

## Uso de las T.I. en el modelado y simulación en biología teórica

M.C. Armando de Jesús Ruiz Calderón, M.T.I Jesús Cayetano Flores Mercado, M.C.E. Claudia Imelda Ruiz Muñoz

<sup>a</sup>Tecnológico Nacional de México/I.T. Tlalnepantla. Av. Instituto Tecnológico s/n col. La comunidad Tlalnepantla de Baz México c.p. 54070 [aruize@ittla.edu.mx](mailto:aruize@ittla.edu.mx) México

<sup>b</sup>Tecnológico Nacional de México/I.T. Tlalnepantla. Av. Instituto Tecnológico s/n col. La comunidad Tlalnepantla de Baz México c.p. 54070 [jeycay2@hotmail.com](mailto:jeycay2@hotmail.com) México

<sup>c</sup>Tecnológico Nacional de México/I.T. Tlalnepantla. Av. Instituto Tecnológico s/n col. La comunidad Tlalnepantla de Baz México c.p. 54070 [cruiizm@ittla.edu.mx](mailto:cruiizm@ittla.edu.mx) México.

### Resumen

*Las tecnologías de información son herramientas de uso cotidiano en el siglo. XXI. Sin embargo, no son utilizadas en todas las áreas del conocimiento, esto en virtud de que se utilizan para investigación, y además son tecnologías muy avanzadas que requieren muchos conocimientos de informática, como el modelo de Akshay Vashit que utiliza técnicas de clusterización o el modelo Tae-Hyuk que utiliza un modelo de cómputo paralelo, los cuales se utilizan para analizar similitudes genéticas o procesos de especies, por otro lado, los estudios realizados para las dinámicas poblacionales aplican modelos complicados y difíciles de implementar en cómputo como es el caso del modelo de Komosinski, sin embargo utilizar una hoja de cálculo para el modelado y simulación de un modelo presa predador no es común; este trabajo presenta el modelado y simulación de las ecuaciones de Lotka-Volterra utilizando una hoja de cálculo para las iteraciones, encontrando que ajustando la distancia del parámetro  $h$  se ajusta la exactitud del resultado y se comprueba que el uso de una hoja de cálculo es una alternativa para el desarrollo de modelos y simulaciones, que se encuentra al alcance de todos*

**Palabras clave**—Biología Computacional, Biología Teórica, Modelado, Simulación

### Abstract

*Information technologies are tools for everyday use in the 21st century. However, they are not used in all areas of knowledge, this is because they are used for research, and they are also very advanced technologies that require a lot of computer knowledge, such as the Akshay Vashit model that uses clustering techniques or the model Tae-Hyuk that uses a parallel computation model, which are used to analyze opproressive genetic similarities of species, on the other hand, the studies carried out for population dynamics apply complicated and complicated models to implement in computation such as the model of Komosinski, however, using a spreadsheet for modeling and simulating a predatory prey model is not common; This paper presents the modeling and simulation of the Lotka-Volterra equations using a spreadsheet for iterations, finding that adjusting the distance of parameter  $h$  adjusts the accuracy of the result and verifies that the use of a spreadsheet is a alternative for the*

*development of models and simulations, which is available to everyone .*

**Keywords**— Computational biology, Theoretical biology, Modeling, simulation

### 1. INTRODUCCIÓN

Las Tecnologías de la Información ó TI, son herramientas computacionales de uso diario que se utilizan en la sociedad del siglo XXI, sin embargo éstas tecnologías, no son utilizadas en todas las áreas del conocimiento, esto en virtud de que hay algunas de éstas que aún no utilizan a las TI para el trabajo diario, sino que se aplican solamente para investigación o bien se usan tecnologías que no están al alcance de todos por ser muy especializadas y además requieren de fuertes conocimientos en el área de la informática como por ejemplo, los trabajos Akshay Vashist [1] donde presenta un modelo de similitud genética que utiliza la clusterización, la cual es una técnica de estadística multivarida; así mismo el modelo de Tae-Hyuk en su trabajo [2] propone dos estrategias dinámicas de equilibrio de carga para grandes conjuntos de simulaciones de procesos estocásticos de sistemas biológicos; en donde se desarrolla un modelo paralelo, y por esa razón personas que no son del área informática no acceden a éstas tecnologías, lo que provoca que las TI, no sean aprovechadas en todo su potencial.

