

Ajuste y estimación

MODELOS Y SIMULACIÓN DE SISTEMAS BIOLÓGICOS



Contenidos

1

Funciones de ajuste

Matlab y Simulink

3

Estimación de parámetros

Funciones ODE,
Simulink.

2

Ajuste de exponenciales

Datos epidemiológicos

4

Tarea

Poblacional y
epidemiológico.





1

Funciones de ajuste

Funciones de MatLab y modelos Simulink

Funciones disponibles:

En línea de comandos de MatLab

- Polynomial curve fitting
 - `polyfit`

Funciones disponibles:

En línea de comandos de MatLab

- Polynomial curve fitting
 - `polyfit`

```
[p,S,mu] = polyfit(x,y,n)
```

Funciones disponibles:

En línea de comandos de MatLab

- Polynomial curve fitting
 - `polyfit`

```
[p,S,mu] = polyfit(x,y,n)
```

Puntos donde se calcula
(variable independiente)

Valores reales de la
salida

Funciones disponibles:

En línea de comandos de MatLab

- Polynomial curve fitting
 - `polyfit`

`[p, S, mu] = polyfit(x, y, n)`

Grado del
polinomio

Vector con $n+1$ coeficientes del polinomio

$$p(x) = p_1x^n + p_2x^{n-1} + \dots + p_nx + p_{n+1}$$

Funciones disponibles:

En línea de comandos de MatLab

- Polynomial curve fitting
 - `polyfit`

```
[p, s, mu] = polyfit(x, y, n)
```



Estructura con
valores de error

Funciones disponibles:

En línea de comandos de MatLab

- Polynomial curve fitting
 - `polyfit`

```
[p, S, mu] = polyfit(x, y, n)
```



Media y desvío
estándar

Funciones disponibles:

En línea de comandos de MatLab

- Polynomial curve fitting
 - `polyfit`
- Curve Fitting Toolbox:
 - `fit`

Funciones disponibles:

En línea de comandos de MatLab

- Polynomial curve fitting
 - `polyfit`
- Curve Fitting Toolbox:
 - `fit`

```
fitobject = fit(x,y,fitType)
```


Funciones disponibles:

En línea de comandos de MatLab

- Polynomial curve fitting
 - `polyfit`
- Curve Fitting Toolbox:
 - `fit`

```
fitobject = fit(x, y, fitType)
```

Puntos donde se calcula
(variable independiente)



Valores reales de la
salida



Funciones disponibles:

En línea de comandos de MatLab

- Polynomial curve fitting
 - `polyfit`
- Curve Fitting Toolbox:
 - `fit`

```
fitobject = fit(x,y,fitType)
```

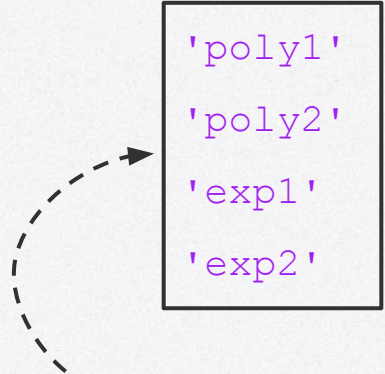
Función o ley que gobierna el comportamiento de la salida
(modelo de los datos)



Funciones disponibles:

En línea de comandos de MatLab

- Polynomial curve fitting
 - `polyfit`
- Curve Fitting Toolbox:
 - `fit`

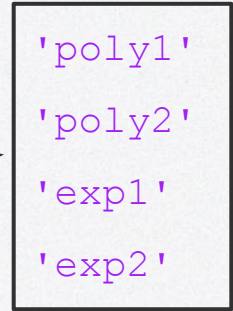


```
fitobject = fit(x,y,fitType)
```


Funciones disponibles:

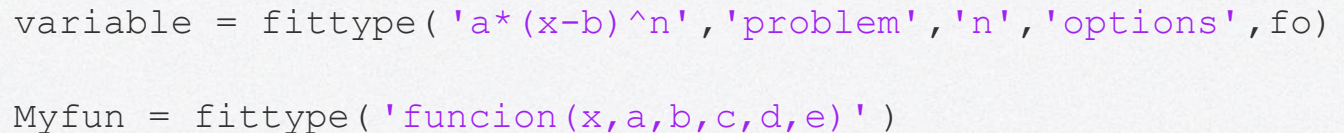
En línea de comandos de MatLab

- Polynomial curve fitting
 - `polyfit`
- Curve Fitting Toolbox:
 - `fit`



```
'poly1'  
'poly2'  
'exp1'  
'exp2'
```

```
fitobject = fit(x,y,fitType)
```



```
variable = fitttype('a*(x-b)^n','problem','n','options',fo)  
Myfun = fitttype('funcion(x,a,b,c,d,e)')
```

Funciones disponibles:

En línea de comandos de MatLab

- Polynomial curve fitting
 - `polyfit`
- Curve Fitting Toolbox:
 - `fit`

```
fitobject = fit(x,y,fitType)
```

Resultados del ajuste. Retorna un objeto `cfi` (al ajustar curvas)



