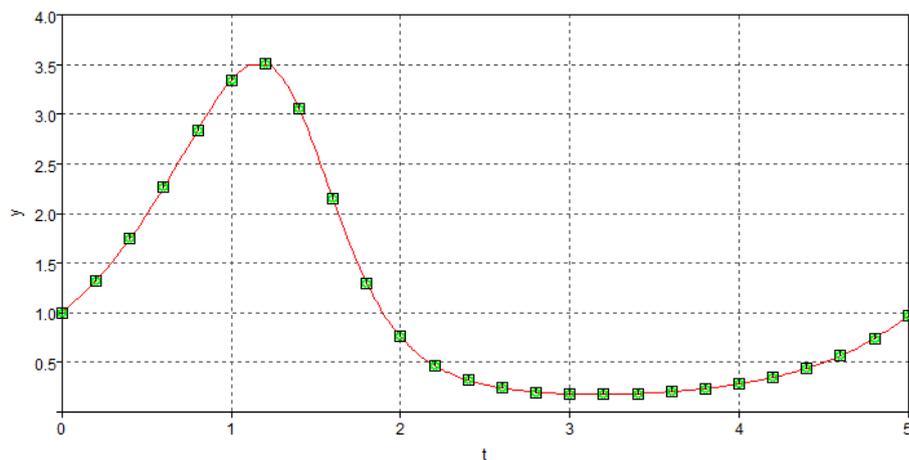


Figura 4.2 Población de Conejos para el ciclo de tiempo 0 a 5

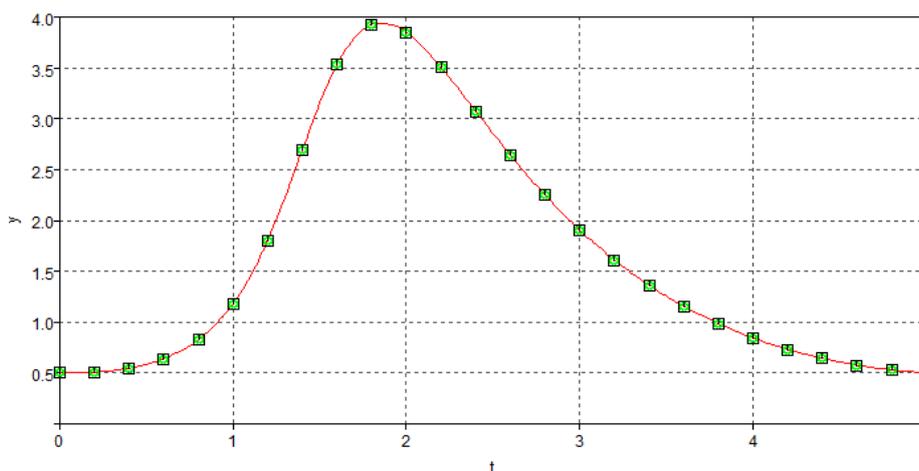


Figura 4.3 Población de Zorros para el ciclo de tiempo 0 a 5

De esta manera, utilizando el software Easy-Fit, realizamos el análisis de diseño óptimo para este nuevo conjunto de datos más específico, obteniendo los valores de los pesos para cada punto de diseño (Tabla 4.1), así como los puntos de diseño óptimo (Tabla 4.2).

Valores Experimentales para el Diseño				
Tiempo	R (t)	Factor de Peso	F (t)	Factor de Peso
0	1	0.0000192	0.5	0.0000192
0.2	1.3232807	0.0000192	0.5038944	0.0000192
0.4	1.7425534	0.0000192	0.5428195	0.0000192
0.6	2.2597331	0.0000192	0.636279	0.0000192
0.8	2.8362953	0.336	0.8238795	0.0000192
1	3.3416311	0.0000192	1.1793696	0.0000192
1.2	3.5072273	0.0000192	1.8021563	0.182
1.4	3.062156	0.0000192	2.6912225	0.0000192
1.6	2.1518709	0.0000192	3.534014	0.0000192
1.8	1.2967042	0.0000192	3.9305261	0.317
2	0.754487	0.0000192	3.8524777	0.0000192
2.2	0.4637676	0.0000192	3.5096315	0.0000192
2.4	0.3136683	0.0000192	3.0771611	0.0000192

Valores Experimentales para el Diseño				
Tiempo	R (t)	Factor de Peso	F (t)	Factor de Peso
2.6	0.2356114	0.0000192	2.6450374	0.0000192
2.8	0.1955222	0.0000192	2.2503148	0.0000192
3	0.1773424	0.0000192	1.9047867	0.0000192
3.2	0.1737073	0.0000192	1.6092642	0.0000192
3.4	0.1816215	0.0000192	1.3601462	0.0000192
3.6	0.200577	0.0000192	1.1523684	0.0000192
3.8	0.231806	0.0000192	0.9807212	0.0000192
4	0.2780907	0.0000192	0.8404389	0.0000192
4.2	0.343886	0.0000192	0.7274659	0.0000192
4.4	0.4356498	0.0000192	0.6385989	0.0000192
4.6	0.562299	0.0000192	0.5716285	0.0000192
4.8	0.7356719	0.165	0.5255811	0.0000192
5	0.9707043	0.0000192	0.501213	0.0000192

Tabla 4.1 Valores experimentales, con los pesos encontrados para cada punto de diseño para el Modelo presa depredador $t \in \{0.0, 5.0\}$

Valores Experimentales para el Diseño				
Tiempo	R (t)	Factor de Peso	F (t)	Factor de Peso
0	1	0.0000192	0.5	0.0000192
0.8	2.8362953	0.336	0.8238795	0.0000192
1.2	3.5072273	0.0000192	1.8021563	0.182
1.8	1.2967042	0.0000192	3.9305261	0.317
4.8	0.7356719	0.165	0.5255811	0.0000192

Tabla 4.2 Puntos de diseño óptimo para el Modelo presa depredador $t \in \{0.0, 5.0\}$

Así pues, tomando los puntos de diseño óptimos, se observa que ante esta muestra con un tamaño de malla menor, se aprecia completamente el comportamiento de la dinámica de esta muestra con menos puntos de diseño. De igual manera para los mismos puntos de diseño en el caso de la población de zorros, se observa un mejor ajuste al comportamiento de esta muestra de la población inicial.

4.2 Modelo Presa-Depredador vs Modelo Presa Depredador Corregido

Ahora bien, se realizó una comparación entre ambos modelos, para poder analizar de qué manera cambia la estructura del modelo original al tomar como válidos los supuestos para el modelo corregido, tanto en las ecuaciones para cada sistema, como en la expresión matricial para los parámetros del modelo.

Para llevar a cabo este análisis posterior, se tomaron de nuevo las ecuaciones para cada uno de los modelos; para el modelo presa-depredador

$$\frac{dR}{dt} = \alpha R - \beta RF \quad (2.2)$$

$$\frac{dF}{dt} = -\gamma F + \delta RF$$

Y para el modelo corregido

$$\frac{dR}{dt} = \left[\alpha R \left(1 - \frac{R}{K} \right) \right] - \beta RF \quad (3.3)$$

$$\frac{dF}{dt} = -\gamma F + \delta RF$$

Para facilitar la comparación entre ambos modelos, se tomó la ecuación para la población de conejos, suprimiendo el paréntesis dentro del corchete, obteniendo la siguiente expresión

$$\frac{dR}{dt} = \left[\alpha R - \frac{\alpha}{K} R^2 \right] - \beta RF \quad (4.1)$$

$$\frac{dF}{dt} = -\gamma F + \delta RF$$

Donde K es la capacidad de carga del sistema.

Retomando la ecuación para la población de conejos, reescribiéndola como

$$\frac{dR}{dt} = [\alpha R - \beta RF] - \frac{\alpha}{K} R^2 \quad (4.2)$$

De esta manera se aprecia la semejanza entre la ecuación (4.2) que representa al modelo presa-depredador corregido, con la ecuación para el modelo original (2.2); siendo la única diferencia el término $-\frac{\alpha}{K} R^2$.

Ahora, tomando en cuenta la representación matricial para estos modelos. Para el modelo original

$$\begin{pmatrix} \frac{dR}{dt} \\ \frac{dF}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & -\beta \\ 0 & 0 & -\gamma & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R \\ R^2 \\ F \\ RF \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

Mientras que para el modelo corregido

$$\begin{pmatrix} \frac{dR}{dt} \\ \frac{dF}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & -\frac{\alpha}{K} & 0 & -\beta \\ 0 & 0 & -\gamma & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R \\ R^2 \\ F \\ RF \end{pmatrix}$$

O visto de otra forma

$$\begin{pmatrix} \frac{dR}{dt} \\ \frac{dF}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & -\beta \\ 0 & 0 & -\gamma & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R \\ R^2 \\ F \\ RF \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\alpha}{K} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R \\ R^2 \\ F \\ RF \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

De manera que, utilizando la notación matricial, se puede observar que el modelo original (4.3) está expresado de la forma $y(t) = Kx(t)$ mientras que el modelo corregido (4.4) está escrito de la forma $y(t) = Kx(t) + \Delta(t)$ donde

$$\Delta(t) = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\alpha}{K} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R \\ R^2 \\ F \\ RF \end{pmatrix}$$

$\Delta(t)$ representa un sesgo sistemático que modifica al modelo original. Observando los distintos comportamientos para ambos modelos, se puede pensar que este sesgo representa, tanto el supuesto que transforma el crecimiento de las poblaciones de un crecimiento exponencial a un crecimiento logístico como, consecuentemente, el cambio en la dinámica del modelo, de tal forma que el comportamiento modelo presa-depredador corregido deja de seguir una forma cíclica, para convertirse en un modelo no cíclico.

4.3 Modelo Presa-Depredador Corregido con error experimental

A continuación, se realiza un análisis de sensibilidad al modelo corregido, considerando además del sesgo sistemático, la adición de un factor extra de error experimental que interfiere con el comportamiento del modelo. La intención de realizar este análisis es probar qué tan bien se comporta el software Easy Fit, así como el método de diseño A-óptimo que utiliza, ante fuentes de variabilidad.

De esta manera el modelo que anteriormente habíamos definido se convierte a la forma $y(t) = Kx(t) + \Delta(t) + \epsilon$, donde ϵ representa el error experimental. Para este error experimental se supone

- ϵ tiene media igual a 0.
- Su varianza es constante, digamos σ^2 .
- Como variable aleatoria es descrita por la función de densidad Normal.

Así, el modelo corregido queda reescrito de la forma $y(t) = Kx(t) + \Delta(t) + \epsilon$, donde $\epsilon \sim N(0, \sigma^2)$, de manera que los elementos en ϵ son mutuamente independientes.

Para realizar un análisis más detallado, fueron probados diversos valores para la varianza del error experimental; $\sigma^2 = \{0.1, 0.5, 1\}$.

Con la ayuda del software estadístico R se calcularon los valores de $\epsilon \sim N(0, \sigma^2)$, para sumar a cada uno de los valores por unidad de tiempo en la Tabla 3.1, dejando las condiciones iniciales $R(0)$ y $F(0)$ fijas, sin ruido añadido. El valor de la varianza del error para este primer caso de estudio es de 0.1.

Los valores para este modelo corregido con error, a ser introducidos al software Easy-Fit pueden ser observados en la Tabla 4.3.

