

Un nuevo proceso de difusión para modelizar patrones de crecimiento mixto exponencial-Gompertz

Gutiérrez, Ramón; Rico, Nuria; Román, Patricia;
Romero, Desirée y Torres, Francisco

Resumen

En este artículo se propone un nuevo proceso de difusión no homogéneo, el cual permite modelizar patrones de crecimiento que combinan una forma exponencial con una sigmoidal de tipo Gompertz, expresado en términos de variables continuas en el tiempo. La principal innovación de este proceso es que engloba al lognormal y al Gompertz, permitiendo modelizar datos que presentan un comportamiento mixto entre exponencial y Gompertz. Para su obtención, llevada a cabo por diferentes métodos, se ha buscado un proceso asociado a una curva resultante de la combinación de las mencionadas anteriormente. Además se realiza un estudio amplio del mismo, incluyendo sus características principales. Finalmente, se lleva a cabo un estudio inferencial basado en muestreo discreto y se incluye una aplicación sobre datos simulados, mostrándose su utilidad para diferentes tipos de comportamientos.

Keywords: Proceso de difusión lognormal, proceso de difusión Gompertz, modelos de crecimiento

AMS: 60J60, 62M05

1. Introducción

El crecimiento es una característica importante en diversos campos de aplicación, principalmente en biología, ecología y economía. Su estudio y modelización, buscando modelos matemáticos que permitan explicar los distintos comportamientos que se observan y que permitan hacer predicciones, ha sido a lo largo de los últimos años objeto de numerosos esfuerzos. Entre los modelos estocásticos que se han desarrollado para modelizar distintos patrones de crecimiento se pueden destacar el proceso de difusión lognormal y el proceso de difusión Gompertz. El primero de ellos está asociado al modelo de crecimiento malthusiano, esto es, al crecimiento de poblaciones que muestran

una tendencia de tipo exponencial. En cambio, el proceso de difusión Gompertz modeliza situaciones en las cuales el crecimiento es de tipo sigmoidal, es decir monótono creciente, acotado y con un punto de inflexión donde pasa de convexo a cóncavo.

En el estudio del proceso de difusión lognormal caben destacar los trabajos de Capocelli y Ricciardi [1] y Ricciardi [15], donde se obtiene por diversos métodos dicho proceso, así como los trabajos de Gutiérrez y otros [3], [9], [10] y [11], donde se abordan cuestiones tales como la inferencia a partir de muestreo discreto y el estudio de tiempos de primer paso y más recientemente los trabajos [4] y [7] donde se estudian cuestiones relativas a la modelización mediante el proceso con un factor exógeno de tipo polinomial y la estimación y predicción mediante bandas de confianza aproximadas.

En el caso del proceso Gompertz, aunque existen en la literatura una serie de modelos aleatorios que están asociados a distintas curvas de crecimiento tipo Gompertz a los cuales se les denomina procesos Gompertz, nosotros nos referiremos como proceso de difusión Gompertz al introducido por Gutiérrez et al. [8], el cual ha sido estudiado y comparado con otros procesos del mismo tipo como puede verse en [17].

En este artículo proponemos un nuevo proceso asociado a una curva que generaliza la curva de crecimiento exponencial y la curva Gompertz, aunando ambas en una sola ecuación que responde a un tipo de crecimiento mixto, esto es, un crecimiento que presenta una cota transitoria tras la cual el crecimiento es exponencial. Concretamente, partimos de las siguientes curvas de crecimiento:

$$\text{Curva exponencial: } f_1(t) = e^{c(t-t_0)}, \quad t \geq t_0, \quad c \in \mathbb{R}^+$$

$$\text{Curva Gompertz: } f_2(t) = x_0 \exp\left(-\frac{m}{\beta}(e^{-\beta t} - e^{-\beta t_0})\right), \quad t \geq t_0, \quad m > \beta > 0$$

La primera de ellas es una curva no acotada y monótona creciente, mientras que la segunda es una curva sigmoidal que, como ya se ha indicado, es monótona creciente, acotada y con un punto de inflexión.

