Miscelanea Matemática 23 (1996), 27–38 SMM

Variables elegantes: un método para determinar los parámetros de modelos matemáticos simples en Biología

Pedro Miramontes y Faustino Sánchez Garduño
Departamento de Matemáticas,
Facultad de Ciencias, UNAM

1 Introducción

La ecuación diferencial autónoma

$$\dot{x} = F(x) \tag{1}$$

donde x es un vector n-dimensional y F es un campo vectorial en $\mathbb{R}^n$, aparece con frecuencia describiendo variados procesos naturales. Basta recordar que los conocidos modelos de Malthus, Verhulst y Volterra en dinámica de poblaciones; el de Von Bertalanffy para crecimiento de organismos, el esquema de Belusov-Zhabotinsky en cinética química, tienen esta forma todos ellos.

Dado que en el proceso de modelación que conduce al establecimiento de leyes dinámicas como (1), aparecen parámetros que tienen una interpretación física[1] precisa, el modelo propiamente dicho se expresa como

$$\dot{x} = F(x; \mu) \tag{2}$$

donde μ es un vector de parámetros.

La resolución formal de un problema con condiciones iniciales asociado a la ecuación (1) en el caso escalar no representa dificultad puesto

[1] Aquí la acepción que le estamos dando al término "física", es en el sentido más amplio de la palabra.

que es elemental reducirla a cuadraturas. Sin embargo, las dificultades no cesan al tener la solución de la ecuación diferencial; el investigador requiere además de la solución de la ecuación diferencial (2), del conocimiento de los valores numéricos de μ para poder usar el modelo para propósitos de interpolación y predicción a partir de un juego ($\{t_i, x(t_i)\}$ con $i = 1, \ldots, m$) de observaciones de campo o de laboratorio. Este problema de determinación de parámetros se puede atacar usando métodos de regresión no lineal (véase, por ejemplo, la referencia [5]) lo que puede representar una buena cantidad de tiempo y que normalmente está fuera del alcance del investigador de campo.

El propósito de este trabajo es el de ofrecer un método elemental para resolver el problema planteado en el caso de modelos escalares.

2 Antecedentes

A menudo, la interpretación adecuada de un fenómeno natural sustituye una buena parte del trabajo matemático formal.

El siguiente par de ejemplos, amén de la importancia que tienen en el ámbito en el que surgen, le darán al lector un sabor de la metodología que proponemos. Esta se sistematiza en la Sección 3.

Ejemplo 1 (Crecimiento Isométrico.) *En 1936, Ludwig Von Bertalanffy ([2]), basado en estudios fisiológicos, concluyó que la velocidad instantánea de aumento en el peso de numerosos organismos, está dada por la ecuación diferencial:*

$$\dot{W}(t) = \alpha S(t) - \kappa W(t) \tag{3}$$

donde $W(t), S(t)$, α y κ son: el peso y la superficie corporal a la edad t y las tasas de anabolismo y catabolismo del individuo, respectivamente.

Para el caso particular de peces, se introducen las siguientes magnitudes lineales características de éstos: la talla patrón; $\ell(t)$, la altura máxima; $a(t)$ y el espesor; $e(t)$, a la edad t. La figura 2.1 ilustra cual es cada una de éstas.

Introducimos la siguiente definición:

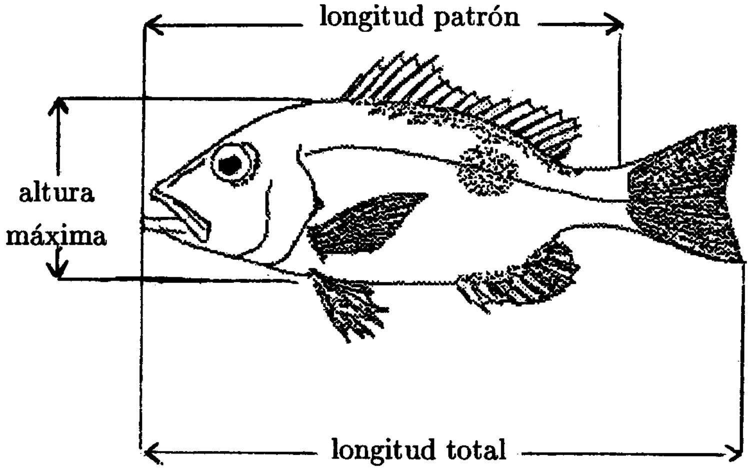

Figura 2.1: Estas son las dimensiones características de un pez

Definición 1 *Por crecimiento isométrico de un pez se entiende que éste crece de manera que las razones*

$$\frac{\ell(t)}{a(t)}, \frac{a(t)}{e(t)} \text{ y } \frac{\ell(t)}{e(t)}, \tag{4}$$

son constantes a lo largo de su vida.

La constancia de los cocientes dados en (4), significa que el crecimiento del pez es tal que su forma se mantiene para todo t: crece en la misma proporción en cada una de sus dimensiones lineales características, como si se tratara de una ampliación fotográfica. En la figura 2.2 se muestra esta forma de crecimiento.

En el caso de crecimento isométrico, puede demostrarse (véanse [2] y [6]) que la ecuación (3) se escribe como:

$$\dot{W}(t) = \eta\,[W(t)]^{2/3} - \kappa\,[W(t)]\,. \tag{5}$$

Igualmente, si el crecimiento es isométrico, entonces se establece (véanse [2] y [6]) que el peso máximo del pez, W_∞, se puede expresar como $W_\infty = (\eta/\kappa)^3$. Usando esta expresión en (5), tal ecuación se reescribe así:

$$\dot{W}(t) = \kappa\,[W(t)]^{2/3}\left\{W_\infty^{1/3} - [W(t)]^{1/3}\right\} \tag{6}$$

Dado que el crecimiento es isométrico, $W(t) = k_1[\ell(t)]^3$, entonces la correspondiente ley de velocidad de aumento de la talla es

$$\dot{\ell}(t) = k[\ell_\infty - \ell(t)] \tag{7}$$

donde ℓ_∞ es la talla máxima del pez.

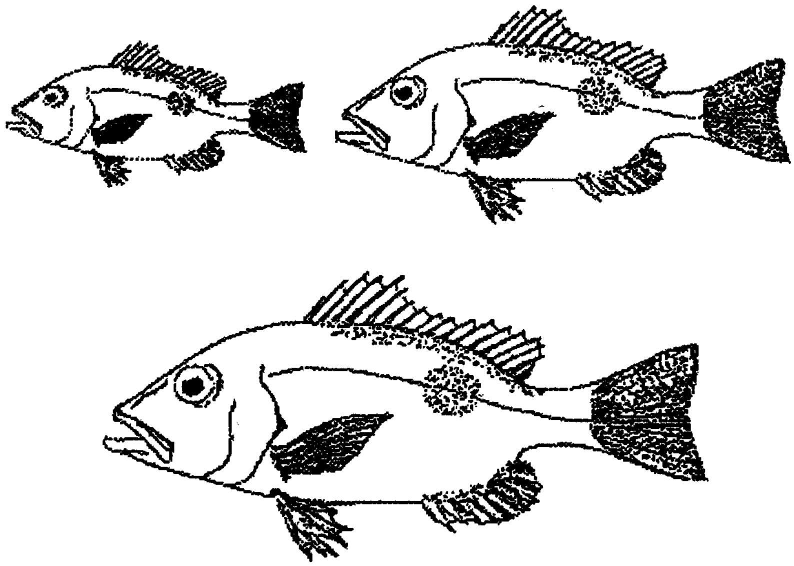

Figura 2.2: Crecimiento isométrico de un pez

Para los fines de predicción e interpolación, además de la solución de la ecuación (6), requerimos de un procedimiento mediante el cual determinemos –a partir de una colección de datos $\{t_i, W(t_i)\}$ de mediciones del peso del pez a distintas edades– los parámetros involucrados.