Valores poblacionales		
$y(t) = Kx(t) + \Delta(t) + \epsilon$		
Tiempo	R(t)	F(t)
0	0.1	0.5
1	0.2599825	0.3274801
2	1.2819216	0.1317032
3	1.6186733	0.1725485
4	1.6664399	0.4543604
5	1.5168686	0.639801
6	1.2471536	0.6786103
7	1.1239108	0.7118869
8	0.9861829	0.6646915
9	1.0862605	0.6572761
10	1.0684166	0.881935
11	1.1246003	0.6217857
12	1.0965185	0.6291895

Valores poblacionales		
$y(t) = Kx(t) + \Delta(t) + \epsilon$		
Tiempo	R(t)	F(t)
13	1.232997	0.880219
14	1.1488647	0.821516
15	1.1442034	0.7943512
16	1.1160203	0.6509307
17	0.8983507	0.9496937
18	1.087341	0.7265518
19	1.1660581	0.8576872
20	1.0150544	0.6974839
21	1.2143154	0.7689314
22	1.1102128	0.6226653
23	1.1760506	0.6761514
24	1.1032176	0.786184
25	1.1082147	0.8297591
26	1.0425956	0.7161985
27	1.0574323	0.8409084
28	1.0349287	0.6457134
29	1.1912298	0.7277957
30	1.1226316	0.7586674

Tabla 4.3 Valores experimentales para el Modelo presa depredador corregido con error

En las Figuras 4.4 y 4.5 se puede apreciar el comportamiento de las poblaciones y el cómo la gráfica de solución simulada por el software difiere de los valores iniciales introducidos (puntos verdes).

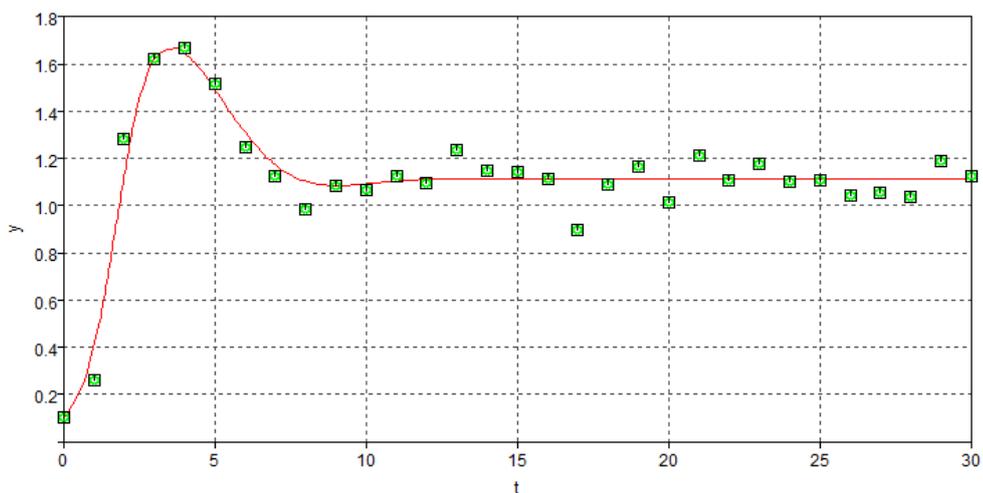


Figura 4.4 Población de Conejos para el modelo Presa-Depredador corregido con error $\sigma^2=0.1$

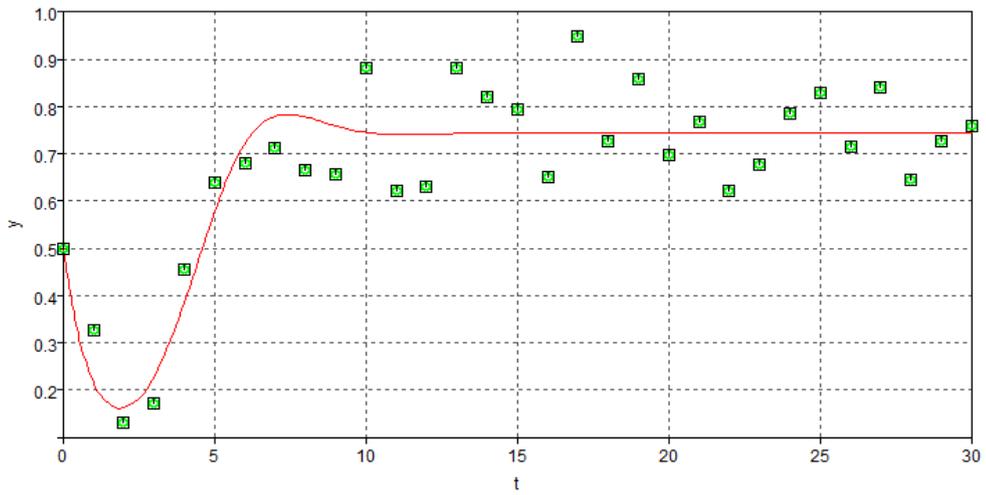


Figura 4.5 Población de Zorros para el modelo Presa-Depredador corregido con error $\sigma^2=0.1$

Esta diferencia se aprecia de mejor manera al realizar la estimación de parámetros para obtener los valores de $\hat{\beta}$. El factor del error provoca una variación en los valores de los parámetros, como se puede observar en la Tabla 4.4, así como diferencias en las gráficas poblacionales (Figuras 4.6 y 4.7).

Parámetro	Valor inicial (β)	Valor estimado por el software ($\hat{\beta}_1$)
α	2	2.0955
β	1.2	1.2578
γ	1	1.0470
δ	0.9	0.9464

Tabla 4.4 Valores iniciales y estimados de los parámetros para el modelo Presa-Depredador corregido con error $\sigma^2=0.1$

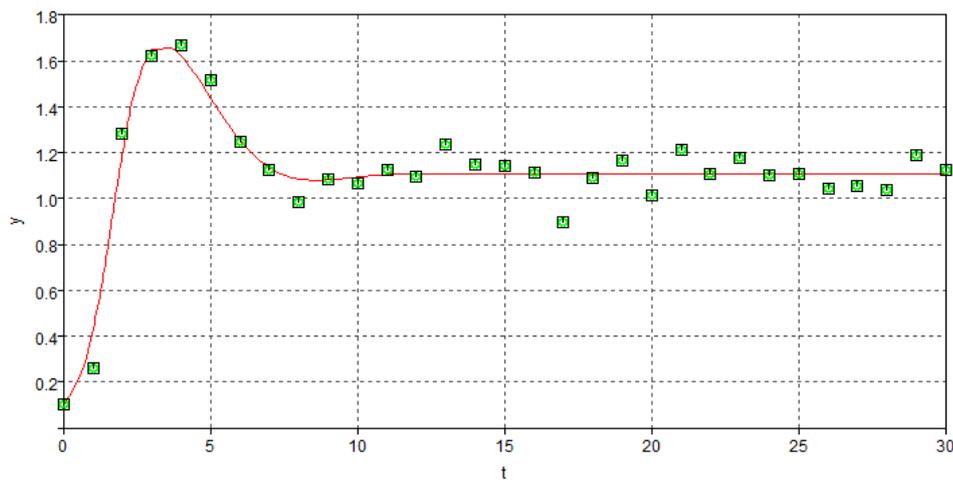


Figura 4.6 Población de Conejos ajustada para el modelo Presa-Depredador corregido con error $\sigma^2=0.1$ y $\hat{\beta}$

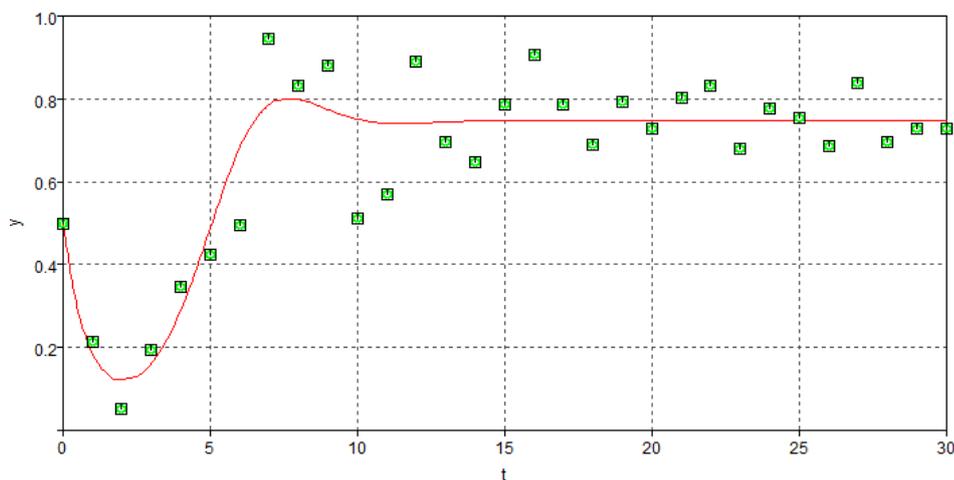


Figura 4.7 Población de Zorros ajustada para el modelo Presa-Depredador corregido con error $\sigma^2=0.1$ y $\hat{\beta}$

A pesar de esas variaciones, el software Easy-Fit, utilizando el criterio A-óptimo, obtiene puntos de diseño (Tabla 4.5) que rescatan la dinámica del modelo en las unidades de tiempo previo al punto de equilibrio del sistema (Figuras 4.8 y 4.9). Considerando los puntos de diseño (Tabla 4.5), se aprecia un comportamiento similar a la dinámica de la población de conejos, acercándose al punto donde la población se estabiliza y alcanza su punto de equilibrio $(R, F) \approx (1.11, 0.74)$. Incluso podemos observar que se obtienen prácticamente los mismos puntos de diseño para el modelo corregido sin error (Tabla 3.4), variando solamente el punto 2 en vez del punto 3.

Valores Experimentales para el Diseño				
Tiempo	R (t)	Factor de Peso	F (t)	Factor de Peso
0	0.1	0.0000161	0.5	0.0000161
1	0.2599825	0.348	0.3274801	0.0000161
2	1.2819216	0.352	0.1317032	0.0000161
4	1.6664399	0.0000161	0.4543604	0.128
9	1.0862605	0.0000161	0.6572761	0.171
10	1.0684166	0.0000161	0.881935	0.0000161

Tabla 4.5 Puntos de diseño óptimo para el Modelo presa depredador corregido con error $\sigma^2=0.1$

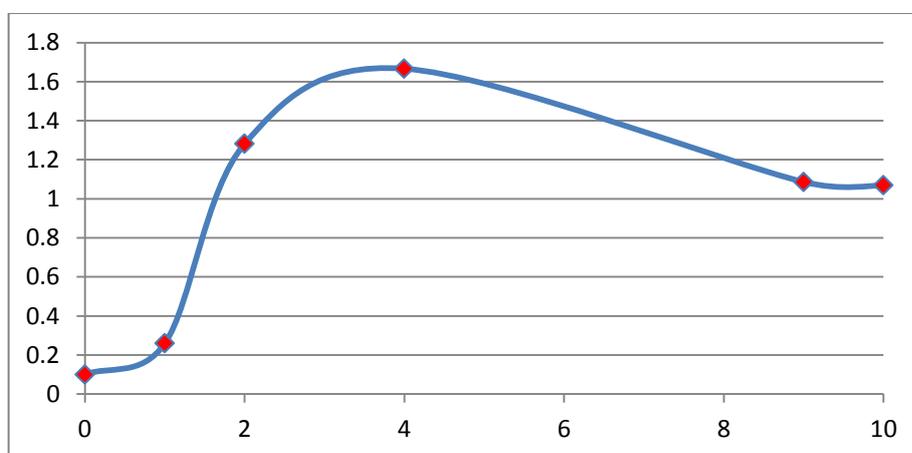


Figura 4.8 Puntos de diseño significativos para la población de conejos en el modelo corregido con error $\sigma^2=0.1$ y $\hat{\beta}_1$

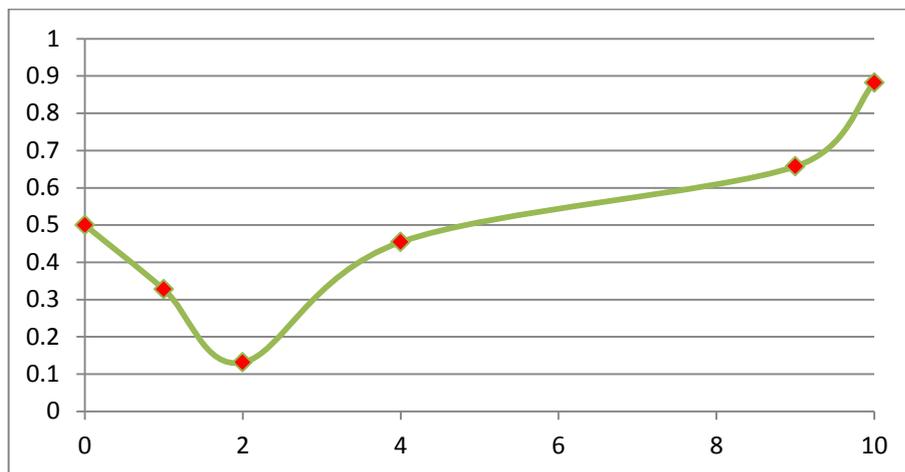


Figura 4.9 Puntos de diseño significativos para la población de zorros en el modelo corregido con error $\sigma^2=0.1$ y $\hat{\beta}_1$

Análogamente utilizando el software estadístico R se obtienen los valores experimentales para $y(t) = Kx(t) + \Delta(t) + \epsilon$ tanto para $\sigma^2=0.5$, como para $\sigma^2=1$ (Tabla 4.6).