Funciones disponibles:

En línea de comandos de MatLab

- Polynomial curve fitting
 - `polyfit`
- Curve Fitting Toolbox:
 - `fit`
- Optimization Toolbox:
 - `lsqcurvefit`
 - `lsqnonlin`
 - `fmincon`
 - `fminsearch`

Funciones disponibles:

En línea de comandos de MatLab

- Polynomial curve fitting
 - `polyfit`
- Curve Fitting Toolbox:
 - `fit`
- Optimization Toolbox:
 - `lsqcurvefit`
 - `lsqnonlin`
 - `fmincon`
 - `fminsearch`

En Simulink

- Analysis
 - Parameter Estimation
 - New Experiment



2

Ajuste de exponenciales



Sobre datos epidemiológicos

Problema

Se desea ajustar los parámetros de un número k de exponenciales para que ajusten la cantidad de infectados por SARS-CoV-2:

Problema

Se desea ajustar los parámetros de un número k de exponenciales para que ajusten la cantidad de infectados por SARS-CoV-2:

- Descargar planilla de infectados del eva

Problema

Se desea ajustar los parámetros de un número k de exponenciales para que ajusten la cantidad de infectados por SARS-CoV-2:

- Descargar planilla de infectados del eva
- x \longrightarrow número de días desde el 13/03/2020
- y \longrightarrow cantidad de infectados $i_d(t)$

Problema

Se desea ajustar los parámetros de un número k de exponenciales para que ajusten la cantidad de infectados por SARS-CoV-2:

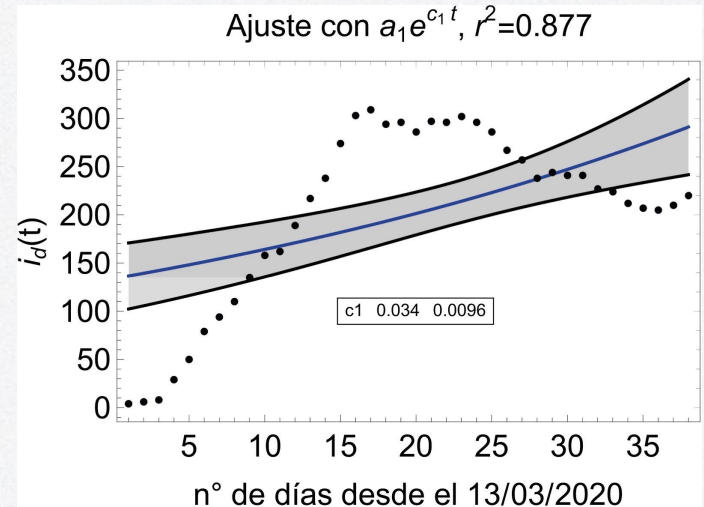
- Descargar planilla de infectados del eva
- x \longrightarrow número de días desde el 13/03/2020
- y \longrightarrow cantidad de infectados $i_d(t)$
- Ajustar los datos para **una** exponencial:

Problema

Se desea ajustar los parámetros de un número k de exponenciales para que ajusten la cantidad de infectados por SARS-CoV-2:

- Descargar planilla de infectados del eva
- x \longrightarrow número de días desde el 13/03/2020
- y \longrightarrow cantidad de infectados $i_d(t)$
- Ajustar los datos para **una** exponencial:

```
[ajuste, gof] = fit(x, y, 'exp1')
```

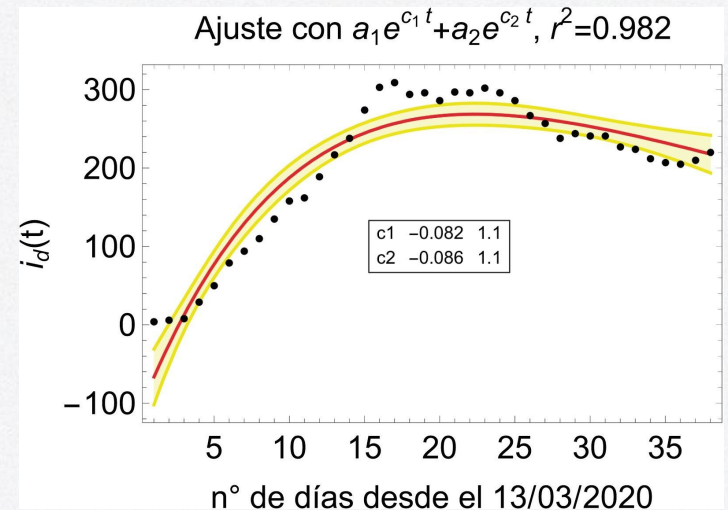


Problema

Se desea ajustar los parámetros de un número k de exponenciales para que ajusten la cantidad de infectados por SARS-CoV-2:

- Descargar planilla de infectados del eva
- x \longrightarrow número de días desde el 13/03/2020
- y \longrightarrow cantidad de infectados $i_d(t)$
- Ajustar los datos para **dos** exponenciales:

```
[ajuste, gof] = fit(x, y, 'exp2')
```