El siguiente ejercicio es sumamente útil para estos fines:

Ejercicio 1 *Demostrar que la variable*[2] $\mathcal{W}(t) = W_\infty^{1/3} - [W(t)]^{1/3}$ *transforma la ecuación (6) en el modelo malthusiano*

$$\dot{\mathcal{W}}(t) = -\frac{\kappa}{3}\mathcal{W}(t). \tag{8}$$

[2]Nótese que esta variable mide (aunque no en una escala lineal) lo que le falta por aumentar de peso al pez cuando éste tiene la edad t.

Demostración Esta se obtiene inmediatamente derivando la nueva variable con respecto a t y usando (6). En efecto

$$\dot{\mathcal{W}}(t) = -\frac{1}{3}[W(t)]^{-2/3}\dot{W}(t) = -\frac{\kappa}{3}[W(t)]^{-2/3}[W(t)]^{2/3}\left\{W_{\infty}^{1/3} - [W(t)]^{1/3}\right\}$$

$$\dot{\mathcal{W}} = -\frac{\kappa}{3}\left\{W_{\infty}^{1/3} - [W(t)]^{1/3}\right\} = -\frac{\kappa}{3}\mathcal{W}(t).$$

La solución de la ecuación (8) es útil para nuestros propósitos. Esta se obtiene de manera inmediata:

$$\mathcal{W}(t) = \mathcal{W}_0 e^{-(\kappa/3)t} \tag{9}$$

donde $\mathcal{W}_0 = W_{\infty}^{1/3} - W_0^{1/3}$ y W_0 es el peso del pez para $t = 0$. Si ahora escribimos explícitamente $\mathcal{W}(t)$ en (9) según se ha definido y despejamos $W(t)$ se obtiene la solución de la ecuación diferencial (6). Esta es:

$$W(t) = W_{\infty}\left[1 - Ae^{-(\kappa/3t)t}\right]^3 \tag{10}$$

donde $A = (W_{\infty}^{1/3} - W_0^{1/3})/W_{\infty}^{1/3}$.

En la fórmula (10) aparecen tres parámetros: W_{∞}, A y κ. A continuación usamos lo desarrollado para dar un procedimiento que determina su valores a partir de una colección de datos. Empezamos demostrando la existencia de una importante relación lineal.

Ejercicio 2 *Demostrar que existen constantes M y B, ambas positivas, con $M \neq 1$, tales que*

$$[W(t+1)]^{1/3} = M[W(t)]^{1/3} + B, \qquad \forall t. \tag{11}$$

Demostración Se puede demostrar (véanse [3] y [6]) que si la igualdad (9) es cierta para todo $t \in \mathbb{R}^+$, entonces $\mathcal{W}$ decrece a tasa constante por unidad de tiempo, es decir, existe un número real $q > 0$, tal que

$$\frac{\mathcal{W}(t+1) - \mathcal{W}(t)}{\mathcal{W}(t)} = -q \qquad \forall t \tag{12}$$

y κ, y q están relacionadas así

$$(1 - q) = e^{-\frac{\kappa}{3}}. \tag{13}$$

Escribiendo explícitamente W en (12) y haciendo algunas operaciones, se llega a la siguiente relación lineal entre $[W(t+1)]^{1/3}$ y $[W(t)]^{1/3}$:

$$[W(t+1)]^{1/3} = (1-q)[W(t)]^{1/3} + qW_\infty \qquad \forall t \tag{14}$$

luego, tomando $M = (1-q)$ y $B = qW_\infty$, se concluye lo deseado. ■

Obsérvese que (14) es válida para todo t, en particular para $t = t_i$ con $I = 1, \ldots, M$, por lo que, para estos valores de t, se tiene