Un modelo poblacional, es un sistema dinámico, compuesto por una o varias ecuaciones diferenciales, donde cada ecuación representa a cada especie participante en el sistema, y donde el objetivo del modelo, es el de poder predecir, la variación temporal en el número de individuos de ese conjunto de especies. Para esto, se parte de condiciones iniciales predeterminadas, y se asumen unas reglas que representan la interacción entre las especies y su relación con el ecosistema o medio en el que habitan, en términos de los recursos necesarios para la supervivencia.

Existen varios modelos, que se utilizan para describir comportamientos de dinámica de poblaciones como el descrito por W. Back [3] en el que se explica el comportamiento de la coevolución que existe entre dos especies, la primera toma el rol de un predador y la otra toma el rol de una presa, en la que ninguna de las dos especies es antagonista, y continuamente las especies del sistema se van coadaptando entre ellas, tal como lo considera Van Valen en su trabajo [4]; sin embargo W. Back, utiliza para el desarrollo de su trabajo el modelo de “framsticks” propuesto por Komosinski [5] en el que se simula un ambiente tridimensional en el que viven la población de presas y de predadores, pero este modelo es complicado y su implementación no es sencilla puesto que se utilizan para modelado “palitos” que se van ensamblando hasta formar el modelo completo que representa al sistema a simular, y después se realiza la implementación del sistema.

Para poder resolver un sistema de ecuaciones diferenciales como el que se plantea en este trabajo, se utilizará un método numérico para obtener la solución del mismo.

Los métodos numéricos, son métodos aproximados de uso común en la resolución de problemas reales, tanto científicos como técnicos; una de las características de éstos, es que proporcionan una solución aproximada dada mediante una tabla de valores o una gráfica.

El método de Euler es el método más simple para la resolución de ecuaciones diferenciales como el planteado en este trabajo, aunque no es el más utilizado debido al error que se genera al aplicarlo, y que crece considerablemente con el número de iteraciones.

El método de Euler es un caso particular del método del desarrollo en serie de Taylor, trabajando únicamente con el primer orden del paso de integración,  $h$ , y para ello hay que discretizar la derivada, es decir reemplazar  $y'(t)$  por el cociente incremental, de donde se tiene que:

$$y'(t) = \frac{dy}{dt} \approx \frac{y(t+h) - y(t)}{h} \quad (1)$$

Utilizando el valor inicial se tiene

$$\frac{dy}{dt} \approx \frac{y(t_0+h) - y(t_0)}{h} \quad (2)$$

Despejando

$$y(t+h) \approx y(t_0) + h \frac{dy}{dt} \quad (3)$$

A partir de esa ecuación se obtiene

$$y(1) \approx y(0) + h \frac{dy(t_0, y_0)}{dt} \quad (4)$$

Además utilizando  $y_1$  como condición inicial se tiene en este paso

$$y(2) \approx y(1) + h \frac{dy(t_1, y_1)}{dt} \quad (5)$$

Obteniendo de manera general

$$y(i+1) \approx y(i) + h \frac{dy(t_i, y_i)}{dt} \quad (6)$$

Y considerando a  $h$  como el tamaño del incremento de  $x$  [6]

### 1.1 Modelo de estudio propuesto

En el ámbito de la investigación hay otros modelos que representan de manera muy precisa la dinámica de poblaciones, este es el caso del modelo desarrollado de manera independiente por Alfred Lotka y Vito Volterra, en la primera mitad del siglo XX, y que es conocido como el modelo de Lotka-Volterra, el cual describe sistemas acoplados dinámicos y complejos, como un sistema ecológico simple depredador-presa. [7]

Las ecuaciones de Lotka-Volterra se pueden aplicar para modelar una amplia variedad de sistemas.

Para este trabajo se eligió este modelo de dinámica poblacional, porque utiliza ecuaciones que son relativamente simples, pero, muestran comportamientos emergentes no intuitivos y son muy adecuados para introducir los conceptos fundamentales de la dinámica del sistema, como la acumulación y los circuitos de retroalimentación.