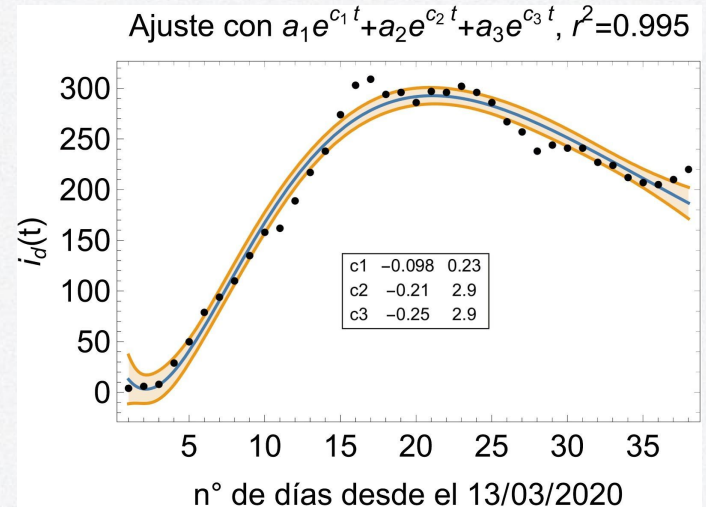
Problema

Se desea ajustar los parámetros de un número k de exponenciales para que ajusten la cantidad de infectados por SARS-CoV-2:

- Descargar planilla de infectados del eva
- x \longrightarrow número de días desde el 13/03/2020
- y \longrightarrow cantidad de infectados $i_d(t)$
- Ajustar los datos para **tres** exponenciales:

```
[ajuste, gof] = fit(x, y, fun_exp3)
```

(ver código en EVA)



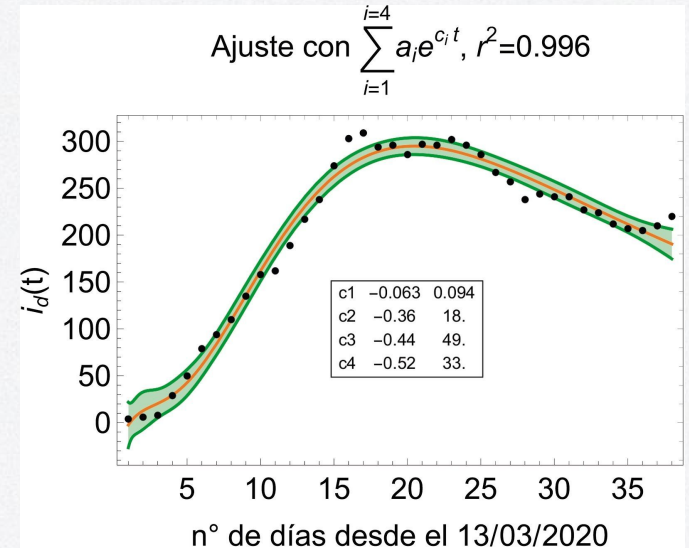
Problema

Se desea ajustar los parámetros de un número k de exponenciales para que ajusten la cantidad de infectados por SARS-CoV-2:

- Descargar planilla de infectados del eva
- x \longrightarrow número de días desde el 13/03/2020
- y \longrightarrow cantidad de infectados $i_d(t)$
- Ajustar los datos para **cuatro** exponenciales:

```
[ajuste, gof] = fit(x, y, fun_exp4)
```

(ver código en EVA)





3

Estimación de parámetros

Funciones ODE y Simulink

Estimación de parámetros para funciones ODE

La caja de herramientas de Optimización de MatLab (Optimization Toolbox) provee funciones para estimar parámetros.

En el caso en que la función a ajustar sea una implementación de tipo ODE (para resolver ecuaciones diferenciales) se seguirán los siguientes pasos:

1. Elegir un resolvidor ODE (por ejemplo `ode45` u `ode15s`) y escribir la función que calcula la derivada (con base en las ec. dif.).
2. Escribir una función objetivo que reciba los valores de los parámetros, resuelva el ODE para esos valores y calcule (y retorne) la función de costos a minimizar, por ej:

$$f(x) = \text{datos_simulados} - \text{datos_medidos}$$

3. Emplear una función de optimización (como `lsqnonlin` o `fmincon`) para minimizar la función costos.

Ejemplo: Estimación de parámetros en Simulink

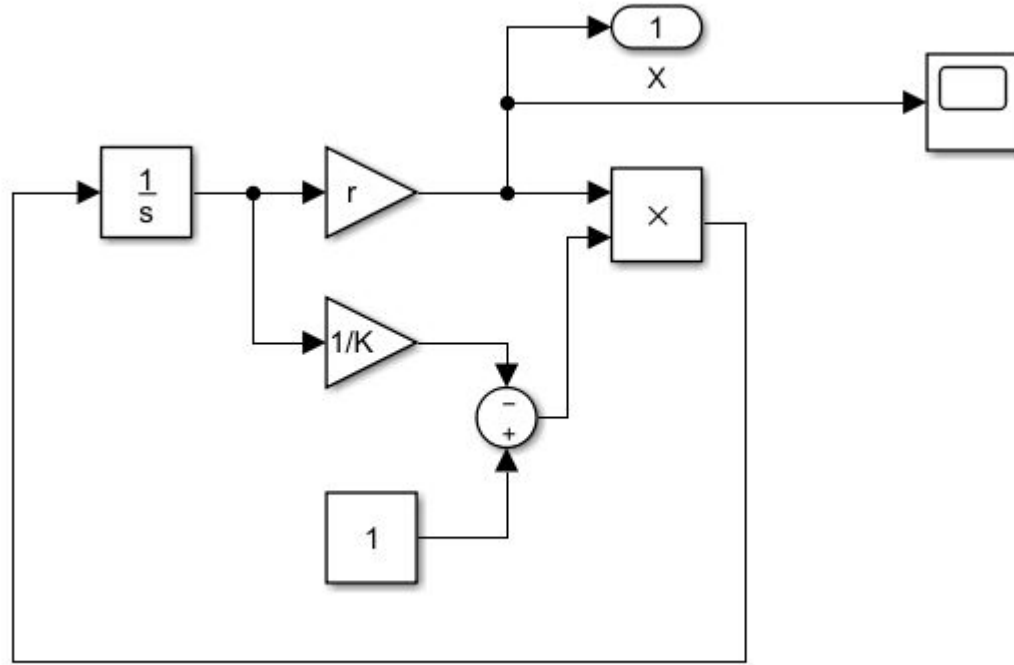




Simulación

Implementar en Simulink la ecuación del modelo:

$$x'(t) = rx \left(1 - \frac{x}{K}\right)$$



$$x'(t) = rx \left(1 - \frac{x}{K}\right)$$

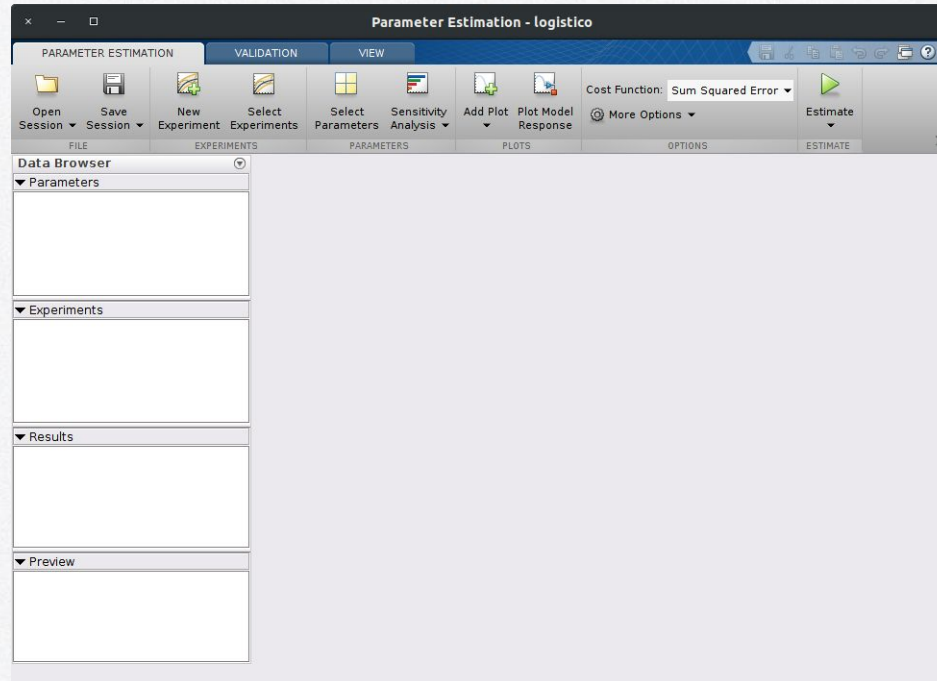
$$x_0 = 1$$

$$K = 50$$

$$r = 0.1$$

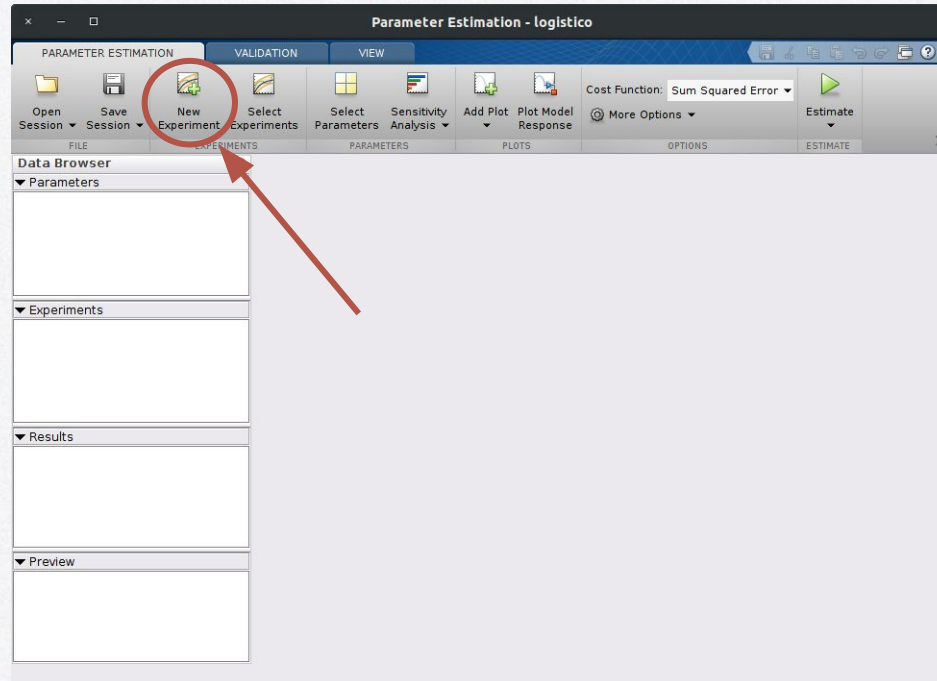
Cómo estimar parámetros:

- Si se hace click en **Analysis** —————> **Parameter Estimation**, aparece la siguiente ventana:



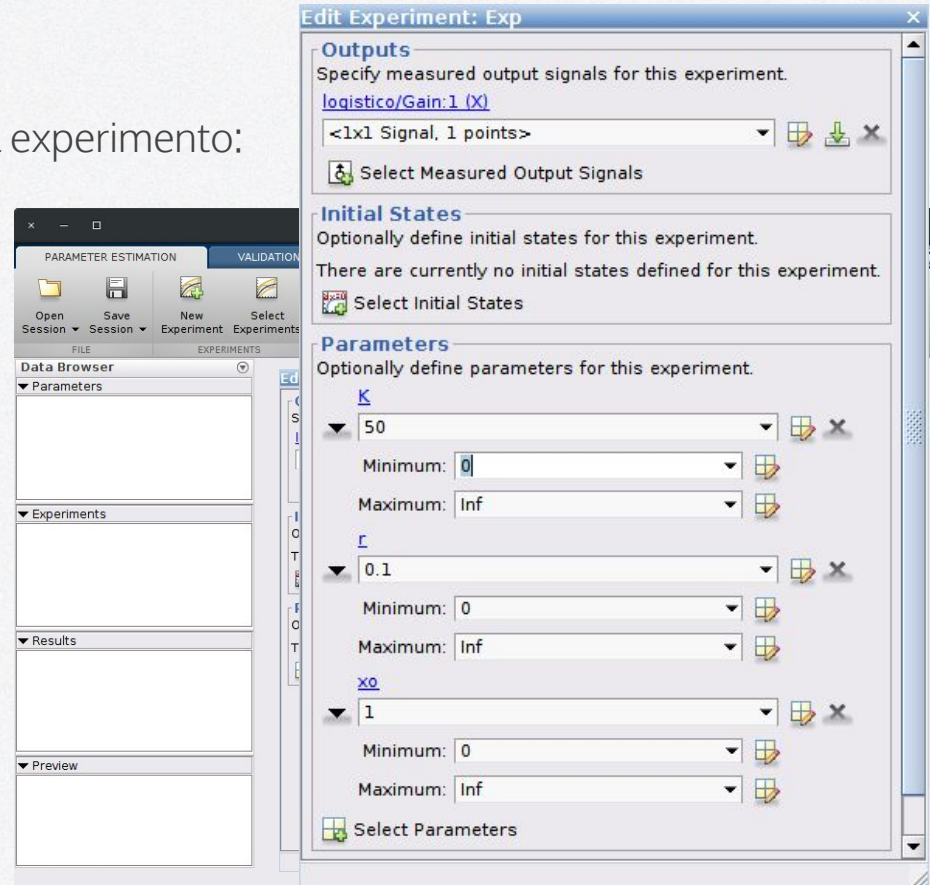
Cómo estimar parámetros:

- Seleccionar **New Experiment**



Cómo estimar parámetros:

- Aparece una ventana para configurar el experimento:
- En outputs vamos a ingresar el nombre de los datos medidos



Cómo estimar parámetros:

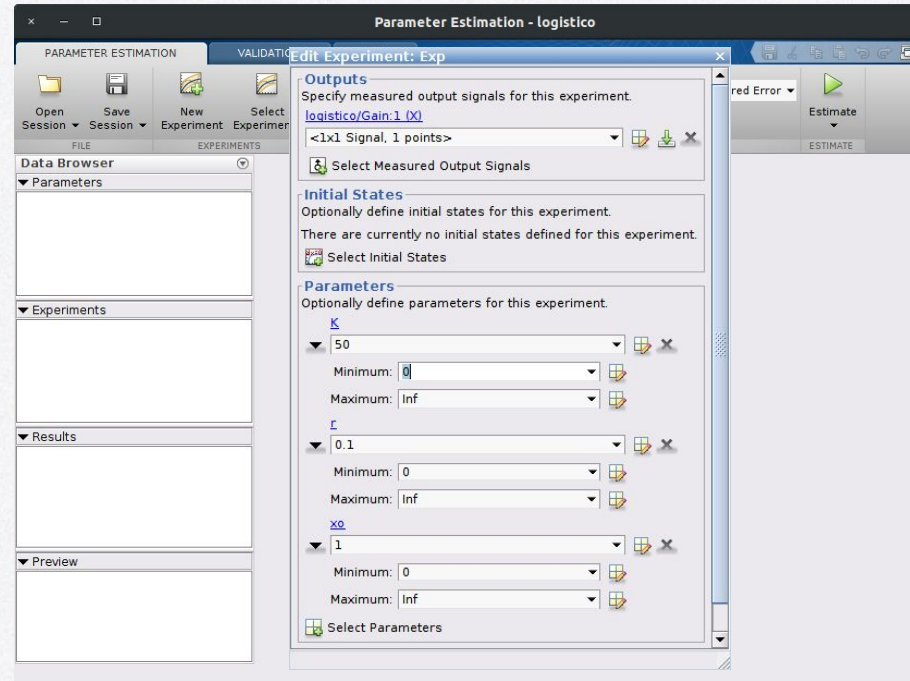
- Aparece una ventana para configurar el experimento:
- En outputs vamos a ingresar el nombre de los datos medidos
- Clickeando sobre **'Select Parameters'** aparece una ventana sobre la que se eligen los parámetros a ajustar

The screenshot displays the 'Parameter Estimation' software interface. The main window has a menu bar with 'PARAMETER ESTIMATION', 'VALIDATION', and 'VIEW'. Below the menu bar is a toolbar with icons for 'Open Session', 'Save Session', 'New Experiment', 'Select Experiments', 'Select Parameters', 'Sensitivity Analysis', 'Add Plot', 'Plot Model Response', 'Cost Function: Sum Squared Error', and 'Estimate'. The 'Data Browser' on the left shows a tree view with 'Parameters', 'Experiments' (containing 'Exp'), 'Results', and 'Preview'. The 'Edit Experiment: Exp' dialog box is open, showing sections for 'Outputs', 'Initial States', and 'Parameters'. The 'Outputs' section has a dropdown menu set to 'logistic/Gain_1 DX1'. The 'Parameters' section has a 'Select Parameters' button. The 'Select model variables' dialog box is also open, showing a table with columns 'Variable', 'Current val...', and 'Used By'. The table contains three rows: 'K' with value 50, 'r' with value 0.1, and 'x0' with value 1. The 'Used By' column shows 'logistic/Gain1' for 'K' and 'r', and 'logistic/Integrator' for 'x0'. The dialog box has 'OK', 'Cancel', and 'Help' buttons at the bottom.

Variable	Current val...	Used By
<input checked="" type="checkbox"/> K	50	logistic/Gain1
<input checked="" type="checkbox"/> r	0.1	logistic/Gain1
<input checked="" type="checkbox"/> x0	1	logistic/Integrator

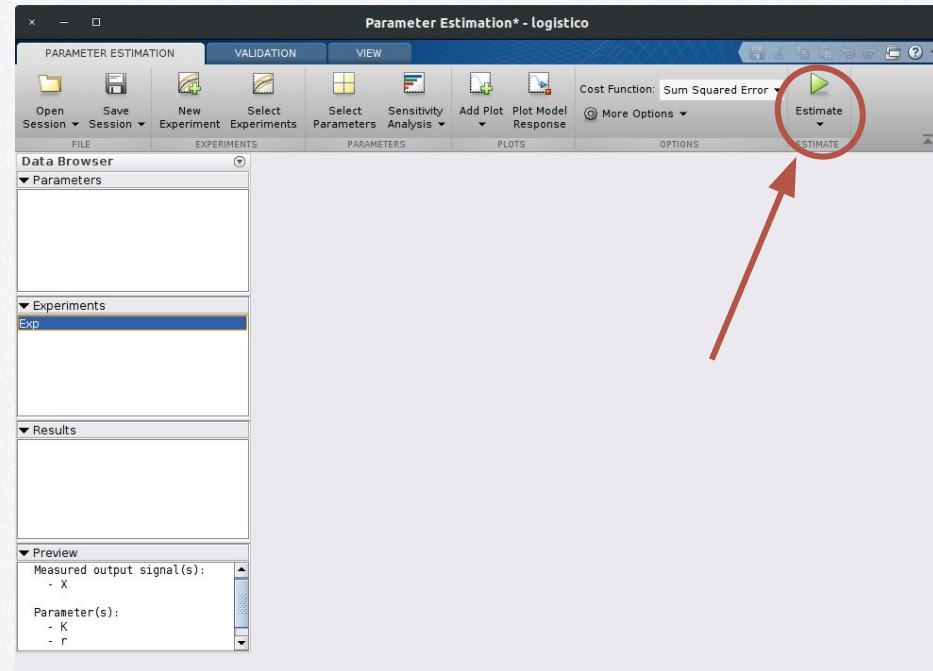
Cómo estimar parámetros:

- Aparece una ventana para configurar el experimento:
- En outputs vamos a ingresar el nombre de los datos medidos
- Clickeando sobre **'Select Parameters'** aparece una ventana sobre la que se eligen los parámetros a ajustar
- Si se conocen límites en los valores de los parámetros, conviene especificarlos.