La combinación de ambas curvas que nosotros proponemos se expresa según la ecuación siguiente:

$$f(t) = x_0 \exp\left(-\frac{m}{\beta}(e^{-\beta t} - e^{-\beta t_0}) + c(t - t_0)\right), \quad t \geq t_0, \quad m > \beta > 0, \quad c \in \mathbb{R}^+ \quad (1)$$

Esta curva es monótona creciente, para los rangos de valores considerados de c , m y β . Es una curva no acotada salvo para el caso $c = 0$, en el cual estaríamos considerando la curva Gompertz y su curvatura depende de los valores que tomen los parámetros β y c :

- Si $\beta \leq 4c$, la curva no tiene cambios de curvatura, es siempre convexa.
- Si $\beta > 4c$, la curva tiene a lo sumo dos cambios de curvatura, donde pasa de ser convexa a cóncava y luego de cóncava a convexa. Los puntos de inflexión se alcanzan en $t = -\frac{1}{\beta} \ln\left(\frac{\beta-2c+\sqrt{\beta(\beta-4c)}}{2m}\right) = t'$ y $t = -\frac{1}{\beta} \ln\left(\frac{\beta-2c-\sqrt{\beta(\beta-4c)}}{2m}\right) = t''$ con $t' < t''$. Luego si $t_0 < t'$, la curva muestra dos cambios de curvatura en el rango de valores considerados de t , si $t' \leq t_0 < t''$, la curva muestra sólo un cambio de curvatura en el rango de valores considerados de t y si $t_0 \geq t''$, la curva es siempre convexa.

Se trata pues de una curva mixta que engloba a la curva exponencial y a la sigmoidal y para la cual se propone asociar un nuevo proceso de difusión al cual denominaremos proceso de difusión mixto lognormal-Gompertz.

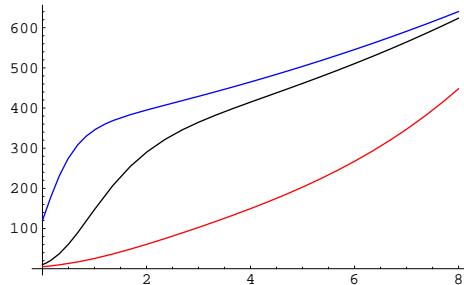


Figura 1: Curvas de crecimiento mixto exponencial-Gompertz.

En la figura 1 se muestran tres ejemplos de curvas de crecimiento mixto exponencial-Gompertz. La curva que no muestra puntos de inflexión tiene parámetros $m = 2$, $\beta = 0.8$ y $c = 0.25$. La curva que presenta dos cambios de curvatura tiene parámetros $m = 5$, $\beta = 1.5$ y $c = 0.1$. Finalmente, la curva que muestra un sólo punto de inflexión tiene parámetros $m = 3$, $\beta = 2.9$ y $c = 0.08$.

2. El nuevo proceso

El objetivo de este apartado es la obtención y estudio del proceso de difusión lognormal-Gompertz. Para obtener dicho proceso se sigue la misma metodología desarrollada por Capocelli y Ricciardi en [1], es decir se busca un proceso cuya solución de la ecuación de difusión adelantada o de Fokker-Planck en ausencia de ruido sea la curva que combina el crecimiento exponencial con el sigmoidal tipo Gompertz.

En primer lugar, se va a introducir este proceso siguiendo las dos líneas siguientes:

- Considerar un modelo estocástico cuya solución, en ausencia de ruido, coincida con la curva deseada.
- Imponer que la función media del proceso obtenido sea dicha curva.

A continuación, se obtendrá el proceso mediante métodos alternativos que están basados en el paso al límite de ciertos modelos discretos estocásticos de crecimiento.

2.1. Obtención del modelo

Siguiendo la metodología desarrollada por Capocelli y Ricciardi en [1], vamos a modificar la media infinitesimal de la ecuación de Fokker-Planck del proceso lognormal, de forma que la solución de la ecuación resultante, en ausencia de ruido y con condición inicial

$$\lim_{t \rightarrow t_0} f(x, t | x_0, t_0) = \delta(x - x_0), \quad (2)$$

sea la curva (1).

Notemos que la ecuación de primer orden

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[(me^{-\beta t} + c)xf \right],$$

con condición inicial (2), tiene por solución

$$f(x, t|x_0, t_0) = \delta \left(x - x_0 \exp \left(\frac{m}{\beta} (e^{-\beta t_0} - e^{-\beta t}) + c(t - t_0) \right) \right),$$

lo cual implica que la población cuyo comportamiento se está modelizando crece de acuerdo con la curva de crecimiento mixto exponencial-Gompertz (1).