El modelo de Lotka-Volterra, es un sistema acoplado de dos ecuaciones diferenciales, de primer orden no lineales, que exhiben un comportamiento oscilatorio complejo a lo largo del tiempo, que pretende responder la dinámica de las poblaciones de un depredador y una presa considerando los siguientes supuestos:

1. El ecosistema está aislado, esto es: no hay migración, no hay otras especies presentes, no hay plagas ni enfermedades.
2. La población de presas en ausencia de depredadores crece de manera exponencial: la velocidad de reproducción es proporcional al número de individuos. Las presas sólo mueren cuando son cazadas por el depredador.
3. La población de depredadores en ausencia de presas decrece de manera exponencial.
4. La población de depredadores afecta a la población de presas haciéndola decrecer de forma proporcional al número de presas y depredadores, esto es: de forma proporcional al número de posibles encuentros entre la presa y el depredador.
5. La población de presas afecta a la de depredadores también de manera proporcional al número de encuentros, pero con distinta constante de proporcionalidad.

Las ecuaciones diferenciales utilizadas para este trabajo, se describen a continuación:

$$\frac{dP}{dt} = \alpha P - \beta PD \quad (7)$$

$$\frac{dD}{dt} = -\gamma D + \delta PD \quad (8)$$

donde  $P$  es el número de presas, en este caso se consideran gacelas como las presas, en  $D$  es el número de depredadores que para este modelo se toman a guepardos.

Los parámetros son constantes positivas que representan:

- $\alpha$ : tasa de crecimiento de las presas.
- $\beta$ : éxito en la caza del depredador.
- $\gamma$ : tasa de decrecimiento de los depredadores.
- $\delta$ : éxito en la caza y cuánto alimenta cazar una presa al depredador.

## 2. OBJETIVO

Utilizar una herramienta de cómputo simple (hoja de cálculo), para el modelado y simulación del modelo de dinámica poblacional de Lotka y Volterra.

### 3. METODOLOGÍA

1. Considerando el método de Euler descrito en la introducción, y utilizando las ecuaciones del modelo de Lotka y Volterra,, (ecuaciones 7 y 8), éstas se reescriben y se obtienen las siguientes expresiones:

$$P(t+h) \approx P(t_o) + h[\alpha P(t_o) - \beta P(t_o)D(t_o)] \text{ con } P(0)=100 \quad (9)$$

$$D(t+h) \approx P(t_o) + h[-\gamma D(t_o) + \delta P(t_o)D(t_o)] \text{ con } D(0)=10 \quad (10)$$

2. Se resuelven las ecuaciones diferenciales graficando la solución del ciclo límite para el intervalo  $0 \leq t \leq 100$
3. Las ecuaciones resultantes, se implementan en una hoja de cálculo y se realizan las iteraciones donde  $k=100$  con variaciones de 0.05 en 0.05 considerando los siguientes parámetros:

Tiempo "t=0" el cual está medido en años

$P_0=100$  gacelas

$D_0=10$  guepardos

$\alpha = 0.1, \beta = 0.002, \gamma = 0.5$  y  $\delta = 0.001$ .

Para un  $h=1$  y  $h=0.05$ .

4. Estas ecuaciones se reescriben como fórmulas en una hoja de cálculo tal y como se muestra en las tablas 1 y 2 para los diferentes valores de  $h$

Tabla.1 Valores que se utilizan para hacer las iteraciones de las ecuaciones del modelo de Lotka- Volterra con  $h=1$

A1=0	B1=100	C1=10
h=1	$B2=B1+(1*((0,1*B1)-(0,002*B1*C1)))$	$C2=C1+(1*((0,001*B1*C1)-(0,5*C1)))$

Tabla 2 Valores que se utilizan para hacer las iteraciones de las ecuaciones del modelo de Lotka- Volterra con  $h=0.05$