$$[W(t_i+1)]^{1/3} = M[W(t_i)]^{1/3} + B. \tag{15}$$

Si ahora se usa (13) junto con la pendiente M y la ordenada al origen B de la recta de mínimos cuadrados (15), se obtienen dos de los tres parámetros involucrados:

$$\kappa = -3\ln M \quad \text{y} \quad W_\infty = \frac{B}{1-M} \tag{16}$$

Aprovechando que ya se conoce el valor de W_∞, el parámetro restante (A), se determina usando una segunda regresión lineal. En efecto, después de hacer algunas operaciones en (10), se llega a:

$$\ln\left\{\frac{W_\infty^{1/3} - [W(t)]^{1/3}}{W_\infty^{1/3}}\right\} = M_1 t + B_1\,, \tag{17}$$

donde $M_1 = -\frac{\kappa}{3}$ y $B_1 = \ln A$, la que resulta ser una relación lineal entre el logarítmo natural del término entre llaves y el tiempo t. Con esto, y sin haber integrado directamente la ecuación (6), hemos resuelto nuestro problema.

Para concluir el ejemplo, debemos mencionar que un procedimiento análogo al desarrollado aquí, puede seguirse para determinar tanto la solución de la ecuación (7), como los parámetros (ℓ_∞, y $A = \ell_\infty - l_0$) que aparecen en la relación talla-edad. De hecho, puede probarse (véase [6]) que la variable $\mathcal{L}(t) = \ell_\infty - \ell(t)$ convierte a tal ecuación en una tipo Malthus, de cuya solución se obtiene de manera inmediata aquella de (7).

En [3], el autor usó este esquema para determinar la relación funcional talla-edad del camarón blanco *Penaeus vannamel* a partir de una colección de datos de campo.

Ejemplo 2 (Un Modelo de Crecimiento Alométrico.) *Aquí, en lugar de suponer que las razones (4) son constantes a lo largo de la vida del pez, se supondrá que las siguientes relaciones de alometría se cumplen*

$$a(t) = C_1[\ell(t)]^r \qquad y \qquad e(t) = C_2[\ell(t)]^r\,. \tag{18}$$

donde C_1, C_2 y r son constantes.

Cuando éstas u otras relaciones de alometría se cumplen, ello significa que la forma del pez cambia a lo largo de su vida, es decir, que su crecimiento no se da en la misma proporción en las distintas dimensiones lineales, por ejemplo, bien puede ocurrir que, relativamente, aumente más su talla que su altura.

Denotando por η y κ a las tasas de anabolismo y catabolismo, puede probarse (véase [6]) que si: i) las relaciones (18) se cumplen, ii) $S(t) \propto \ell(t)a(t)$ y iii) $W(t) \propto \ell(t)a(t)e(t)$, entonces la ecuación (3) se escribe como:

$$\dot{W}(t) = \eta[W(t)]^{\frac{r+1}{2r+1}} - \kappa[W(t)] \tag{19}$$

O, si se prefiere, escribamos la correspondiente ley para la velocidad instantánea de aumento en la talla cumpliéndose las igualdades (18). Esta es:

$$\dot{\ell}(t) = E[\ell(t)]^{1-r} - F[\ell(t)] \tag{20}$$

donde E y F son constantes positivas. La talla máxima del pez, ℓ_∞ y los parámetros E, F y r, están relacionados mediante: $\ell_\infty = (E/F)^{1/r}$. Usando esta expresión y factorizando adecuadamente, la ecuación (20) toma la forma:

$$\dot{\ell}(t) = F[\ell(t)]^{1-r}\left\{\ell_\infty^r - [\ell(t)]^r\right\} \tag{21}$$

Continuando con la metodología desarrollada en el Ejemplo 1, procedemos a transformar la ecuación (21) en otra más simple. Esto lo hacemos en el siguiente ejercicio:

Ejercicio 3 *Demostrar que si $\ell(t)$ satisface (21) entonces la velocidad instantánea de cambio de la variable*[3] *$\mathcal{L}(t) = \ell_\infty^r - [\ell(t)]^r$, está dada por la ley malthusiana:*

$$\dot{\mathcal{L}}(t) = -rF\mathcal{L}(t)\,. \tag{22}$$

[3]De nueva cuenta, esta variable tiene una importante interpretación: mide (en una escala no lineal) lo que le falta por crecer al pez cuando éste tiene la edad t. Véase la nota 2.