Valores poblacionales					
$y(t) = Kx(t) + \Delta(t) + \epsilon$					
	$\sigma^2=0.5$			$\sigma^2=1$	
Tiempo	R(t)		F(t)	R(t)	F(t)
0	0.1		0.5	0.1	0.5
1	0.45358414		1.206942196	0.221441	1.07705476
2	0.92408694		0.167418042	1.2415253	1.06477858
3	1.41564677		0.682378727	1.669655	0.25618904
4	1.37578147		0.707374457	2.4025408	0.87147948
5	1.58729414		0.286191183	2.0151959	0.26630083
6	1.76518058		0.534891809	0.9569734	1.43383884
7	0.79082986		0.301413111	1.2728103	0.85008066
8	1.00144415		1.000497113	0.4822869	0.11642951
9	1.48392137		0.124346234	2.1847488	0.25215314
10	0.8995587		0.254751541	2.2670983	0.51680472
11	1.02541011		1.013051283	3.3244481	0.03292642
12	1.39147858		1.040581954	0.1912676	0.04520412
13	0.01772778		0.884981968	2.4452075	0.11820404
14	1.51648124		0.193072642	0.638151	0.02102712
15	0.6989317		0.094326519	3.256694	0.22747195
16	0.22122886		0.903118304	0.8289119	1.57616017
17	1.1841922		1.410027432	0.5280263	0.64509034
18	1.45315871		0.085589713	1.9624788	0.47913827
19	1.44812295		1.14232247	1.5282611	0.89927144
20	1.63762806		1.301905049	1.1380485	0.27415528
21	1.71681741		0.846392077	1.082121	1.29003623
22	0.59485581		0.961482877	0.2032631	0.73351669

Valores poblacionales					
$y(t) = Kx(t) + \Delta(t) + \epsilon$					
	$\sigma^2=0.5$			$\sigma^2=1$	
Tiempo	R(t)		F(t)	R(t)	F(t)
23	0.43923758		0.001227939	0.2878225	0.38697352
24	1.52917021		0.297687767	1.8635463	0.96239991
25	1.26927513		0.005144429	0.718168	1.51388699
26	0.97469147		0.778789437	1.3766701	0.08547679
27	0.61129394		0.368525288	0.5347887	0.38615465
28	0.80983595		0.290418253	1.4569259	0.63514257
29	0.46628085		0.656073959	1.8659876	1.34736066
30	0.94264425		1.20139698	0.4111921	0.65062484

Tabla 4.6 Valores experimentales para el Modelo presa depredador corregido con errores $\sigma^2=0.5$ y $\sigma^2=1$

Los valores experimentales fueron introducidos al software Easy-Fit y se obtienen las gráficas poblacionales, primero para $\sigma^2=0.5$.

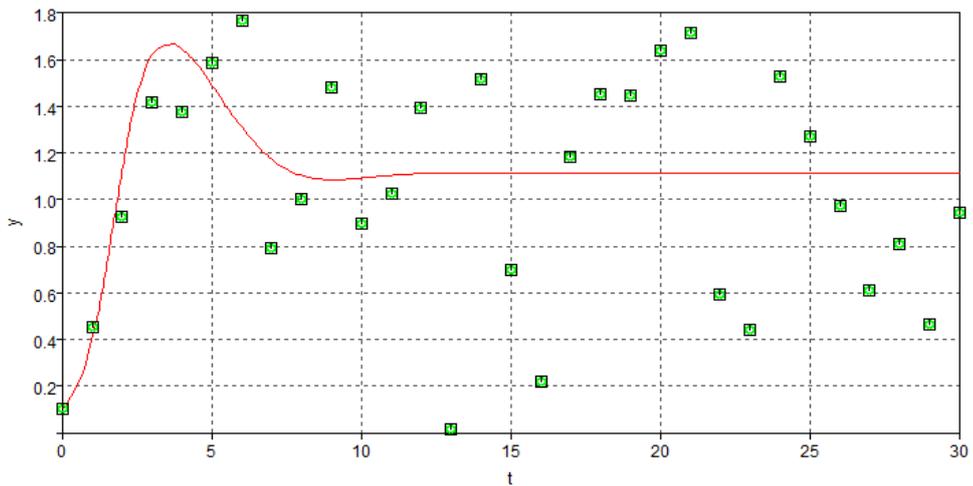


Figura 4.10 Población de Conejos para el modelo Presa-Depredador corregido con error $\sigma^2=0.5$

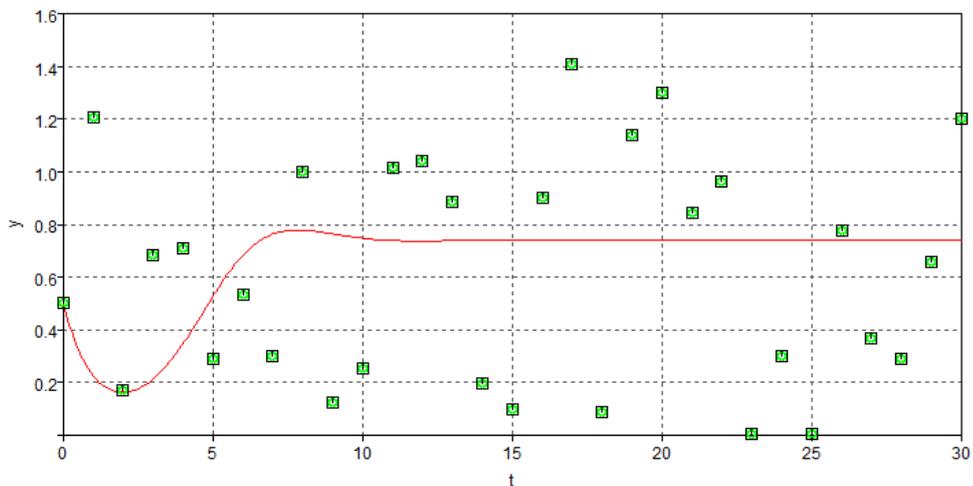


Figura 4.11 Población de Zorros para el modelo Presa-Depredador corregido con error $\sigma^2=0.5$

En el caso del modelo corregido con $\sigma^2=0.5$ se observa que los valores experimentales se dispersan de manera irregular en la gráfica y se alejan de la gráfica simulada por el software Easy-Fit, tanto para la población de conejos (Figura 4.10), como para la población de zorros (Figura 4.11).

Debido a esa dispersión, el valor estimado para los parámetros varía aún más mientras la desviación estándar del error crece (Tabla 4.7).

Parámetro	Valor inicial (β)	Valor estimado por el software ($\hat{\beta}_5$)
α	2	2.4008
β	1.2	1.8095
γ	1	0.2710
δ	0.9	0.2719

Tabla 4.7 Valores iniciales y estimados de los parámetros para el modelo Presa-Depredador corregido con error $\sigma^2=0.5$

Esto se observa de manera más clara en el gráfico ajustado con los valores de $\hat{\beta}$. En el caso de la población de conejos (Figura 4.12) la curva inicial de la gráfica, representando el incremento inicial de conejos ante la ausencia del depredador, se suaviza, aunque sigue estabilizándose aproximadamente en el punto de equilibrio.

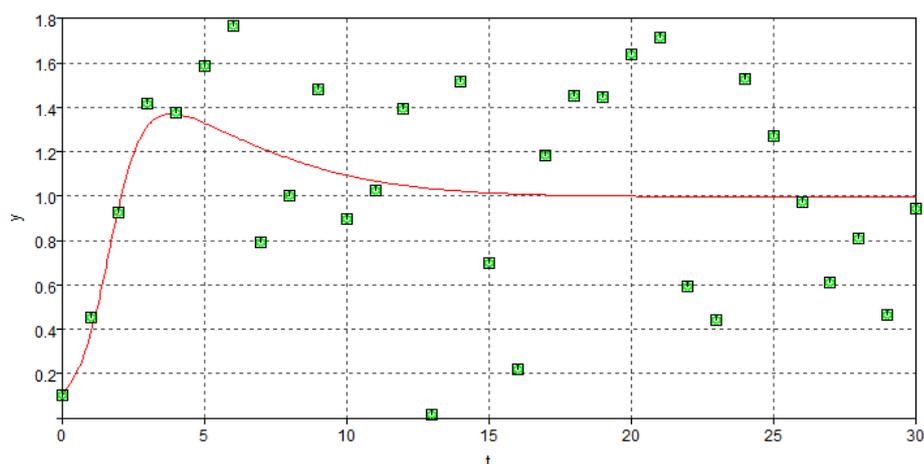


Figura 4.12 Población de Conejos ajustada para el modelo Presa-Depredador corregido con error $\sigma^2=0.5$ y $\hat{\beta}_5$

Mientras que para la población de zorros (Figura 4.13), se observa que los parámetros estimados cambian la naturaleza de la dinámica de la población de depredadores, haciendo que la gráfica presente un comportamiento casi uniforme.

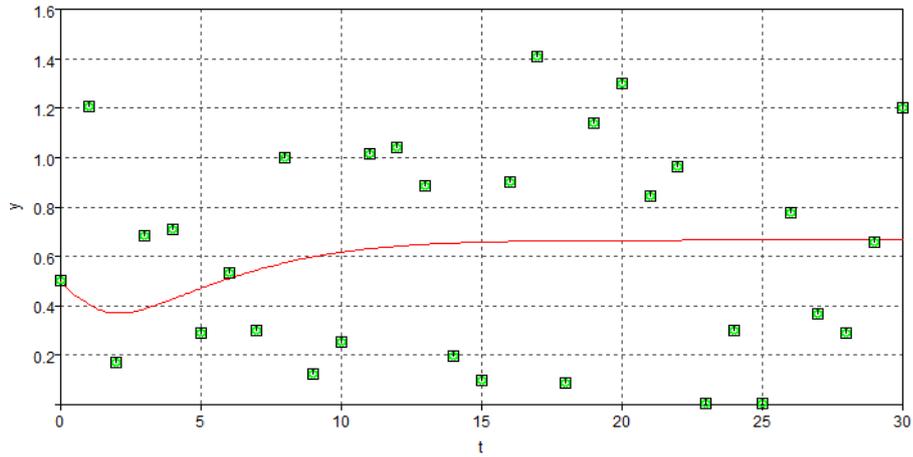


Figura 4.13 Población de Zorros ajustada para el modelo Presa-Depredador corregido con error $\sigma^2=0.5$ y $\hat{\beta}_5$

Así, utilizando el software Easy-Fit, se calculan puntos de diseño óptimo para el modelo (Tabla 4.8). A diferencia de los casos anteriores, el software sólo reconoce puntos de diseño con mayor peso en la población de conejos, esto debido al comportamiento observado en la Figura 4.13, donde el sistema se comporta prácticamente de manera uniforme.