A1=0	B1=100	C1=10
h=0.05	$B2=B1+(0.05*((0,1*B1)-(0,002*B1*C1)))$	$C2=C1+(0.05*((0,001*B1*C1)-(0,5*C1)))$

5. Se realizan las iteraciones tal y como se menciona en el paso 2
6. Se grafican los resultados

### 4. RESULTADOS

Al ser reescritas las ecuaciones, y usando la aproximación de Euler y se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$P(t+h) \approx P(t_o) + h[\alpha P(t_o) - \beta P(t_o)D(t_o)] \text{ con } P(0)=100 \quad (9)$$

$$D(t+h) \approx P(t_o) + h[-\gamma D(t_o) + \delta P(t_o)D(t_o)] \text{ con } D(0)=10 \quad (10)$$

Se consideraron los siguientes parámetros:

Tiempo "t=0" y está medido en años,

$P_0=100$  gacelas

$D_0=10$  guepardos

Con parámetros  $\alpha = 0.1, \beta = 0.002, \gamma = 0.5$  y  $\delta = 0.001$ .

Para  $h=1$  y  $h=0.05$

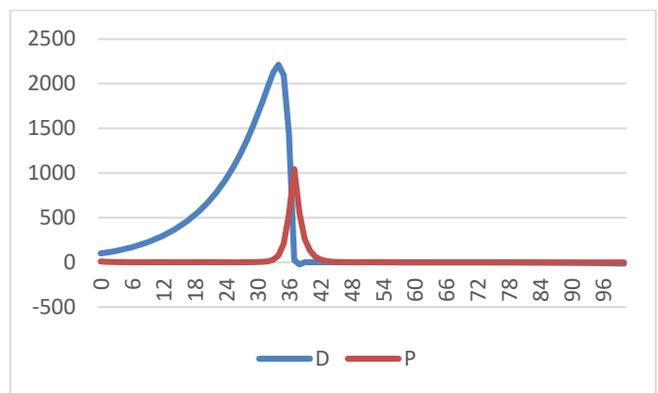
Se colocaron las ecuaciones como fórmulas en una hoja de cálculo obteniéndose los siguientes resultados:

La tabla 3 muestra los valores que se obtienen al realizar la simulación 101 veces esto es desde 0 hasta 100 teniendo un  $h=1$ , no se muestran todos los valores por razones de espacio.

Tabla 3 Resultados de la simulación de la dinámica de poblaciones con el modelo Lotka-Volterra para  $h=1$

h	D	P
0	100	10
1	108	6
2	117,504	3,648
3	128,397091	2,25265459
4	140,658331	1,41556159
.....	.....	.....
.....	.....	.....
97	-11,0625073	7,2451E-16
98	-12,1687581	3,5424E-16
99	-13,3856339	1,7281E-16
100	-14,7241973	8,4091E-17

Fig.1 Gráfica que muestra el comportamiento poblacional del modelo depredador y la presa, representado por las ecuaciones de Lotka-Volterra para  $h=1$



Se puede observar que la gráfica 1 muestra que cuando  $h=1$  tiene una gráfica poco confiable en la que no se puede apreciar con mucho detalle las variaciones de la cantidad de depredadores y presas.

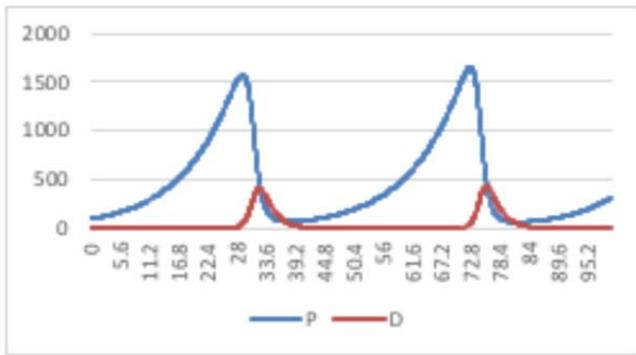
La tabla 4 muestra los valores que se obtienen al realizar la simulación 101 veces, esto es desde un valor de 0 hasta un valor de 100, al igual que en la tabla 3 no se muestran todos

los valores por razones de espacio, se muestran los mas representativos del inicio y del final de la simulación.