Así, partiendo de la ecuación de Fokker-Planck del proceso de difusión lognormal homogéneo

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [mx f] + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [x^2 f],$$

y modificando su media infinitesimal, multiplicándola por el término $e^{-\beta t} + \frac{c}{m}$, se obtiene la ecuación de Fokker-Planck

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[(me^{-\beta t} + c) xf \right] + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [x^2 f], \quad 0 < x < \infty \quad c \in \mathbb{R}^+, \quad m > \beta > 0 \quad (3)$$

de un nuevo proceso, que verifica la condición deseada de que su solución, en ausencia de ruido y condición inicial (2) sea la curva de crecimiento mixto exponencial-Gompertz (1).

Este procedimiento equivale a considerar una determinada función de regulación en la ecuación de Langevin o a la aleatorización de algún parámetro en la ecuación diferencial determinística de crecimiento correspondiente. A continuación, vamos a estudiar ambos planteamientos para el caso que nos ocupa.

Por una parte podemos considerar la función de regulación

$$\varphi(x, t) = 1 - (e^{-\beta t} + c) - \frac{1}{\alpha} \Lambda(t),$$

en la ecuación de Langevin

$$\frac{dx(t)}{dt} = \alpha x(t)[1 - \varphi(x(t), t)],$$

con $\Lambda(t)$ un proceso Gaussiano delta-correlado de media cero y densidad espectral σ^2 .

Esto equivale a considerar la ecuación determinística de crecimiento

$$\frac{dx(t)}{dt} = (me^{-\beta t} + c)x(t)$$

$$x(t_0) = x_0,$$

e, interpretándola como una generalización de la ecuación de crecimiento malthusiano con razón de crecimiento dependiente del tiempo, $r(t) = me^{-\beta t} + c$, reemplazar ésta por la suma de tal función y un ruido $\Lambda(t)$.

La ecuación resultante en ambos casos

$$\frac{dx(t)}{dt} = (me^{-\beta t} + c)x(t) + x(t)\Lambda(t)$$

se puede escribir en forma de ecuación diferencial estocástica

$$dX(t) = (me^{-\beta t} + c)X(t)dt + \sigma X(t)dW(t), \quad (4)$$

donde $W(t)$ representa el proceso Wiener estándar.

La solución de esta ecuación es un proceso de difusión $\{X(t); t \geq t_0\}$ no homogéneo en el tiempo, con valores en \mathbb{R}^+ , momentos infinitesimales

$$\begin{aligned} A_1(x, t) &= h(t)x \\ A_2(x, t) &= \sigma^2 x^2, \end{aligned}$$

y función media (condicionada al instante inicial)

$$E[X(t)|X(t_0) = x_0] = x_0 \exp\left(\int_{t_0}^t h(s)ds\right)$$

donde

$$h(t) = \begin{cases} me^{-\beta t} + c \\ me^{-\beta t} + c + \frac{\sigma^2}{2} \end{cases}$$

según se haya considerado, en la resolución de la ecuación (4), la integral estocástica de Itô o de Stratonovich, respectivamente.

A continuación vamos a comparar el resultado que acabamos de obtener con el que se deduce del método con el que iniciamos este apartado.

Los momentos infinitesimales del proceso de difusión con ecuación de Fokker-Planck (3) son

$$\begin{aligned} A_1(x, t) &= (me^{-\beta t} + c)x \\ A_2(x, t) &= \sigma^2 x^2, \end{aligned}$$

por lo que dicho proceso coincide con el que se ha obtenido anteriormente considerando la solución de Itô de la ecuación diferencial estocástica (4). Además,

$$E[X(t)|X(t_0) = x_0] = x_0 \exp\left(\frac{m}{\beta} (e^{-\beta t_0} - e^{-\beta t}) + c(t - t_0)\right)$$

que se corresponde con una curva del tipo (1), mientras que si consideramos la solución de Stratonovich se tendría

$$E[X(t)|X(t_0) = x_0] = x_0 \exp\left(\frac{\sigma^2}{2}(t - t_0) + \frac{m}{\beta} (e^{-\beta t_0} - e^{-\beta t}) + c(t - t_0)\right)$$

que se puede reparametrizar para obtener la curva del tipo deseado aunando los términos $c(t - t_0)$ y $\frac{\sigma^2}{2}(t - t_0)$ en un sólo sumando de la forma $c'(t - t_0) = \left(c + \frac{\sigma^2}{2}\right)(t - t_0)$

Así pues, teniendo en cuenta los objetivos perseguidos, se define un nuevo proceso de difusión de tipo mixto lognormal-Gompertz asociado a la curva (1) como aquel proceso de difusión $\{X(t); t \geq t_0\}$ con valores en \mathbb{R}^+ y momentos infinitesimales

$$\begin{aligned} A_1(x, t) &= \left(me^{-\beta t} + c \right) x \\ A_2(x, t) &= \sigma^2 x^2, \end{aligned} \quad (5)$$

donde $m > \beta > 0$, $c \in \mathbb{R}^+$ y $\sigma > 0$.