Demostración Esta se obtiene inmediatamente al derivar $\mathcal{L}$ respecto a t y utilizar (21). En efecto

$$\dot{\mathcal{L}}(t) = -r[\ell(t)]^{r-1}\dot{\ell}(t) = -r[\ell(t)^{r-1}F[\ell(t)]^{1-r}\left\{\ell_\infty^r - [\ell(t)]^r\right\}$$

$$\dot{\mathcal{L}}(t) = -rF\left\{\ell_\infty^r - [\ell(t)]^r\right\} = -rF\mathcal{L}(t)\,.$$

■

Obtener la solución de la ecuación (21) a partir de la correspondiente a (22) resulta ahora inmediato. Esto es así, pues la solución de esta última es:

$$\mathcal{L}(t) = \mathcal{L}_0 e^{-rFt}\,, \tag{23}$$

donde $\mathcal{L}_0 = \ell_\infty^r - \ell_0^r$, siendo ℓ_0 la talla del pez para $t = 0$. Luego si en (23) escribimos explícitamente a $\mathcal{L}(t)$ y hacemos el álgebra necesaria, llegamos a que la solución de (21) es:

$$\ell(t) = \ell_\infty[1 - Ae^{-rFt}]^r, \qquad \forall\, t\,, \tag{24}$$

con $A = (\ell_\infty^r - \ell_0^r)/\ell_\infty^r$.

En esta expresión, aparecen cuatro parámetros: ℓ_∞, A, r y F. Nuestro objetivo ahora, es dar un procedimiento mediante el cual determinemos su valor, a partir de un conjunto de observaciones $\{t_i, \ell(t_i)\}$.

El valor de r se espera pueda determinarse usando alguna de las relaciones de alometría (18). Para los restantes, seguiremos una metodología como la desarrollada en el Ejemplo 1. En particular, (24) se cumple si y sólo sí existe un número real $q > 0$ tal que

$$\frac{\mathcal{L}(t+1) - \mathcal{L}(t)}{\mathcal{L}(t)} = -q \qquad \forall\, t\,.$$

A su vez, si aquí sustituimos a $\mathcal{L}$ tal como se definió, llegamos (véase [6]) a la siguiente relación lineal entre $[\ell(t+1)]^r$ y $[\ell(t)]^r$

$$[\ell(t+1)]^r = M[\ell(t)]^r + B, \qquad \forall\, t\,, \tag{25}$$

donde $M = (1-q) = -e^{rF}$ y $B = q\ell_\infty^r = (1-M)\ell_\infty^r$. De éstas queda determinado el valor de dos de los parámetros. Efectivamente, al usar M y B (la pendiente y la ordenada al origen de la recta de mínimos cuadrados obtenida de (25) cuando en ésta se sustituyen las parejas $(\ell^r(t_i), \ell^r(t_i+1))$ se tiene que

$$F = -\frac{\ln M}{r} \qquad \text{y} \qquad \ell_\infty = \left[\frac{B}{1-M}\right]^{1/r}\,.$$

Con una segunda regresión lineal, obtenemos el valor del parámetro restante (A). Veamos; de la igualdad (25), al hacer un poco de álgebra, se llega a lo siguiente

$$\ln\left\{\frac{\ell_\infty^r - [\ell(t)]^r}{\ell_\infty^r}\right\} = M_1 t + B_1$$

donde $M_1 = -rF$ y $B_1 = \ln A$. De esta última igualdad la determinación de A resulta inmediata, quedando de así concluida nuestra tarea.