Valores Experimentales para el Diseño				
Tiempo	R (t)	Factor de Peso	F (t)	Factor de Peso
0	0.1	0.0000161	0.5	0.0000161
1	0.45358414	0.327	1.206942196	0.0000161
3	1.41564677	0.372	0.682378727	0.0000161
7	0.79082986	0.152	0.301413111	0.0000161
30	0.94264425	0.149	1.20139698	0.0000161

Tabla 4.8 Puntos de diseño óptimo para el Modelo presa depredador corregido con error $\sigma^2=0.5$

Por un lado, a pesar del error experimental, los puntos de diseño permiten rescatar de manera aceptable la dinámica de la población de conejos (Figura 4.14), mientras que para la población de zorros (Figura 4.15) se obtiene una gráfica que difiere completamente del comportamiento de la población de zorros.

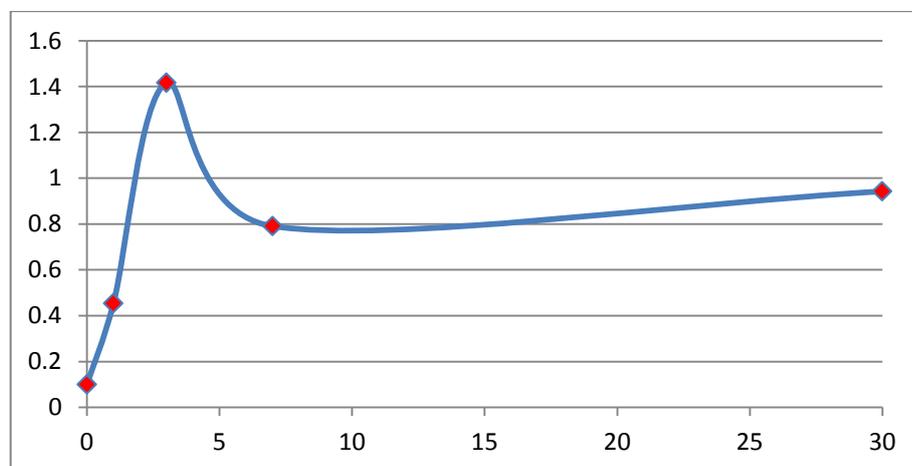


Figura 4.14 Puntos de diseño significativos para la población de conejos en el modelo corregido con error $\sigma^2=0.5$ y $\hat{\beta}_5$

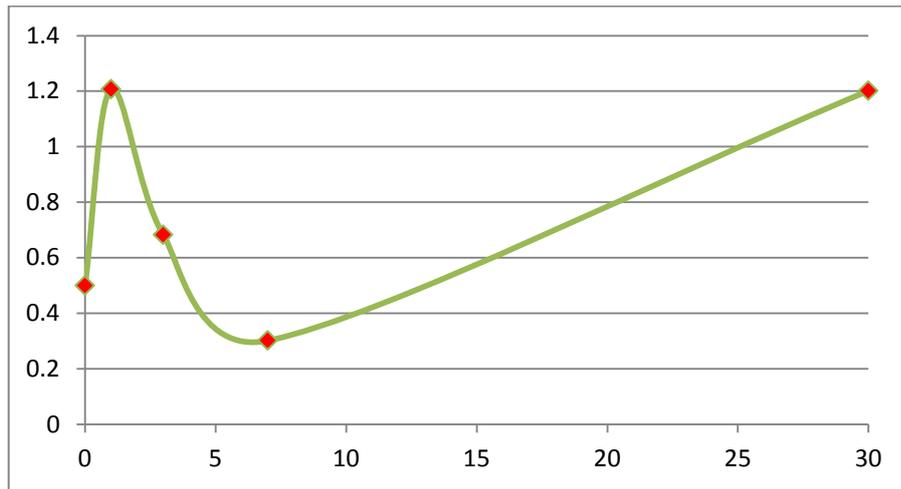


Figura 4.15 Puntos de diseño significativos para la población de conejos en el modelo corregido con error $\sigma^2=0.5$ y $\hat{\beta}_5$

Por último, análogamente, partiendo de los valores en la Tabla 4.6 se obtienen las gráficas poblacionales para el modelo corregido con error $\sigma^2=1$.

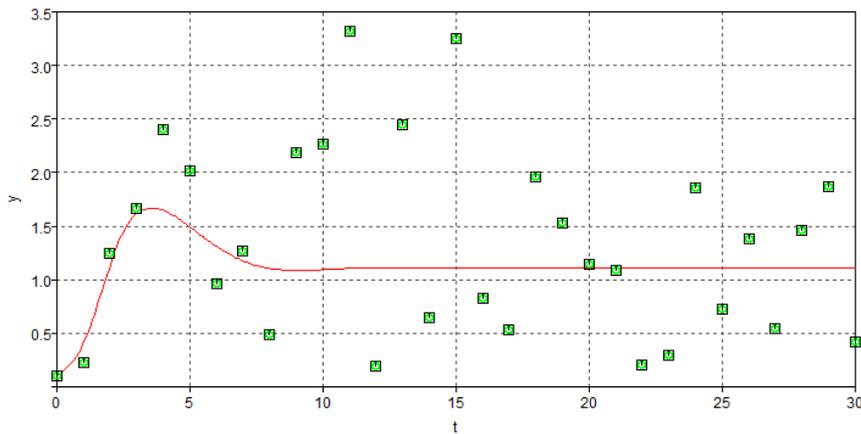


Figura 4.16 Población de Conejos para el modelo Presa-Depredador corregido con error $\sigma^2=1$

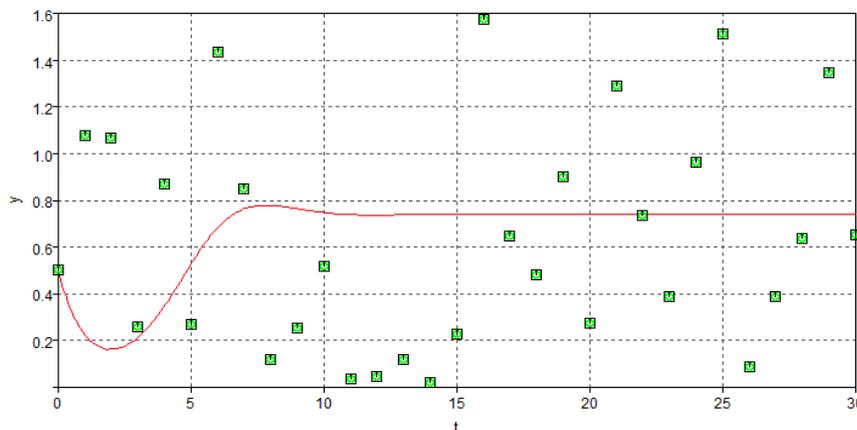


Figura 4.17 Población de Zorros para el modelo Presa-Depredador corregido con error $\sigma^2=1$

Como era de esperarse al aumentar el valor de σ^2 , los valores experimentales se dispersan y se alejan de la gráfica de respuesta obtenida mediante el software. Consecuentemente, se observa la variación en los valores estimados para los parámetros (Tabla 4.9).

Parámetro	Valor inicial (β)	Valor estimado por el software ($\hat{\beta}_{10}$)
α	2	1.6906
β	1.2	0.9875
γ	1	4.1281
δ	0.9	3.2398

Tabla 4.9 Valores iniciales y estimados de los parámetros para el modelo Presa-Depredador corregido con error $\sigma^2=1$

Se observa que el error experimental provoca que, en específico, los valores de γ y δ aumenten demasiado, de forma que la dinámica para la población de zorros se verá afectada de forma más clara que la población de conejos (Figuras 4.18 y 4.19).

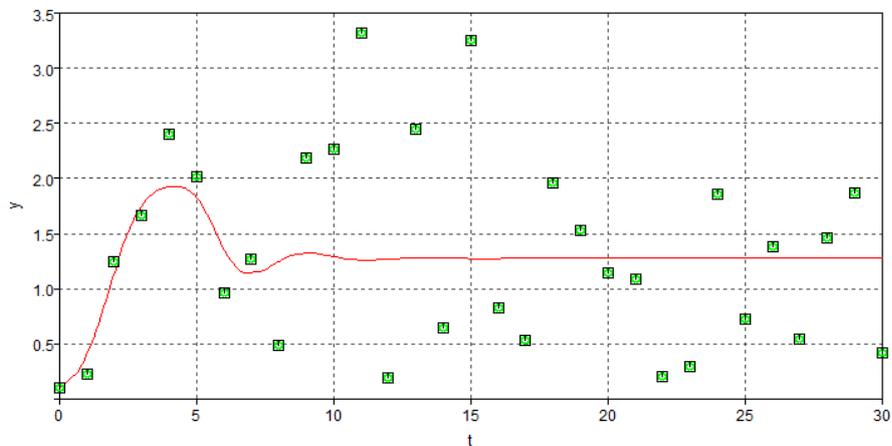


Figura 4.18 Población de Conejos ajustada para el modelo Presa-Depredador corregido con error $\sigma^2=1$ y $\hat{\beta}_{10}$

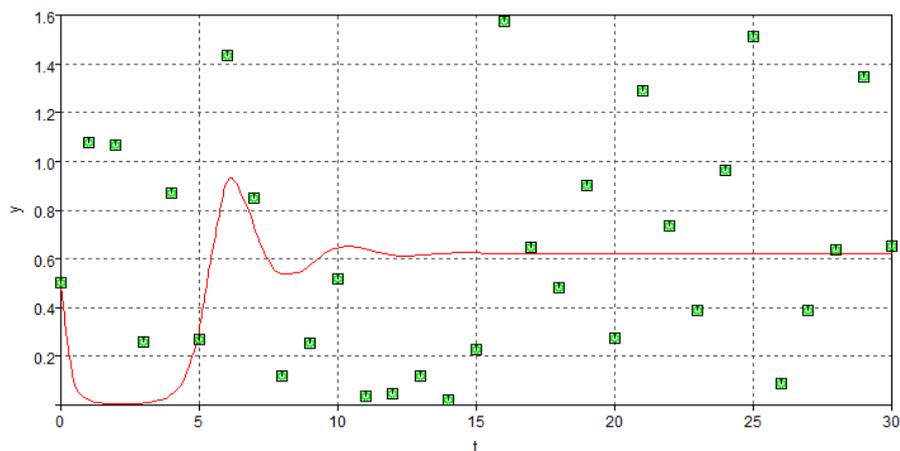


Figura 4.19 Población de Zorros ajustada para el modelo Presa-Depredador corregido con error $\sigma^2=1$ y $\hat{\beta}_{10}$

En el caso de la población de conejos (Figura 4.18), se observa que a pesar de formarse una curva extra anterior al punto de equilibrio, la gráfica poblacional se comporta de manera

muy similar a la gráfica con los valores iniciales originales, respetando dicho punto para las condiciones del sistema.

Por otra parte para la población de zorros (Figura 4.19), a pesar de que se sigue respetando la capacidad de carga y el equilibrio del sistema después del tiempo 10, en las unidades de tiempo anteriores se aprecia que la gráfica pierde toda similitud con la gráfica para los parámetros iniciales β , tomando una caída inicial más profunda, esto debido a la variación en los parámetros $\hat{\beta}_{10}$, como se comentaba anteriormente.

Supuesto esto, se analizan los puntos de diseño de mayor peso para el modelo corregido con error $\sigma^2=1$ (Tabla 4.10).

Valores Experimentales para el Diseño				
Tiempo	R (t)	Factor de Peso	F (t)	Factor de Peso
0	0.1	0.0000161	0.5	0.0000161
3	1.669655	0.0000161	0.25618904	0.191
4	2.4025408	0.0000161	0.87147948	0.211
6	0.9569734	0.0000161	1.43383884	0.215
7	1.2728103	0.382	0.85008066	0.0000161

Tabla 4.10 Puntos de diseño óptimo para el Modelo presa depredador corregido con error $\sigma^2=1$

Al igual que en el caso anterior, el software arroja puntos que conforman un comportamiento similar a la dinámica de las población de conejos antes de alcanzar el punto de equilibrio del sistema debido a la capacidad de carga (Figura 4.20). Pero en el caso de la población de zorros (Figura 4.21) el comportamiento que presenta ya no recupera de alguna manera la dinámica de la población de depredadores. Esto debido a que γ y δ son los parámetros que sufren mayor variación al momento de estimar $\hat{\beta}_{10}$.