2.2. Obtenciones alternativas del modelo

2.2.1. Obtención a partir de esquemas discretos. La obtención de un proceso de difusión como límite de un recorrido aleatorio parte de la idea de considerar un esquema de crecimiento aleatorio discreto y deducir las ecuaciones de difusión a partir de este esquema mediante la partición sucesiva de los espacios de tiempo y estados. El desarrollo de esta idea puede verse en los trabajos de Cox y Miller [2] y Ricciardi [15] en el caso homogéneo, mientras que el no homogéneo puede verse en [5] y [16].

En el caso del proceso de difusión no homogéneo lognormal-Gompertz el modelo discreto de partida considerado es

$$\begin{aligned} X_{(n+1)\tau} &= X_{n\tau} + Z_{(n+1)\tau}; \quad n = 0, 1, 2, \dots \\ X_0 &= x_0 \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned} P[Z_{(n+1)\tau} = \delta | X_{n\tau} = k\delta] &= \left[\frac{\sigma^2 k^2}{2} + \frac{(me^{-\beta n\tau} + c) k}{2} \right] \tau, \\ P[Z_{(n+1)\tau} = -\delta | X_{n\tau} = k\delta] &= \left[\frac{\sigma^2 k^2}{2} - \frac{(me^{-\beta n\tau} + c) k}{2} \right] \tau \quad y \\ P[Z_{(n+1)\tau} = 0 | X_{n\tau} = k\delta] &= 1 - \sigma^2 k^2 \tau, \end{aligned}$$

bajo las condiciones $| (me^{-\beta t} + c) | \leq j\sigma^2$, $\forall j \in \mathbb{N}$ y $\sigma^2 j^2 < \frac{1}{\tau}$.

2.2.2. Obtención a partir de modelos discretos de crecimiento. La obtención del proceso partiendo de esquemas discretos de crecimiento de poblaciones se lleva a cabo mediante un procedimiento de aleatorización y paso al límite de modelos de crecimiento que generalizan el modelo malthusiano. Un desarrollo análogo al propuesto en este apartado, pero referido a un proceso de difusión no homogéneo de naturaleza distinta, se puede encontrar en el trabajo de Gutiérrez y otros [6]. Para el caso general de un proceso de difusión no homogéneo puede verse el trabajo de Rico [16].

El modelo de partida, **Modelo I**, es

$$\begin{aligned} Y_{(n+1)\tau} - Y_{n\tau} &= \left(m e^{-\beta(n\tau)} + c \right) \tau Y_{n\tau}; \quad n = 0, 1, \dots \\ Y_0 &= x_0 \end{aligned} \quad (6)$$

A partir de este modelo, tomando límites cuando $n \rightarrow \infty$ y $\tau \rightarrow 0$, bajo la condición $n\tau = t$ constante, se obtiene una ecuación diferencial cuya solución podemos discretizar, obteniendo el que llamaremos **Modelo II**

$$X_{(n+1)\tau} - X_{n\tau} = X_{n\tau} \left(e^{\frac{-m\tau}{\beta} e^{-\beta\lambda_n} + c} - 1 \right); \quad n\tau \leq \lambda_n \leq (n+1)\tau. \quad (7)$$

A partir del **Modelo I** y del **Modelo II** se obtienen, en el límite, dos procesos de difusión diferentes, con una relación entre sus momentos infinitesimales, referidos al mismo modelo de crecimiento y que se unifican en el proceso de difusión mixto lognormal-Gompertz.