El modelo de crecimiento alométrico desarrollado aquí, fue utilizado por Maupomé ([4]) para describir el crecimiento del huachinango del Pacífico *Lutjanus quttatus*. Con anterioridad, Aguilar et al. ([1]) también usaron este modelo en los análisis de los datos de crecimiento del ostión *Crassostrea gigas*. En ambos casos, al comparar los valores teóricos (o del modelo) con los datos de campo, se observó una muy buena coincidencia.

Los ejemplos desarrollados nos enseñan que un científico (en los casos anteriores un biólogo pesquero) con el conocimiento suficiente del fenómeno que estudia, es capaz de obtener información valiosa sin necesidad de resolver formalmente la ecuación diferencial. Basta ser un buen formulador de hipótesis.

En los Ejemplos 1 y 2 éstas son el contenido de los Ejercicios 1 y 3. En ellos se introdujeron variables las que, además de tener una importantísima interpretación fenomenológica, transformaron las ecuaciones originales en otras muy simples facilitando notablemente el trabajo posterior.

En la sección que sigue trataremos de sacar provecho de los ejemplos.

3 El Método

El modelo más simple de la clase (2) es el conocido modelo de Malthus

$$\dot{x}(t) = kx(t)\,, \tag{26}$$

cuya solución es

$$x(t) = x_0 e^{kt} \tag{27}$$

Esta contiene dos parámetros: la tasa de crecimiento instantánea *per cápita* k y el tamaño poblacional en $t = 0$, x_0. La determinación de éstos a partir de una serie de observaciones $\{t_i, x(t_i)\}$ es inmediata a partir de la pendiente M y de la ordenada al origen B de la recta de mínimos cuadrados ajustada a puntos de la forma $(t_i, \ln x(t_i))$.

La idea del método que aquí presentamos es muy simple: ¿es posible reducir la ecuación (2) a la ecuación (26) en el caso escalar?. Cuando la respuesta es afirmativa, diremos que nuestro modelo (2) se ha *malthusianizado.*

Regresemos al modelo escalar

$$\dot{x} = f(X). \tag{28}$$

Buscaremos una transformación $\mathcal{X} = T(x)$ tal que la nueva variable $\mathcal{X}$, llamada *variable elegante*, satisfaga

$$\dot{\mathcal{X}}(t) = k\mathcal{X}(t), \tag{29}$$

para algún número real k. Tal transformación es directa:

$$\frac{d}{dt}T(x) = kT(x) \tag{30}$$

igualdad que implica

$$\mathcal{X}(t) = Ae^{k\int\frac{dx}{f(x)}} \tag{31}$$

donde A es una constante. En realidad aquí tenemos una familia infinita (una para cada valor de A) de Variables Elegantes; sólo necesitamos una: tomemos la más simple, aquella para la que $A = 1$.

La variable elegante existe si la integral en el argumento de la exponencial (31) existe. La constante k se elige de tal manera que dicho argumento sea lo más sencillo posible. La nueva variable $\mathcal{X}$ satisface las siguientes propiedades:

1. Si $\mathcal{X}$ es *elegante*, entonces para cualquier número real a, $\mathcal{N} = a\mathcal{X}$, también lo es.

2. Si $\mathcal{X}$ es *elegante*, entonces para cualquier número real b, $\mathcal{N} = \mathcal{X}^b$, también lo es.

Demostración La demostración de éstas es elemental. Por ejemplo, demostremos la propiedad 2. Si $\mathcal{N} = \mathcal{X}^b$, entonces

$$\dot{\mathcal{N}} = b\mathcal{X}^{b-1}\dot{\mathcal{X}} = b\mathcal{X}^{b-1}k\mathcal{X} = bk\mathcal{X}^b = k'\mathcal{N}$$