Cómo estimar parámetros:

- Aparece una ventana para configurar el experimento:
- En outputs vamos a ingresar el nombre de los datos medidos
- Clickeando sobre **'Select Parameters'** aparece una ventana sobre la que se eligen los parámetros a ajustar
- Si se conocen límites en los valores de los parámetros, conviene especificarlos.
- Dar click en **'Estimate'**



Resultados

Parameter Estimation* - logistico - EstimatedParams

PARAMETER ESTIMATION | VALIDATION | ITERATION PLOT | VIEW

Open Session | Save Session | New Experiment | Select Experiments | Select Parameters | Sensitivity Analysis | Add Plot | Plot Model Response | Cost Function: Sum Squared Error | Estimate

FILE | EXPERIMENTS | PARAMETERS | PLOTS | OPTIONS | ESTIMATE

Data Browser

- Parameters
- Experiments
 - Exp
- Results
 - EstimatedParams_31
- Preview
 - Measured output signal(s):
 - X
 - Parameter(s):
 - K
 - r

EstimatedParams

Iteration	Value
0	0
1	0
2	0
3	0
4	0
5	0
6	0
7	0
8	0
9	0
10	0
11	0
12	0
13	0
14	0
15	0
16	0
17	0
18	0
19	0
20	0
21	0
22	0

Estimation Progress Report

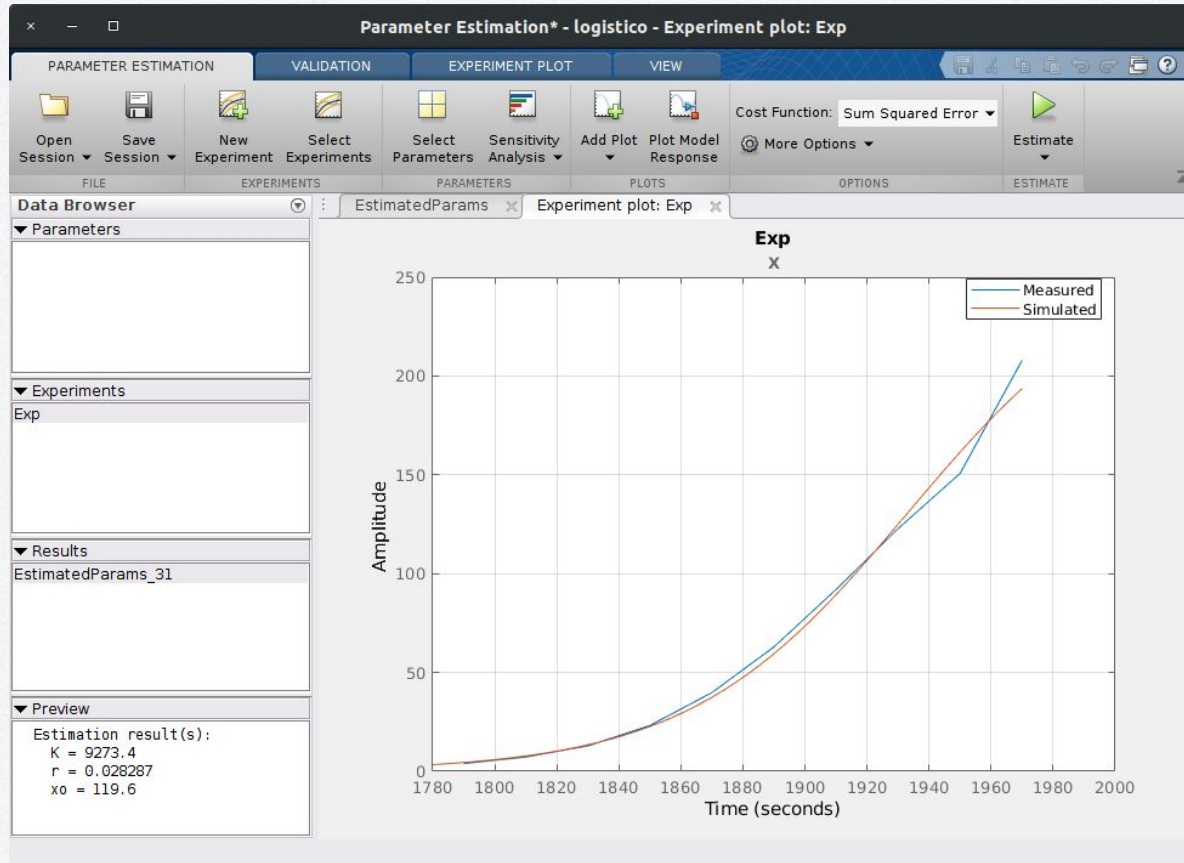
Iterat...	F-count	Exp (Minimize)
0	7	2.0552
1	14	2.0552
2	21	1.0425
3	28	1.0425
4	35	0.8844
5	42	0.8673
6	49	0.8151
7	56	0.6505
8	63	0.4396
9	70	0.4396
10	77	0.2882