3. Características del proceso

La función de densidad de transición del proceso puede obtenerse buscando una transformación $t' = \phi(t)$, $x' = \psi(x, t)$ que cambie la ecuación de Kolmogorov o atrasada en la del proceso Wiener. De hecho, los momentos infinitesimales (5) cumplen las condiciones del teorema 1 de Ricciardi [14] y por tanto dicha transformación existe. Concretamente, salvo constantes, la transformación es

$$\phi(t) = t \quad \psi(x, t) = \frac{1}{\sigma} \left(\ln x + \frac{m}{\beta} e^{-\beta t} - \left(c - \frac{\sigma^2}{2} \right) t \right),$$

que cambia el espacio de estados \mathbb{R}^+ en \mathbb{R} y nos permite obtener la función de densidad de transición del proceso considerado:

$$f(x, t|y, s) = \frac{1}{x \sqrt{2\pi\sigma^2(t-s)}} \exp \left(\frac{-\left[\ln \left(\frac{x}{y} \right) + \frac{m}{\beta} (e^{-\beta t} - e^{-\beta s}) - \left(c - \frac{\sigma^2}{2} \right) (t-s) \right]^2}{2(t-s)\sigma^2} \right)$$

que se corresponde con una distribución lognormal, esto es, para $t > s$:

$$X(t)|X(s) = y \sim \Lambda_1 \left[\ln y - \frac{m}{\beta} (e^{-\beta t} - e^{-\beta s}) + \left(c - \frac{\sigma^2}{2} \right) (t-s); (t-s)\sigma^2 \right]. \quad (8)$$

Observemos que, puesto que el proceso que estamos considerando es markoviano, el cálculo de las distribuciones finito-dimensionales depende sólo de la distribución inicial y de las transiciones. Conocidas estas últimas, para obtener las distribuciones finito-dimensionales habrá que imponer cuál es la distribución inicial. En el caso de considerar distribución inicial degenerada, esto es, $P[X(t_0) = x_0] = 1$, o distribución inicial lognormal, $X(t) \sim \Lambda(\mu_0; \sigma_0^2)$ se puede asegurar que las distribuciones finito-dimensionales son lognormales.

A continuación describimos las principales características del proceso, centrándonos particularmente en tres de las que se emplean con mayor frecuencia en la práctica, especialmente para predicción. Estas características son la media, la moda y la función de cuantiles, cuyas expresiones pueden formularse conjuntamente para las dos distribuciones iniciales indicadas.

- Función media:

$$m(t) = E[X(t_0)] \exp\left(\frac{m}{\beta} [e^{-\beta t_0} - e^{-\beta t}] + c(t - t_0)\right).$$

- Función moda:

$$M_o(t) = Moda[X(t_0)] \exp\left(\frac{m}{\beta} [e^{-\beta t_0} - e^{-\beta t}] + c(t - t_0)\right) \exp\left(-\frac{3\sigma^2}{2}(t - t_0)\right).$$

- Función de cuantiles:

$$\begin{aligned} C_\alpha(t) &= Cuantil_\alpha[X(t_0)] \exp\left(\frac{m}{\beta} [e^{-\beta t_0} - e^{-\beta t}] + c(t - t_0)\right) \\ &\times \exp\left(-\frac{\sigma^2}{2}(t - t_0) + z_{1-\alpha} [\sqrt{\sigma^2(t - t_0) + Var[\ln(X(t_0))]} - \sqrt{Var[\ln(X(t_0))]}]\right). \end{aligned}$$

donde $z_{1-\alpha}$ es el valor de una normal estándar que deja a la derecha una probabilidad de $1 - \alpha$.

4. Simulación

Una vez obtenido el nuevo proceso de difusión mixto asociado a la curva (1), y estudiadas sus principales características, a continuación vamos a realizar simulaciones de sus trayectorias con el fin de visualizar mejor el comportamiento del proceso. Para ello nos hemos basado en los algoritmos derivados de la resolución numérica de ecuaciones diferenciales estocásticas (Kloeden et al. [12], Rao et al. [13]).

El algoritmo de simulación para el proceso de difusión lognormal-Gompertz es:

$$\begin{aligned} x_{n+1} = &x_n \left[1 + h \left(\left\{ me^{-\beta t_n} + c \right\} - \frac{1}{2} \sigma^2 \right) + Z_{1n} \left(\sigma + \sigma \left\{ me^{-\beta t_n} + c \right\} h - \frac{1}{2} \sigma^3 h \right) + \right. \\ &+ \frac{1}{2} h^2 \left(\left\{ me^{-\beta t_n} + c \right\}^2 - \beta me^{-\beta t_n} - \left\{ me^{-\beta t_n} + c \right\} \sigma^2 + \frac{1}{4} \sigma^4 \right) + \\ &+ Z_{1n}^2 \left(\frac{1}{2} \sigma^2 - \frac{1}{4} \sigma^4 h + \frac{1}{2} \sigma^2 \left\{ me^{-\beta t_n} + c \right\} h \right) + \frac{1}{6} \sigma^3 Z_{1n}^3 + \\ &\left. + \frac{1}{24} \sigma^4 Z_{1n}^4 \right], \quad n = 0, \dots, N - 1. \end{aligned}$$

donde $h = t_{i+1} - t_i$, $x_n = X(t_n)$ y $(Z_{1n}, Z_{2n}) \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$ con

$$\mu = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \Sigma = \begin{pmatrix} h & h^2/2 \\ h^2/2 & h^3/3 \end{pmatrix}.$$