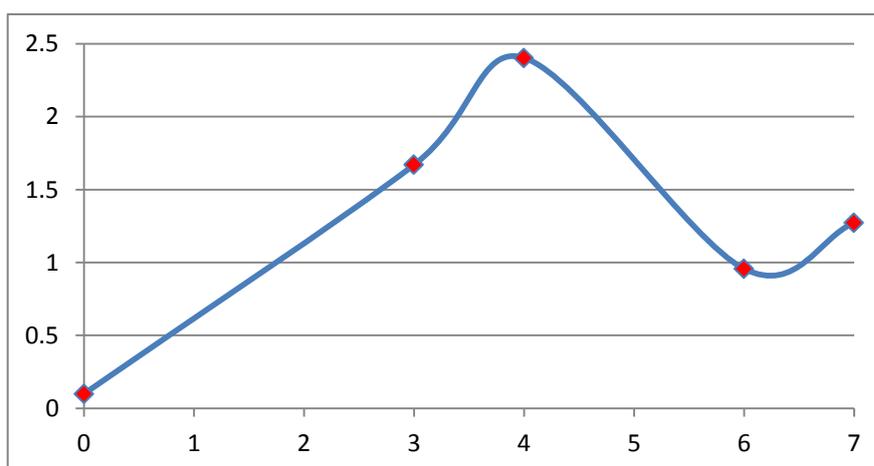


Figura 4.20 Puntos de diseño significativos para la población de conejos en el modelo corregido con error $\sigma^2=1$ y $\hat{\beta}_{10}$

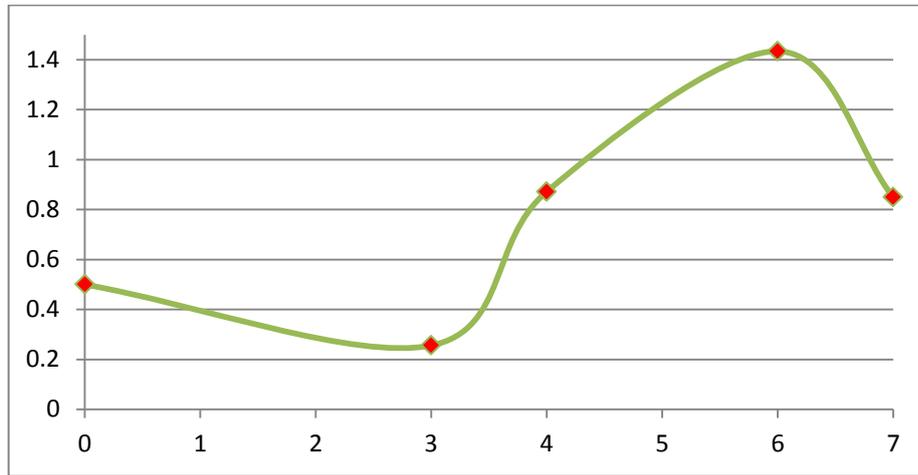


Figura 4.21 Puntos de diseño significativos para la población de conejos en el modelo corregido con error $\sigma^2=1$ y $\hat{\beta}_{10}$

De manera que, vistos algunos casos en los cuales se agrega un factor de error experimental ε , con $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$ y distintos valores para σ^2 , se puede concluir que el criterio A-óptimo utilizado por el software Easy-Fit se comporta de manera aceptable aún considerando la interferencia generada por dicho error experimental.

5. Modelo Biomasa-Sustrato-Producto

Para este capítulo, se cuenta con un conjunto de datos experimentales que describen el proceso de obtención de ácido láctico a partir de un sustrato, y a partir de esos datos se busca proponer un modelo que se ajuste al comportamiento a través del tiempo de los mismos. Utilizando las rutinas del software estadístico Easy-Fit, se planea cubrir todos los pasos del Diseño Estadístico de Experimentos para comprobar la calidad de ajuste del modelo propuesto y, en caso de que sea necesario, proponer parámetros que mejoren el modelo original.

De igual manera se busca determinar los factores más importantes dentro del comportamiento del sistema, así como los puntos del Diseño Óptimo para el modelo y de esa forma probar la importancia del correcto modelamiento matemático a la hora de describir un sistema dinámico práctico; tal como es el caso de la obtención del ácido láctico.

5.1 Aplicación

La modelación matemática es un paso esencial en el desarrollo de un proceso biológico, ya que nos permite crear una representación abstracta de un fenómeno con el objeto de tener un mayor entendimiento del mismo y así ser capaces de estudiar, entender y predecir su comportamiento. Los modelos son un conjunto de relaciones entre las variables de interés en el sistema que está siendo estudiado, se utilizan principalmente para definir los fundamentos de procesos biológicos, químicos o físicos, así como también para planear las condiciones experimentales y la evaluación de los resultados.

Los modelos matemáticos más comunes son los creados respecto al tiempo, sin embargo pueden depender también de otras variables. Para la creación de un modelo se debe establecer una serie de supuestos que describan las relaciones entre las variables a ser estudiadas en el sistema, estas relaciones deben ser medibles ya que describen los aspectos más importantes del sistema, que serán bases del modelo. Posteriormente se definen las variables y los parámetros a ser usados en el modelo.

La piedra angular que impulsa a la biotecnología es la ganancia, es decir, la biotecnología busca producir la máxima cantidad de producto en el menor tiempo posible con el menor costo. Por esta razón es de gran interés obtener modelos que, además de que describan completamente los procesos biológicos, optimicen el proceso, pero que cumplan con la condición de que se obtenga con un bajo costo de producción.

En el caso de la producción de ácido láctico por fermentación de distintos sustratos existen diversos modelos para predecir la influencia de los parámetros de operación de la fermentación en la velocidad de crecimiento celular, en la concentración de células, en la velocidad de uso del sustrato y velocidad de producción de ácido láctico.

Debido a las similitudes entre las condiciones de fermentación de los datos con los que se cuenta, se tomó como punto de partida el modelo desarrollado en 2004 por Altiok [12].

Se estudió la producción de ácido láctico por fermentación reportando un modelo de tres ecuaciones; la ecuación para el crecimiento de biomasa (5.1); partiendo de la ecuación de Monod, la ecuación para la formación de producto descrita por la cinética de Luedeking-Piret (5.2) y una ecuación para el consumo del sustrato (5.4).

La ecuación de Monod relaciona la velocidad de crecimiento del microorganismo (μ) con la concentración del sustrato (S), donde $\mu_{m\acute{a}x}$ es la máxima velocidad de crecimiento alcanzable cuando la concentración del nutriente limitante no es limitante; K_s es conocida como la constante de Monod.

$$\mu = \frac{\mu_{m\acute{a}x}S}{K_s + S}$$

Bajo condiciones de crecimiento optimas y cuando los efectos inhibitorios de sustrato y producto no se presentan, la velocidad de crecimiento celular sigue la bien conocida relación exponencial:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{\mu_{m\acute{a}x}S}{K_s + S}X$$

Esta ecuación implica que la concentración de Biomasa se incrementa con el tiempo independientemente de la disponibilidad de sustrato. Sin embargo, el crecimiento celular sigue una tendencia hiperbólica y existe un límite para alcanzar la máxima concentración celular. Por lo que se introduce una nueva ecuación para describir este comportamiento, donde $X_{m\acute{a}x}$ es la concentración máxima de biomasa.

$$\frac{dX}{dt} = \frac{\mu_{m\acute{a}x}S}{K_s + S}X \left(1 - \frac{X}{X_{m\acute{a}x}}\right) \quad (5.1)$$

Por otra parte, la formación de producto se describe usando la ecuación de Luedeking-Piret, ya que la producción de ácidos orgánicos puede estar asociada o no con el crecimiento microbiano, o tener un comportamiento mixto. Así la formación de producto depende de la concentración de biomasa X y de la velocidad de crecimiento dX/dt .

$$\frac{dP}{dt} = \alpha \frac{dX}{dt} + \beta X \quad (5.2)$$

Por último, la ecuación para expresar el consumo del sustrato como la conversión de sustrato para su mantenimiento, donde m_s es el coeficiente de mantenimiento celular y Y_{ps} es el rendimiento del producto con respecto al sustrato.

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{1}{Y_{ps}} \frac{dP}{dt} - m_s X \quad (5.3)$$

Sin embargo, las estimaciones para el modelo de Altiok no presentaron un ajuste adecuado a los datos experimentales con los que se cuenta, por lo que para determinar los valores de $\mu_{m\acute{a}x}$ y K_s , se buscó una ecuación que lograra un mejor ajuste a los datos.

Para el caso de la formación de biomasa, ahora se cuenta con una ecuación de tipo logístico que expresa la curva que describe el crecimiento microbiano. Donde t_c representa el tiempo donde existe un punto de inflexión en dX/dt y corresponde al tiempo en el cual el incremento en el número de células es igual a un medio de su máximo teórico. De igual manera, se presenta un cambio en la ecuación de conversión de sustrato, donde el consumo de lactosa está en función de la producción de ácido láctico y el parámetro ρ representa el inverso de Y_{PS} .

De esta manera, las ecuaciones a ser consideradas para este caso de estudio son:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{kX_{max}e^{k(t_c-t)}}{(1-e^{k(t_c-t)})^2} \quad (5.4)$$

$$\frac{dP}{dt} = a \frac{dX}{dt} + bX \quad (5.5)$$

$$\frac{dS}{dt} = -\rho \frac{dP}{dt} \quad (5.6)$$

Donde k es la máxima velocidad de crecimiento ($\mu_{m\acute{a}x}$), a es el coeficiente asociado a la fase de crecimiento exponencial (α) y b es el coeficiente asociado a la fase de crecimiento estacionaria (β)

5.2 Modelo Enzima-Sustrato: el Desarrollo

Para el estudio del modelo, se cuenta con datos experimentales así como parámetros iniciales para poder describir completamente el comportamiento del sistema.

La información inicial incluye variables de entrada; valores iniciales para cada una de las ecuaciones que conforman el modelo (Tabla 5.1), al igual que parámetros a ser simulados por el software Easy-Fit para verificar el ajuste del modelo (Tabla 5.2), así como para posteriormente ser estimados para determinar los valores óptimos. El parámetro $X_{m\acute{a}x}$, concentración máxima de biomasa, no se estima en ningún punto,

$$\begin{bmatrix} X_0 \\ P_0 \\ S_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.47 \\ 2.534 \\ 46.758 \end{bmatrix}$$

Tabla 5.1 Valores iniciales, concentraciones de Biomasa, Ácido láctico y Lactosa para el modelo

$$\beta_0 = \begin{bmatrix} k \\ t_c \\ X_{m\acute{a}x} \\ a \\ b \\ \rho \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.1511 \\ 14.4934 \\ 3.9282 \\ 7.31 \\ 0.659 \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

Tabla 5.2 Valores iniciales, parámetros

Los datos experimentales a ser introducidos al software Easy-Fit se presentan en la Tabla 5.3

Datos experimentales para Biomasa, Ácido Láctico y Lactosa			
Tiempo	Biomasa (X)	Ácido Láctico (P)	Lactosa (S)
0	0,47	2,534	46,758
2	0,45	2,954	43,968
4	0,64	4,224	38,174
6	0,73	4,984	36,512
8	0,91	5,812	34,223
10	1,16	6,546	31,34
12	1,64	7,236	28,559
13	1,67	7,979	27,252
14	1,91	8,453	24,086
15	1,96	11,665	21,043
16	2,3	14,953	17,999
17	2,52	17,852	15,37
18	2,74	19,561	12,63
19	2,67	22,498	10,119
20	3,05	25,003	7,965
21	3,17	25,767	6,629
22	3,3	26,936	5,818
23	3,25	27,239	5,011
24	3,2	27,443	4,169

Tabla 5.3 Valores experimentales, concentraciones de Biomasa, Ácido láctico y Lactosa para el modelo

5.3 Simulación y Estimación de Parámetros

Primero se simulan los datos experimentales para probar la calidad del ajuste que supone el modelo con los parámetros de entrada β . De manera que se obtienen los parámetros simulados de β_0 , excepto $X_{máx}$, junto con un intervalo de confianza del 95%

Estimated Params	StdDev	Confidence Intervals < 5 %>	
0.1511000	0.2323160	-0.3151582	0.6173582
14.49340	33.93912	-53.62241	82.60921
7.3100000	53.26228	-99.58738	114.2074
0.6590000	2.956669	-5.275035	6.593035
0.5000000	0.1103090	0.2786099	0.7213901

Se observa que para los cuatro primeros parámetros, los cuales intervienen en las ecuaciones de formación de Biomasa y producto, los intervalos de confianza incluyen al cero, mientras que el intervalo de confianza para el parámetro ρ no incluye el cero, por lo que se puede proponer a éste como el significativo para el modelo.