Optimization started 02-Sep-2021 16:35:05

Estimation converged, 02-Sep-2021 16:36:39

Save Iteration... | Display Options... | Estimate

Resultados





4

Tarea

Entregas pasadas y futuras

Quedan pendientes las tareas:

- Modelo de Presa-Predador (clásico y con limitación de herbívoros)
- Modelo SIR y variantes



Domingo 11/09 - 23:59hs



Sábado 24/09 - 23:59hs

Quedan pendientes las tareas:



Modelos SIR y variantes

- Plantear los modelos SIR y sus variantes propuestas en el curso
- Llegar a las ecuaciones, discutir los modelos y sus parámetros
- Simular su comportamiento mediante simulink
- Relevar en la literatura el uso de este tipo de modelos en la pandemia COVID19, si son aplicables, y qué aspectos hay que tener en cuenta al momento de aplicarlos en Uruguay

Quedan pendientes las tareas:



Modelos SIR y variantes

- Plantear los modelos SIR y sus variantes propuestas en el curso
- Llegar a las ecuaciones, discutir los modelos y sus parámetros
- Simular su comportamiento mediante simulink
- Relevar en la literatura el uso de este tipo de modelos en la pandemia COVID19, si son aplicables, y qué aspectos hay que tener en cuenta al momento de aplicarlos en Uruguay
 - Utilizar ajuste de parámetros en el modelo usado, con datos de la pandemia en Uruguay (elegir un tiempo acotado, no la totalidad). Ver [datos del GUIAD](#)



Bibliografía

- [1] Peláez, M. et. al. (2020) *Reporte 5: Número de compartimentos involucrados en la dinámica del COVID-19 en Uruguay*. GUIAD-COVID-19. Extraído de <https://guiad-covid.github.io/publication/nota5/>
- [2] The MathWorks, Inc. *Simulink® Design Optimization™ : User's Guide*. Version: R2015b. Extraído de http://www.apmath.spbu.ru/ru/staff/smirnovmn/files/sldo_ug.pdf
- [3] Chaturvedi, D. K. (2017). *Modeling and simulation of systems using MATLAB and Simulink*. CRC press
- [4] Herman, R. (2016). *Solving Differential Equations Using SIMULINK*. Published by RL Herman, 259-268.

¡Gracias!

¿Preguntas?

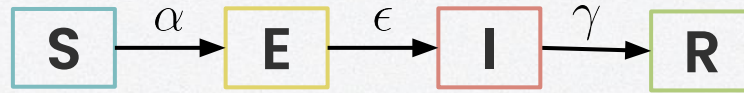
Lucía Lemes

✉ llemes@cup.edu.uy

CREDITS: This presentation template was created by **Slidesgo**, including icons by **Flaticon**, and infographics & images by **Freepik**

Modelo SEIR

Para muchas infecciones, hay un período de incubación significativo durante el cual las personas han sido infectadas pero aún no son infecciosas. Durante este período, el individuo está en el compartimento E (expuesto o latente).



$$\frac{dS}{dt} = -\alpha \frac{SI}{N}$$

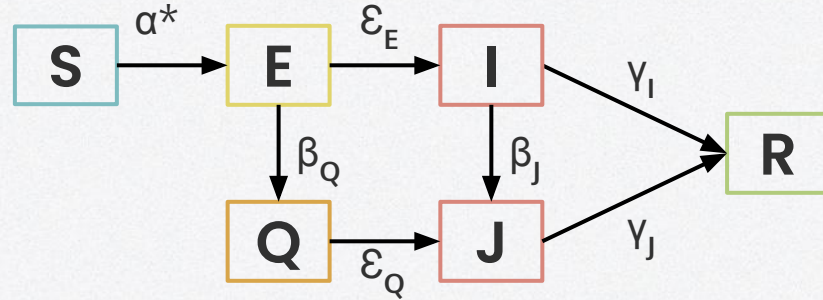
$$\frac{dE}{dt} = \frac{\alpha SI}{N} - \epsilon E$$

$$\frac{dI}{dt} = \epsilon E - \gamma I$$

$$\frac{dR}{dt} = \gamma I$$

ϵ : Tasa per cápita de progresión al estado infeccioso

Ecuaciones del modelo SEQIJR



$$\frac{dS}{dt} = -\alpha \frac{S}{N} (\kappa_E E + \kappa_E \kappa_Q Q + I + \kappa_J J)$$

$$\frac{dE}{dt} = \alpha \frac{S}{N} (\kappa_E E + \kappa_E \kappa_Q Q + I + \kappa_J J) - (\beta_Q + \epsilon_E) E$$

$$\frac{dI}{dt} = \epsilon_E E - (\beta_J + \gamma_I) I$$

$$\frac{dQ}{dt} = \beta_Q E - \epsilon_Q Q$$

$$\frac{dJ}{dt} = \beta_J I + \epsilon_Q Q - \gamma_J J$$

$$\frac{dR}{dt} = \gamma_I I + \gamma_J J$$