Z_{3n} no sigue una distribución normal pero puede aproximarse, para valores pequeños de h , por una variable normal con media 0 y varianza $\frac{h^4}{12}$, estando incorrelada con Z_{1n} y Z_{2n} .

Como se puede apreciar en el algoritmo anterior, al ser recursivo, para poder simular una trayectoria se necesita partir de una valor inicial, es decir, necesitamos considerar un valor x_0 . Dicho valor va a venir determinado por la distribución inicial que estemos considerando: degenerada en $x_0 = 2.368$ (a) y lognormal $\Lambda_1(0; 1)$ (b), en nuestro caso.

Las gráficas de la figura 2 muestran trayectorias simuladas con $h = 0.01$ y $N = 1000$ a partir de $t_0 = 0$, considerando ambas distribuciones iniciales en el caso $m = 3$, $\beta = 2.9$, $c = 0.15$ y $\sigma^2 = 0.001$ de forma que las trayectorias muestran un sólo punto de inflexión en los valores de tiempo considerados.

Por otra parte, las gráficas de la figura 3 muestran trayectorias simuladas con los mismos valores de h , N y partiendo del mismo t_0 que las trayectorias de la figura 2, considerando ambas distribuciones iniciales en el caso $m = 5$, $\beta = 1.5$, $c = 0.15$ y $\sigma^2 = 0.001$, de forma que las trayectorias muestran dos puntos de inflexión.

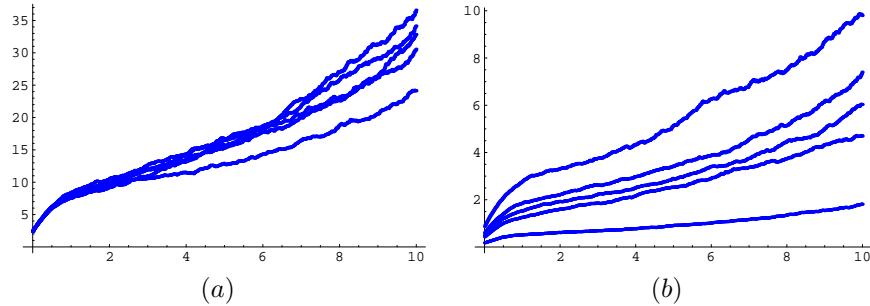


Figura 2: Trayectorias simuladas para un proceso mixto lognormal-Gompertz que muestran un sólo punto de inflexión.

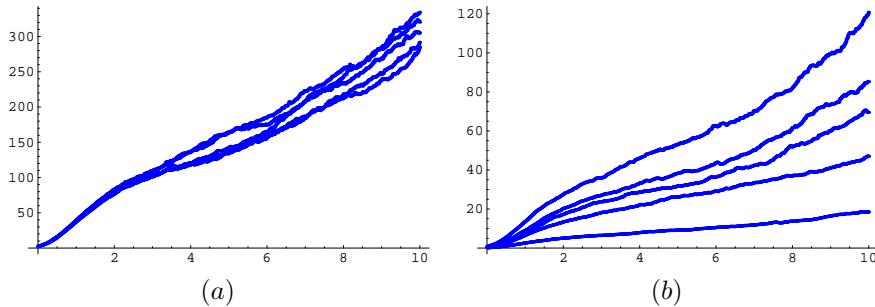


Figura 3: Trayectorias simuladas para un proceso mixto lognormal-Gompertz que muestran un dos punto de inflexión.

Los casos $c = 0$, y $\beta \leq 4c$ no han sido considerados por estar incluidos en el estudio del proceso tipo Gompertz [17] y del proceso lognormal [16], respectivamente.

5. Estudio inferencial

En esta sección vamos a obtener los estimadores máximo verosímiles de los parámetros del modelo, a partir de los cuales se pueden obtener los de las funciones paramétricas introducidas previamente.