A continuación presentamos las gráficas comparativas para cada una de las ecuaciones del modelo, contrastando la solución calculada por el software (línea roja) con los datos experimentales (puntos verdes).

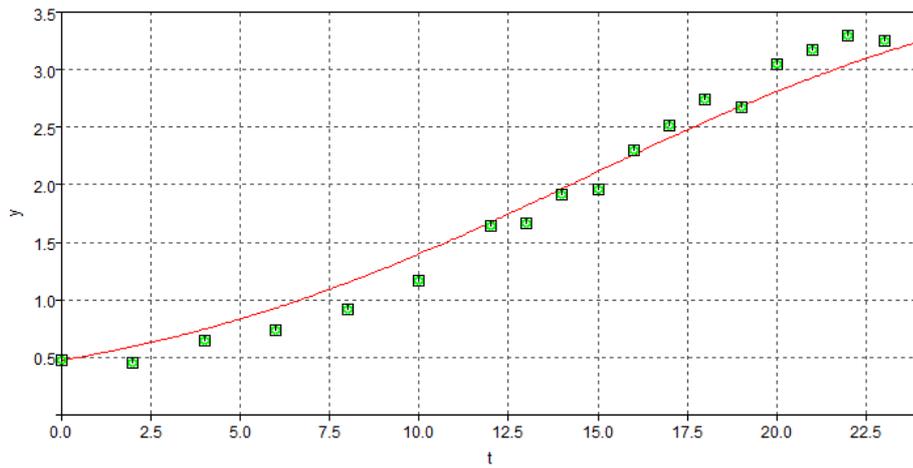


Figura 5.1 Formación de Biomasa, tomando los valores iniciales para k y t_c

Se observa que para la biomasa, los datos experimentales se comportan de manera muy aproximada a la solución calculada por el software (Figura 5.1).

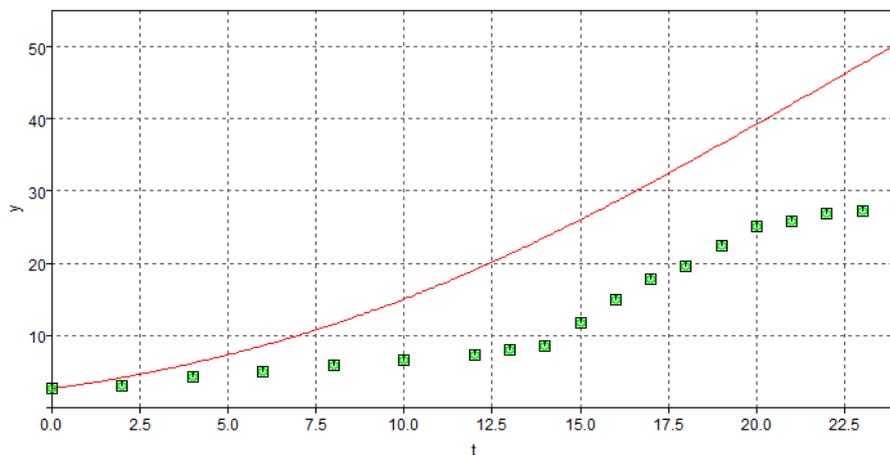


Figura 5.2 Formación de Ácido láctico, tomando los valores iniciales para a y b

Por otra parte, la solución calculada por el software sobre estima la producción del ácido láctico (Figura 5.2). Lo mismo sucede con la conversión de sustrato, éste se reduce a un ritmo mayor al que las capacidades del modelo resuelto suponen (Figura 5.3).

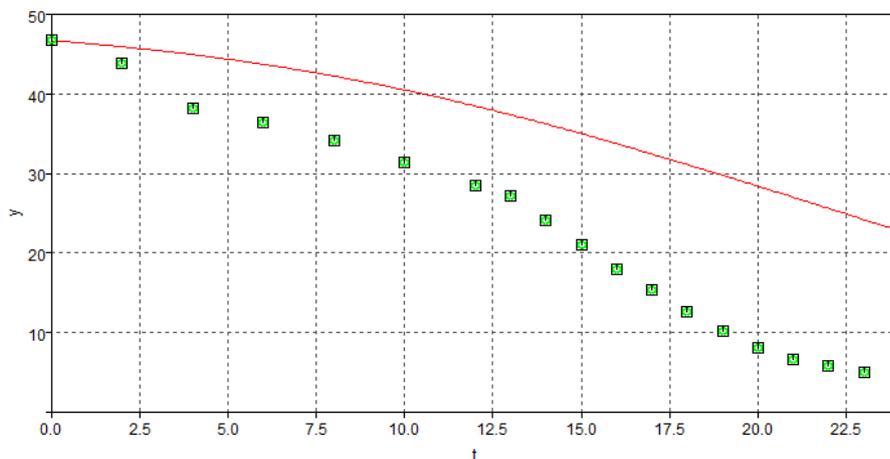


Figura 5.3 Conversión de sustrato (lactosa), tomando los valores iniciales para p

Una vez observadas las gráficas poblacionales, utilizando de nuevo el software Easy-Fit, se realiza una estimación de los parámetros para obtener los valores óptimos $\hat{\beta}$ para los cuales se ajusten mejor los datos a las ecuaciones del modelo.

Realizado el proceso, se cuenta con los siguientes valores para $\hat{\beta}$

Estimated Params	StdDev	Confidence Intervals < 5 %>	
0.1465259	0.3356327E-01	0.7916445E-01	0.2138874
17.73165	4.043170	9.617011	25.84629
13.15314	11.16694	-9.258898	35.56518
-0.2742529	0.6346366	-1.547969	0.9994628
1.938391	0.7051258E-01	1.796872	2.079909

Se observa sobretodo en el caso de k y ρ , fila 1 y fila 5 respectivamente, que la desviación estándar se redujo considerablemente. En el caso de los intervalos de confianza tanto para k , como para t_c y ρ , los intervalos ya no incluyen al cero, por lo que ahora se tienen tres parámetros que pueden ser considerados como significativos.

Este supuesto se confirma con la información adicional que nos proporciona el software. La rutina de Data Fitting, además de estimar nuevos parámetros, proporciona una jerarquía para los parámetros del modelo; basándose en el comportamiento de la matriz de covarianzas de los parámetros, obteniendo los siguientes resultados.

*** Status of parameter values:**

Number	Priority	Parameter value
1	3	0.14652592D+00
2	3	0.17731653D+02
3	1	0.13153143D+02
4	2	-0.27425287D+00
5	3	0.19383906D+01

En la columna Number se presentan la numeración de los parámetros según el orden en el que se ocupan dentro del modelo, mientras que en la columna Priority se presenta el orden en el que los parámetros fueron descartados del modelo según su importancia.

Como se puede observar, el tercer parámetro (a) fue el primero en ser descartado, mientras que el segundo parámetro en ser descartado fue el cuarto (b). Esto nos habla que los parámetros que controlan el comportamiento de la ecuación del ácido láctico no determinan la dinámica del modelo.

De igual forma, se confirma lo que los intervalos de confianza de los parámetros sugerían, los parámetros k (concentración máxima de la biomasa), t_c (tiempo en el cual el incremento en el número de células es igual a un medio de su máximo teórico) y ρ (el inverso del rendimiento del producto con respecto al sustrato) son los parámetros que dominan la dinámica del modelo.

Para completar la rutina de Data Fitting, el software vuelve a estimar solamente los parámetros más significativos

Estimated Params	StdDev	Confidence Intervals < 5 %>	
0.1465259	0.6260633E-02	0.1339734	0.1590785
17.73165	0.2350983E-01	17.68452	17.77879
1.938391	0.3517377E-01	1.867867	2.008914

Se observa que, aunque los valores de los parámetros no fueron modificados, la desviación estándar y la separación entre los intervalos de confianza sí se vieron reducidas. De manera que los valores

$$\hat{\beta} = \begin{bmatrix} k \\ t_c \\ X_{m\acute{a}x} \\ a \\ b \\ \rho \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.1465 \\ 17.7316 \\ 3.9282 \\ 13.1531 \\ -0.2742 \\ 1.9383 \end{bmatrix}$$

Son los valores de los parámetros que proveen el modelo que mejor se ajusta al comportamiento de los datos experimentales.

Si se analizan las gráficas para cada una de las ecuaciones, se puede observar que, aunque el ajuste no es perfecto, la solución calculada por el software se pega más a la dinámica que siguen los datos experimentales.

En el caso de la formación de Biomasa (Figura 5.4), al cambiar los valores de k y t_c , se aprecia un ligero cambio con respecto a la Figura 5.1, donde la solución se separa un poco de los datos experimentales en las unidades de tiempo finales.

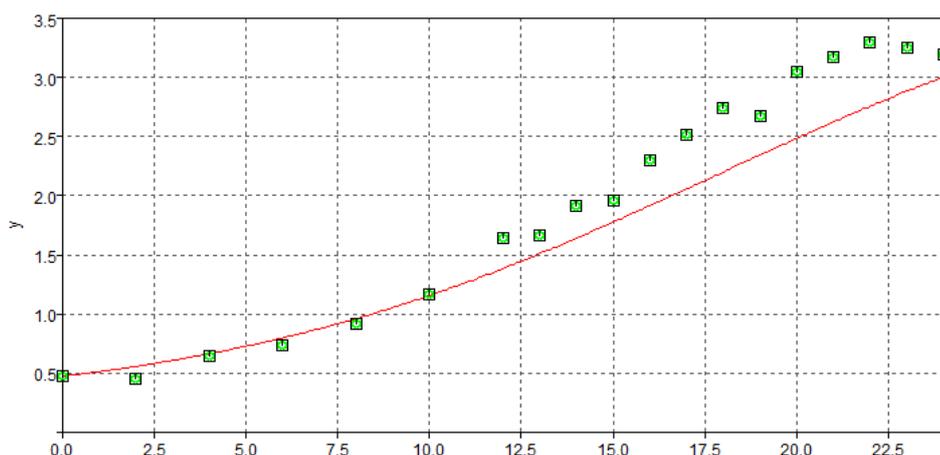


Figura 5.4 Formación de Biomasa, tomando los valores estimados ($\hat{\beta}$) para k y t_c

Por otra parte, en el caso de la formación de ácido láctico (Figura 5.5) y conversión de sustrato (Figura 5.6), la solución se aproxima mejor al comportamiento de los datos experimentales, sobretodo en el caso de la conversión de sustrato; donde a partir de la unidad de tiempo 12 la curva se aproxima casi perfectamente a los datos.