Tabla 4 Resultados de la simulación de la dinámica de poblaciones con el modelo Lotka-Volterra para  $h=0.05$

h	D	P
0	100	10
0,05	100,4	9,8
0,1	100,803608	9,604196
0,15	101,210812	9,41249798
.....	.....	.....
.....	.....	.....
99,85	311,158667	0,08477559
99,9	312,711822	0,08397513
99,95	314,272756	0,08318875
100	315,841505	0,08241623

Fig. 2 Gráfica que muestra el comportamiento poblacional del modelo depredador y la presa, representado por las ecuaciones de Lotka-Volterra para  $h=0.05$



La gráfica de la figura 2 muestra con más detalle y confiabilidad la cantidad de presas y depredadores que hay en un momento dado, puesto que se aprecian los ciclos que tienen de depredador y presa a lo largo del tiempo, lo que hace que sea más confiable esta gráfica.

El método utilizado para este trabajo, se basa en aproximaciones mediante la tangente a una función.

Para este caso, las diferencias entre los máximos y mínimos de las funciones que describen la evolución de las especies son considerables (son funciones oscilatorias) y se producen en intervalos de tiempo grande como puede ser  $h=1$  en donde se observa que hay una distorsión grande en los datos, cuando  $h$  se reduce a valores como  $h=0.05$  los valores obtenidos son más reales y tienen menos distorsión

### 3. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

1. Al reducir la longitud de  $h=1$  a  $h=0.05$ , se observa una ganancia de precisión en los resultados, ya que el valor de la aproximación calculada por el método de Euler se

- acerca a la solución exacta del problema de valor inicial.
2. La inexactitud de la aproximación calculada resulta inaceptable cuando  $h$  tiene un valor grande. Por el contrario, al disminuir la longitud de paso, el valor de la aproximación se considera válido.
  3. Esto se explica porque el método de Euler alcanza mayor nivel de convergencia mientras el valor de  $h$  sea mas pequeño; sin embargo, hay que tener en cuenta que, si disminuimos mucho este valor, la hoja electrónica puede perder fiabilidad, pues también tiene límites de cálculo.
  4. El uso de hojas electrónicas como herramienta para el modelado y simulación de sistemas es bastante práctico y resulta productivo, ya que son tecnologías accesibles a todos y cualquier persona tiene acceso a una hoja de cálculo y puede realizar modelos y simulaciones sencillas
  5. El uso de hojas de cálculo, son una buena alternativa para trabajar modelados y simulaciones, por sus características y la gran flexibilidad que tienen para la generación de fórmulas y su facilidad para graficar los resultados obtenidos

### 4. REFERENCIAS

[1] Akshay Vashit, Casimir A. "Ortholog Clustering on a multipartita Graph", Transactions on computational biology and bioinformatics IEEE/ACM Vol 4 no 1 2007.

[2] Tae-Hyuk Ahn and Adrian Sandu. 2010. "Parallel stochastic simulations of budding yeast cell cycle: load balancing strategies and theoretical analysis". ACM International Conference on Bioinformatics and Computational Biology. ACM, New York, NY, USA, 237-246. 2010.

[3] Walter de Back, Edwin D. Jong, Marco Wiering. "Red queen Dynamics in a predator-prey ecosystem" In Proceedings of the 8th annual conference on Genetic and evolutionary computation GECCO '06). ACM, New York, NY, USA, 381-382. 2006

[4] Valen Van, L."A new evolutionary law" Evolutionary Theory vol 1, 1-30. 1973

[5] Komosinski, M. "The Framsticks system: versatile simulator of 3D agents and their evolution. Kybernetes". International Journal of Systems & Cybernetics, 32(1/2), 156–173. 2003.

[6] Alexandrov A.D. Kolmogorov A.N. "La matemática su contenido, métodos y significado", Alianza editorial 2016. ISBN 978-84206-9330-9

[7] Howell, David Vega, Karen Doore, and Paul Fishwick. "Enhancing model interaction with immersive and tangible representations: a case study using the lotka-volterra model." In Proceedings of the 2014 Winter Simulation Conference IEEE Press, Piscataway, NJ, USA, 3572-3583. 2014