La hipótesis de que $\mathcal{X}$ sea elegante, se usó en la segunda igualdad. ∎

De la ecuación (29) se tienen las siguientes dos identidades que serán fundamentales para nuestros propósitos:

$$\mathcal{X}(t+1) - \mathcal{X}(t) = q\mathcal{X}(t) \tag{32}$$

$$\mathcal{X}(t) = \mathcal{X}_0 e^{kt}. \tag{33}$$

Es pertinente aclarar en este momento que los modelos matemáticos en biología suelen tener más de dos parámetros independientes, aunque matemáticamente puedan reducirse a menos. También es importante mencionar que no necesariamente se debe usar (31) para hallar la variable elegante. En efecto, en los Ejemplos 1 y 2 se ve que existe la posibilidad de encontrar tal variable a simple vista. Esto no es desdeñable, sobre todo por el poder interpretativo que tienen la variables elegantes ahí introducidas (véanse las notas 2 y 3).

Ahora estamos en posibilidad de enunciar el algoritmo para hallar los parámetros de (2) en el caso escalar:

Algoritmo.

1. Encuentre una variable elegante asociada al modelo. Ya sea usando (31) o por el conocimiento que se tenga del fenómeno estudiado. De ser posible, use las propiedades 1 y 2 para simplificarla.

2. Utilice (32) hasta llegar a un esquema lineal de la forma

$$h(x(t+l)) = Mh(x(t)) + B. \tag{34}$$

Evidentemente, M y B contienen a los parámetros de la ecuación. La naturaleza de la función h no es importante.

3. Agregue a su tabla de datos la columna $x(t+l)$ y haga un ajuste lineal de la función (34). De esta manera de obtienen dos parámetros al eliminar M y B.

4. Si su modelo aún tiene un parámetro suelto, haga una segunda regresión lineal sobre la transformada logarítmica de (33) y ya ha terminado.

La reducción de una ecuación diferencial del tipo (1) a un sistema lineal mediante una transformación no lineal, ha sido un sueño largamente acariciado por los matemáticos. Aquí hemos demostrado que la solución para este problema en el caso escalar, arroja resultados de gran utilidad en el campo de la determinación de parámetros de la solución de ecuaciones diferenciales derivadas de modelos matemáticos en Biología. Las variables elegantes han sido usadas, con notable éxito, para *malthusianizar* modelos clásicos de la ecología como el de Verhulst y el de Gompertz; así como para determinar los parámetros poblacionales en ellos involucrados. Para mayor información al respecto puede consultarse ([6]).

La extensión de estos resultados para el caso vectorial no ha sido, aún, estudiada.

Referencias

[1] Aguilar Valdéz, F. *Modelos de crecimiento para organismos que guardan proporciones alométricas.* Ciencias del Mar, Universidad Autónoma de Sinaloa. Epoca 1, Año 2, No.6, Julio. 1984.

[2] Bertalanffy, V.L. *Teoría General de los Sistemas.* Fondo de Cultura Económica, México, D.F., 1980.

[3] Gutiérrez Sánchez, J.L. *Matemáticas para las Ciencias Naturales,* Primera Parte. Serie textos, Vínculos Matemáticos, Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias, UNAM. México, D.F., 1985.

[4] Maupomé Carvantes, A. *Aspectos Biológico-Pesqueros del Pargo Lunarejo del Pacífico Lutjanusguttatus,* Steindachner 1869. Tesis de Biólogo, Facultad de Ciencias, UNAM, México, D.F., 198

[5] Fletcher,R. *Practical Methods of Optimization.* John Wiley & Sons, Nueva Delhi, 1991.

[6] Sánchez Garduño, F. *Matemáticas para las Ciencias Naturales,* Segunda Parte. Por aparecer en las Serie Textos de Aportaciones Matemáticas de la Sociedad Matemática Mexicana. México, D.F.