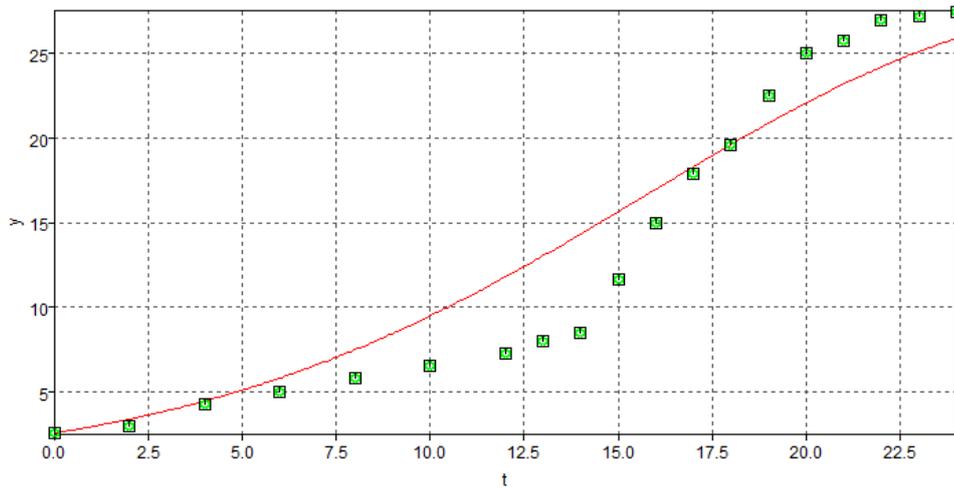


Figura 5.5 Formación de Ácido láctico, tomando los valores estimados ($\hat{\beta}$) para a y b

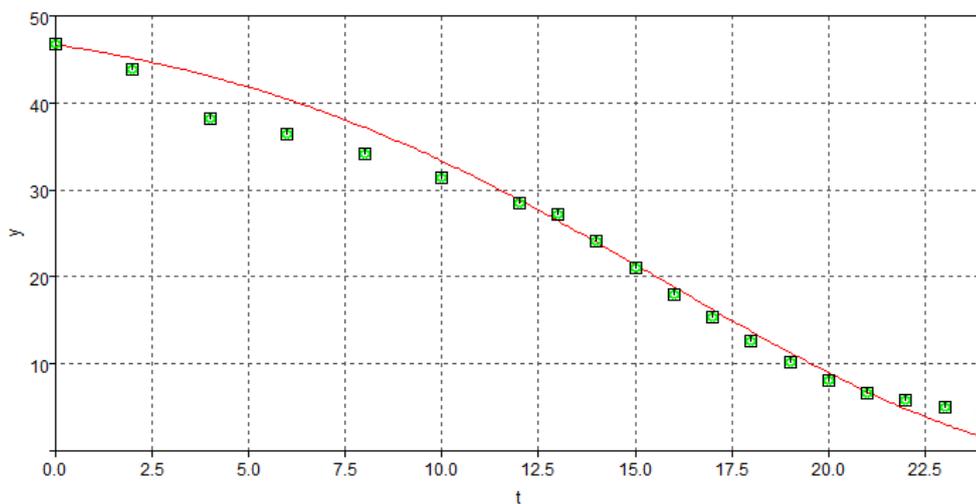


Figura 5.6 Conversión de sustrato (lactosa), tomando los valores estimados ($\hat{\beta}$) para ρ

5.4 Diseño Óptimo

Se procede ahora a localizar los puntos de diseño óptimos para este modelo. Partiendo de los datos experimentales se asigna un factor de peso igual a 1, para cada uno de los 57 puntos de diseño con los que contamos, divididos en las 19 unidades de tiempo para cada una de las ecuaciones del modelo.

Datos experimentales para Biomasa, Ácido Láctico y Lactosa						
Tiempo	Biomasa (X)	Factor de Peso	Ácido Láctico (P)	Factor de Peso	Lactosa (S)	Factor de Peso
0	0,47	1	2,534	1	46,758	1
2	0,45	1	2,954	1	43,968	1
4	0,64	1	4,224	1	38,174	1
6	0,73	1	4,984	1	36,512	1
8	0,91	1	5,812	1	34,223	1
10	1,16	1	6,546	1	31,34	1
12	1,64	1	7,236	1	28,559	1
13	1,67	1	7,979	1	27,252	1
14	1,91	1	8,453	1	24,086	1

Datos experimentales para Biomasa, Ácido Láctico y Lactosa						
Tiempo	Biomasa (X)	Factor de Peso	Ácido Láctico (P)	Factor de Peso	Lactosa (S)	Factor de Peso
15	1,96	1	11,665	1	21,043	1
16	2,3	1	14,953	1	17,999	1
17	2,52	1	17,852	1	15,37	1
18	2,74	1	19,561	1	12,63	1
19	2,67	1	22,498	1	10,119	1
20	3,05	1	25,003	1	7,965	1
21	3,17	1	25,767	1	6,629	1
22	3,3	1	26,936	1	5,818	1
23	3,25	1	27,239	1	5,011	1
24	3,2	1	27,443	1	4,169	1

Tabla 5.4 Valores experimentales, con factor de peso igual a 1

Ahora, utilizando la matriz de covarianzas de los parámetros, calculada al obtener la estimación de parámetros, se obtiene la función objetivo para este modelo, la cual ayudará a calcular el factor de peso real para cada uno de los puntos de diseño.

$$F(X) = 0.10894778 \times 10^{-03}$$

Una vez calculada la función objetivo, el programa otorga los factores de peso óptimos para cada uno de los puntos de diseño.

Datos experimentales para Biomasa, Ácido Láctico y Lactosa						
Tiempo	Biomasa (X)	Factor de Peso	Ácido Láctico (P)	Factor de Peso	Lactosa (S)	Factor de Peso
0	0,47	0,0000175	2,534	0,0000175	46,758	0,0000175
2	0,45	0,0000175	2,954	0,0000175	43,968	0,0000175
4	0,64	0,0000175	4,224	0,0000175	38,174	0,0000175
6	0,73	0,0000175	4,984	0,0000175	36,512	0,0000175
8	0,91	0,0000175	5,812	0,0000175	34,223	0,0000175
10	1,16	0,0000175	6,546	0,0000175	31,34	0,098
12	1,64	0,0000175	7,236	0,0000175	28,559	0,0000175
13	1,67	0,0000175	7,979	0,0000175	27,252	0,0000175
14	1,91	0,0000175	8,453	0,0000175	24,086	0,0000175
15	1,96	0,0000175	11,665	0,0000175	21,043	0,0000175
16	2,3	0,0000175	14,953	0,0000175	17,999	0,0000175
17	2,52	0,0000175	17,852	0,0000175	15,37	0,0000175
18	2,74	0,0000175	19,561	0,0000175	12,63	0,0000175
19	2,67	0,0000175	22,498	0,0000175	10,119	0,162
20	3,05	0,0000175	25,003	0,0773	7,965	0,0000175
21	3,17	0,0000175	25,767	0,0000175	6,629	0,0000175
22	3,3	0,0000175	26,936	0,0000175	5,818	0,0000175
23	3,25	0,0000175	27,239	0,0000175	5,011	0,0000175
24	3,2	0,539	27,443	0,0000175	4,169	0,123

Tabla 5.5 Valores experimentales, con el factor de peso óptimo asignado

Al tener cinco parámetros a estimar, se obtuvieron cinco puntos óptimos de diseño. En el caso de la ecuación de Biomasa se cuenta únicamente con un punto de diseño X (24). De igual manera, para la ecuación de ácido láctico se cuenta únicamente con un punto significativo P (20), mientras que para la ecuación de lactosa contamos con tres puntos; S (10), S (19), S (24).

5.5 Conclusiones y Hallazgos

Partiendo del modelo propuesto por Altiok, se cuenta con tres ecuaciones que buscan describir el proceso de obtención de ácido láctico mediante la fermentación de un sustrato.

$$\frac{dX}{dt} = \frac{kX_{max}e^{k(t_c-t)}}{(1-e^{k(t_c-t)})^2}$$

$$\frac{dP}{dt} = a \frac{dX}{dt} + bX$$

$$\frac{dS}{dt} = -\rho \frac{dP}{dt}$$

Para poder utilizar el modelo, se propusieron ciertos valores para los parámetros que forman parte del modelo, así como valores iniciales para cada una de las ecuaciones.

$$\begin{bmatrix} X_0 \\ P_0 \\ S_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.47 \\ 2.534 \\ 46.758 \end{bmatrix} \quad \beta = \begin{bmatrix} k \\ t_c \\ X_{m\acute{a}x} \\ a \\ b \\ \rho \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.1511 \\ 14.4934 \\ 3.9282 \\ 7.31 \\ 0.659 \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

Se considera como fijo el valor de $X_{m\acute{a}x}$, concentración máxima de la biomasa dentro del modelo. Utilizando la teoría del Diseño de Experimentos, se busca determinar si el modelo describe correctamente la dinámica del sistema que conforman los Datos experimentales con los que se cuenta.

Con el apoyo del software Easy-Fit, se obtuvieron valores que respondían a las ecuaciones del modelo para cada unidad de tiempo. Estos valores, con ayuda de gráficas, fueron comparados con los datos experimentales iniciales, de forma que se pudiera observar si los datos se asemejan a la solución del modelo.

Analizando las gráficas, se observa que la solución al modelo propuesto inicialmente no se comporta de la misma manera a los datos experimentales, por lo que resulta necesario obtener nuevos valores para los parámetros que forman parte del modelo.

Utilizando de nuevo el software Easy-Fit, se estimaron esos nuevos parámetros, de tal forma que el comportamiento de la solución del modelo se asemejara más a la dinámica de los datos experimentales. Esos nuevos valores fueron:

$$\hat{\beta} = \begin{bmatrix} k \\ t_c \\ X_{m\acute{a}x} \\ a \\ b \\ \rho \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.1465 \\ 17.7316 \\ 3.9282 \\ 13.1531 \\ -0.2742 \\ 1.9383 \end{bmatrix}$$

De manera que, respetando las ecuaciones iniciales del modelo, se obtiene un sistema diferente que se comporta de modo más semejante a los datos experimentales.

Por otro lado, el proceso para la obtención de ácido láctico puede volverse muy costoso, por lo que es de interés encontrar formas para reducir el costo para este proceso. Utilizando el diseño óptimo, en específico el criterio A-Óptimo que utiliza el software Easy-Fit, se buscan los puntos más significativos para el modelo, de manera que se pueda controlar la calidad, así como las concentraciones del producto, muestreando en solamente unos puntos en lugar de a lo largo de todo el proceso, de tal forma que el costo del proceso se vea reducido.

Se asignan los pesos óptimos para cada uno de los puntos de diseño, y se localizan los puntos más significativos. El programa determinó cinco puntos de diseño como los más significativos: X (24) para la ecuación de biomasa, P (20) para la ecuación de ácido láctico; S (10), S (19), S (24) para la ecuación de lactosa.

De esta forma los tiempos óptimos para el proceso se encuentran en $t = \{0, 10, 19, 20, 24\}$

En la Tabla 5.6 se aprecian los valores para cada una de las ecuaciones, en las unidades de tiempo óptimas para el modelo.

Datos experimentales para Biomasa, Ácido Láctico y Lactosa						
Tiempo	Biomasa (X)	Factor de Peso	Ácido Láctico (P)	Factor de Peso	Lactosa (S)	Factor de Peso
0	0,47	0,0000175	2,534	0,0000175	46,758	0,0000175
10	1,16	0,0000175	6,546	0,0000175	31,34	0,098
19	2,67	0,0000175	22,498	0,0000175	10,119	0,162
20	3,05	0,0000175	25,003	0,0773	7,965	0,0000175
24	3,2	0,539	27,443	0,0000175	4,169	0,123

Tabla 5.6 Valores iniciales y puntos de diseño con factor de peso significativo

Se observa que los valores simulan de manera aceptable el comportamiento de cada una de las sustancias, por lo que se considerarían suficientes para describir aceptablemente la dinámica del modelo completo (figuras 5.7, 5.8 y 5.9). De manera que, en la práctica, si consideramos esos puntos para analizar el proceso de la obtención de ácido láctico, se obtiene una visión general aceptable del proceso, a un costo menor al que habría si se revisara cada una de las unidades de tiempo.