Consideremos un muestreo discreto del proceso, realizado sobre d trayectorias, en el que la observación de cada trayectoria se ha realizado sobre n_i instantes de tiempo, t_{ij} ($i = 1, \dots, d$, $j = 1, \dots, n_i$), en principio no iguales en cada muestreo, aunque $t_{i1} = t_1$, $i = 1, \dots, d$. Ello significa que fijados dichos valores temporales, se observan las variables $X(t_{ij})$ cuyos valores observados constituirán la muestra base del estudio inferencial. Sean $x_{11}, \dots, x_{1n_1}, \dots, x_{d1}, \dots, x_{dn_d}$ dichos valores observados.

La función de verosimilitud depende de la elección de la distribución inicial. Si $X(t_1) \sim \Lambda(\mu_1; \sigma_1^2)$ la verosimilitud contiene dos parámetros adicionales que deben ser incluidos en el proceso de estimación. Sin embargo, se comprueba que las estimaciones de μ_1 y σ_1^2 dependen sólo de los valores observados en el instante de tiempo inicial y no influyen en la estimación del resto de parámetros y los EMV de m , β , c y σ^2 son los mismos en ambos casos y por tanto de ahora en adelante consideraremos el caso de la distribución inicial lognormal.

Notando por

$$a = \frac{m}{\beta}, \quad b = e^{-\beta} \quad \text{y} \quad k = \sum_{i=1}^d n_i$$

el logaritmo de la función de verosimilitud asociada a la muestra es

$$\begin{aligned} \ln L_{x_{ij}}(\mu_1, \sigma_1^2, a, b, c, \sigma^2) &= -\frac{d}{2} \ln \sigma_1^2 - \frac{k}{2} \ln(2\pi) - \frac{k-d}{2} \ln \sigma^2 - \sum_{i=1}^d \ln x_{i1} - \\ &- \frac{1}{2\sigma_1^2} \sum_{i=1}^d [\ln x_{i1} - \mu_1]^2 - \sum_{i=1}^d \sum_{j=2}^{n_i} \ln x_{ij} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d \sum_{j=2}^{n_i} \ln(t_{ij} - t_{ij-1}) - \\ &- \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d \sum_{j=2}^{n_i} \frac{\left[\ln \frac{x_{ij}}{x_{ij-1}} + a(b^{t_{ij}} - b^{t_{ij-1}}) + \left(\frac{\sigma^2}{2} - c \right) (t_{ij} - t_{ij-1}) \right]^2}{(t_{ij} - t_{ij-1})\sigma^2}. \end{aligned}$$

Derivando respecto de μ_1 y σ_1^2 e igualando a cero se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln L}{\partial \mu_1} &= \frac{1}{\sigma_1^2} \sum_{i=1}^d (\ln x_{i1} - \mu_1) = 0 \\ \frac{\partial \ln L}{\partial \sigma_1^2} &= -\frac{d}{2\sigma_1^2} + \frac{1}{2\sigma_1^4} \sum_{i=1}^d (\ln x_{i1} - \mu_1)^2 = 0 \end{aligned}$$

de donde se concluye que los estimadores máximo verosímiles de μ_1 y σ_1^2 son

$$\hat{\mu}_1 = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \ln x_{i1} \quad \text{y} \quad \hat{\sigma}_1^2 = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d (\ln x_{i1} - \hat{\mu}_1)^2.$$

Derivando con respecto a a , σ^2 , b y c e igualando a cero se obtiene

$$0 = \sum_{i=1}^d \sum_{j=2}^{n_i} \frac{\left[\ln \frac{x_{ij}}{x_{ij-1}} + a (b^{t_{ij}} - b^{t_{ij-1}}) + \left(\frac{\sigma^2}{2} - c \right) (t_{ij} - t_{ij-1}) \right]}{(t_{ij} - t_{ij-1})} [b^{t_{ij}} - b^{t_{ij-1}}] \quad (9)$$

$$0 = \sum_{i=1}^d \sum_{j=2}^{n_i} \frac{\left[\ln \frac{x_{ij}}{x_{ij-1}} + a (b^{t_{ij}} - b^{t_{ij-1}}) + \left(\frac{\sigma^2}{2} - c \right) (t_{ij} - t_{ij-1}) \right]^2}{t_{ij} - t_{ij-1}} - (k-d)\sigma^2 - \sum_{i=1}^d \sum_{j=2}^{n_i} \left[\ln \frac{x_{ij}}{x_{ij-1}} + a (b^{t_{ij}} - b^{t_{ij-1}}) + \left(\frac{\sigma^2}{2} - c \right) (t_{ij} - t_{ij-1}) \right] \sigma^2 \quad (10)$$