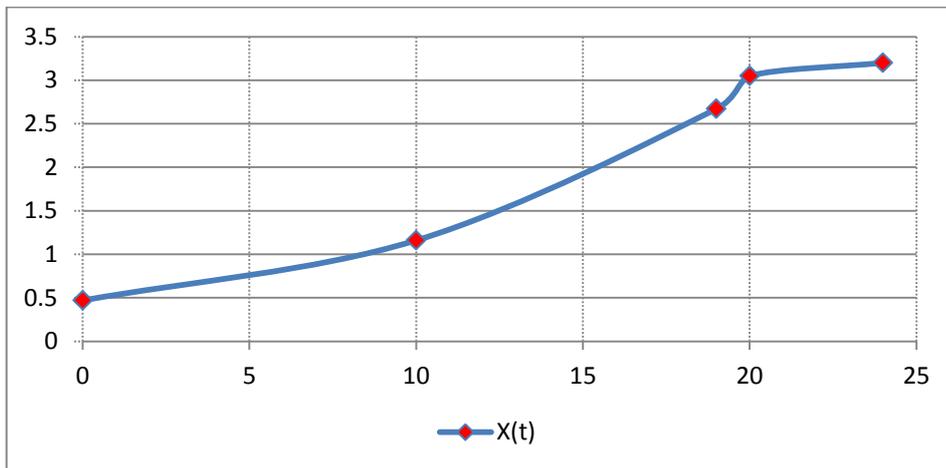


Figura 5.7 Puntos de diseño significativos para la formación de Biomasa

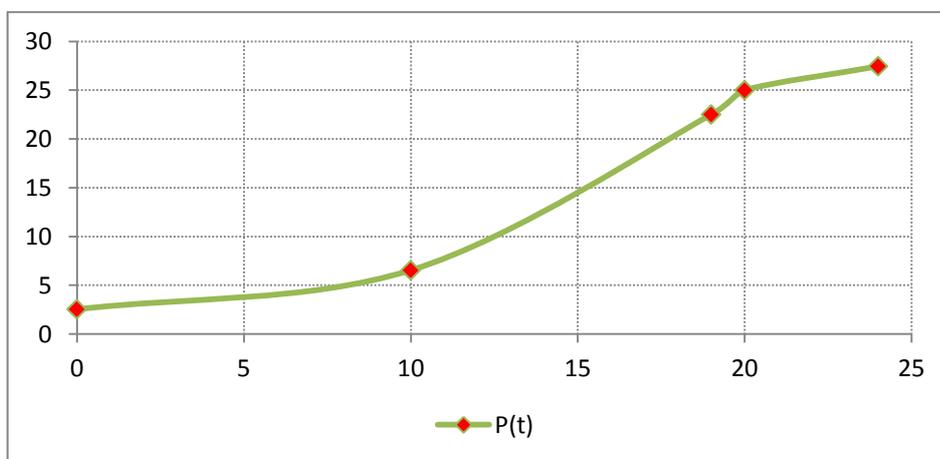


Figura 5.8 Puntos de diseño significativos para la formación de Ácido Láctico

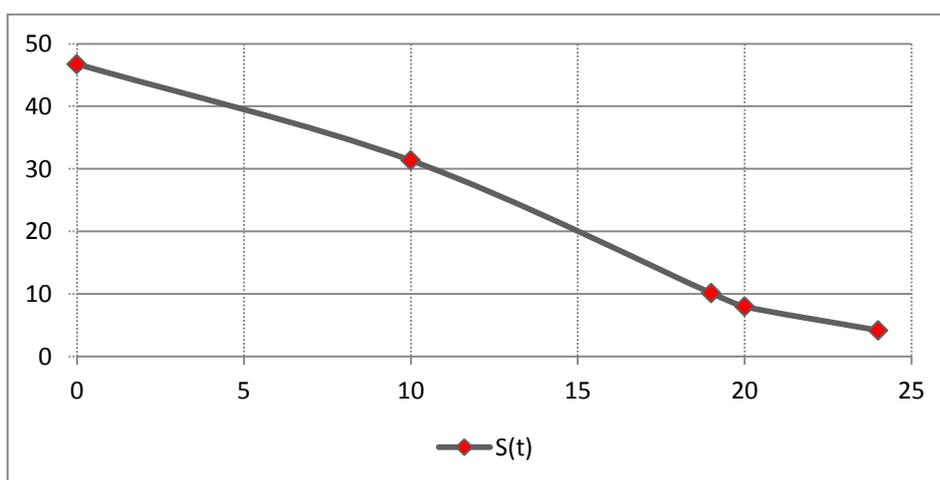


Figura 5.9 Puntos de diseño significativos para la conversión de sustrato (Lactosa)

Sin embargo, el diseño obtenido no es el mejor, puesto que no fue posible modelar correctamente los perfiles de producción de ácido láctico. De esta manera es posible afirmar que los parámetros iniciales propuestos no permiten la obtención de un diseño preciso, puesto que tanto los valores de β como los valores de $\hat{\beta}$ conforman modelos claramente mal especificados; partiendo de la falta de ajuste que se aprecia en las Figuras 5.1 a 5.6, por lo

que se vuelve necesario seguir ajustando el modelo, así como puede ser razonable la consideración y posible inclusión de factores externos que mejoren el ajuste del modelo.

6. Conclusiones

La experimentación juega un papel fundamental en todos los campos de la investigación, el desarrollo tecnológico e innovación. El objetivo de la experimentación es obtener información de calidad que permita desarrollar nuevos productos y procesos, comprender mejor un sistema y tomar decisiones sobre cómo optimizarlo y mejorar su calidad. El planear nos permite prever cuestiones fundamentales para un desarrollo pleno del experimento, como lo son el costo del mismo, el tiempo con el que se cuenta para el desarrollo, y la información que del experimento queremos obtener.

Para cubrir esa etapa de planeación, es común que los experimentadores se apoyen en modelos matemáticos buscando que estos puedan, de forma simple, crear una representación de un fenómeno con el objeto de tener un entendimiento mayor del mismo y así ser capaces de estudiar, entender y predecir su comportamiento.

Ahora bien, la creación de un modelo que describa un experimento no es tarea sencilla; deben cumplirse una serie de pasos y requerimientos para poder contar con la certidumbre de que el modelo proporciona la información suficiente acerca del comportamiento del experimento a estudiarse. Esa serie de pasos a seguir es lo que nos proporciona la planeación experimental, o diseño de experimentos.

El Diseño Experimental crece con base en la necesidad de eliminar el efecto de las variables no controladas para poder discriminar entre los factores que afectan más a la variable respuesta. El problema es que para cubrir esta necesidad, el experimento crece tanto en supuestos como en cuanto al coste de la experimentación. De esta manera nace el Diseño Óptimo de Experimentos, que se enfoca en la obtención de los mejores estimadores posibles al momento de la realización del experimento, es decir, aquellos con menor varianza.

Durante el desarrollo de este trabajo se ha contado con la oportunidad de utilizar por etapas tanto la teoría del Diseño de Experimentos como del Diseño óptimo, para estudiar modelos tanto teóricos como prácticos, incluso con factores no controlados como lo fue con la adición de un error experimental y en cada uno de esos modelos queda patente la importancia de la modelación matemática.

Se puede apreciar de primera mano cómo al agregar un pequeño factor de sesgo, cambia toda la dinámica de un experimento; lo cual puede conducir, en algunos casos, a la simplificación del análisis y la interpretación del mismo. De igual forma, se observa como los factores no controlados complican el estudio de la dinámica de cada uno de los procesos, ya sea que consideremos de forma explícita ese ruido experimental, como en el caso del modelo corregido con error, o que ese ruido forme parte implícitamente de los datos experimentales de un modelo y por ese ruido la calidad de ajuste del modelo se vea comprometida.

Por otro lado, una de las principales observaciones obtenidas en este trabajo, es el comportamiento del diseño A-óptimo con modelos cíclicos, como es el caso del modelo presa depredador sin corregir. El criterio A-óptimo, utilizado por el software Easy-Fit, no

logró proporcionar un diseño óptimo que permitiera esbozar satisfactoriamente la dinámica completa de las poblaciones descritas en el modelo; aunque el software sí proporciona un diseño óptimo y puntos de diseño, se pierde demasiada información entre cada uno de los puntos.

Una posible solución, para poder utilizar el criterio de optimalidad A-óptimo, es la implementación de un muestreo en cada uno de los ciclos que conforman el modelo, aunque finalmente, habrá de tenerse en cuenta el costo de dicho proceso, pues el enfoque principal del diseño óptimo en procesos es la minimización de los costos.

Similarmente, se aprecia la problemática que involucra el considerar como correcto un modelo mal planteado, y partir desde ese modelo. Los modelos mal especificados, provocan situaciones como la sobreestimación o subestimación de los factores que describen la dinámica de un sistema, lo cual se traduce en pérdidas tanto a nivel económico como de recursos.

7. Bibliografía

- [1] Montgomery, Douglas C. Diseño y Análisis de Experimentos, Segunda Edición. Universidad Estatal de Arizona. Editorial Limusa Wiley. 2004.
- [2] Salvador Sánchez, Gerardo. Medición del ruido en la línea de transmisión eléctrica generado por electrodomésticos, para aplicaciones de PLC. Universidad de las Américas Puebla. 2009.
- [3] Pagura, J.; Puigsubirá, C.; Quaglino, M; Hernández, L.; Dianda, D. Diseño óptimo de experimentos en un proceso industrial y su comparación con diseños usuales. Instituto de Investigaciones Teóricas y Aplicadas de la Escuela de Estadística. Facultad de Ciencias Económicas y Estadística. Universidad Nacional de Rosario. 2012.
- [4] Rodríguez Díaz, Juan Manuel. Criterios característicos en diseño óptimo de experimentos. Ediciones Universidad de Salamanca. 2001.
- [5] Ferré, Joan; Rius F. Xavier. Introducción al diseño estadístico de experimentos. Departamento de Química Analítica y Química Orgánica, Universitat Rovira i Virgili.
- [6] Schittkowski, K. Data Fitting and Experimental Design in Dynamical Systems with Easy-Fit Model Design User's Guide Version 5.1. Department of Computer Science, University of Bayreuth, D-95440 Bayreuth, Germany. 2011.
- [7] Blanchard, Paul; Devaney, Robert L.; Hall, Glen R. Differential Equations, Third Edition. Thomson. 2006.
- [8] Castaño Tostado, Eduardo; Domínguez Domínguez, Jorge. Diseño de Experimentos: estrategia y análisis estadístico en ciencia y tecnología, México. 2009.
- [9] Atkinson, A. C.; Donev, A. N.; Tobias, R. D. Optimum Experimental Design, with SAS. Oxford University Press. 2007.
- [10] Schittkowski, K. Experimental Design Tools for Ordinary and Algebraic Differential Equations. Department of Computer Science, University of Bayreuth, Germany. 2007.
- [11] Bonilla Sánchez, Arturo; Zaragoza Badillo, Jorge. La explotación intensiva y extensiva de la naturaleza, Ideas sobre su posible modelación matemática. Instituto de Investigaciones Económicas, Universidad Nacional Autónoma de México. 2011.
- [12] Altioik, Duygu. Kinetic Modelling of Lactic Acid Production from Whey. Izmir Institute of Technology. 2004.
- [13] Arellano Arriaga, Adriana. Evaluación del proceso de obtención y separación de ácido láctico a partir de la fermentación de suero lácteo mediante tecnología de membrana. Posgrado de Alimentos del Centro de la República, Facultad de Química, Universidad Autónoma de Querétaro. 2013.

[14] Rios Castro, Amelia. Caracterización del proceso de obtención y separación de ácido láctico a partir de la fermentación de suero lácteo utilizando la tecnología de membranas. Posgrado de Alimentos del Centro de la República, Facultad de Química, Universidad Autónoma de Querétaro. 2011.