$$0 = \sum_{i=1}^d \sum_{j=2}^{n_i} \frac{\left[\ln \frac{x_{ij}}{x_{ij-1}} + a (b^{t_{ij}} - b^{t_{ij-1}}) + \left(\frac{\sigma^2}{2} - c \right) (t_{ij} - t_{ij-1}) \right]}{(t_{ij} - t_{ij-1})} \times \\ \times [t_{ij} b^{t_{ij}-1} - t_{ij-1} b^{t_{ij-1}-1}] \quad (11)$$

$$0 = \sum_{i=1}^d \sum_{j=2}^{n_i} \left[\ln \frac{x_{ij}}{x_{ij-1}} + a (b^{t_{ij}} - b^{t_{ij-1}}) + \left(\frac{\sigma^2}{2} - c \right) (t_{ij} - t_{ij-1}) \right] \quad (12)$$

Los estimadores máximo verosímiles de a , b , σ^2 y c verifican el sistema de ecuaciones anterior, del cual no es posible dar una solución explícita.

Si consideramos el caso particular en que $t_{ij} - t_{ij-1} = h$, las ecuaciones (9), (10), (11) y (12) quedan de la siguiente forma:

$$A_{3,b} + a(b^h - 1)A_{2,b} + \left(\frac{\sigma^2}{2} - c \right) h A_{1,b} = 0$$

$$A_{4,b} + a^2(b^h - 1)^2 A_{2,b} + 2a(b^h - 1)A_{3,b} - \left(\frac{\sigma^2}{2} - c \right)^2 h^2 (k-d) - \sigma^2 h(k-d) = 0$$

$$A_{3,b}^* + a(b^h - 1)A_{2,b}^* + \left(\frac{\sigma^2}{2} - c \right) h A_{1,b}^* = 0$$

$$A_{5,b} + a(b^h - 1)A_{1,b} + \left(\frac{\sigma^2}{2} - c \right) h(k-d) = 0$$

donde

$$\begin{aligned} A_{1,b} &= \sum_{i=1}^d \sum_{j=2}^{n_i} b^{t_{ij}-1} & A_{2,b} &= \sum_{i=1}^d \sum_{j=2}^{n_i} b^{2t_{ij}-1} & A_{3,b} &= \sum_{i=1}^d \sum_{j=2}^{n_i} b^{t_{ij}-1} \ln \frac{x_{ij}}{x_{ij-1}} \\ A_{1,b}^* &= \sum_{i=1}^d \sum_{j=2}^{n_i} t_{ij-1} b^{t_{ij}-1} & A_{2,b}^* &= \sum_{i=1}^d \sum_{j=2}^{n_i} t_{ij-1} b^{2t_{ij}-1} & A_{3,b}^* &= \sum_{i=1}^d \sum_{j=2}^{n_i} t_{ij-1} b^{t_{ij}-1} \ln \frac{x_{ij}}{x_{ij-1}} \\ A_{4,b} &= \sum_{i=1}^d \sum_{j=2}^{n_i} \ln^2 \frac{x_{ij}}{x_{ij-1}} & A_{5,b} &= \sum_{i=1}^d \sum_{j=2}^{n_i} \ln \frac{x_{ij}}{x_{ij-1}}. \end{aligned}$$

A partir de estas ecuaciones, realizando algunas operaciones, obtenemos

$$\begin{aligned} \sigma_b^2 &= \frac{1}{h(k-d)} \frac{A_{4,b}A_{1,b}^*A_{2,b} - A_{4,b}A_{1,b}A_{2,b}^* + A_{1,b}A_{3,b}^*A_{3,b}}{A_{1,b}^*A_{2,b} - A_{1,b}A_{2,b}^*} \\ &\quad + \frac{-A_{1,b}^*A_{3,b}^2 + A_{3,b}A_{2,b}^*A_{5,b} - A_{3,b}^*A_{2,b}A_{5,b}}{A_{1,b}^*A_{2,b} - A_{1,b}A_{2,b}^*} \\ a_b &= \frac{A_{1,b}A_{3,b}^* - A_{1,b}^*A_{3,b}}{(b^h - 1)[A_{1,b}^*A_{2,b} - A_{1,b}A_{2,b}^*]}, \quad c_b = \frac{\sigma_b^2}{2} - \frac{1}{h} \frac{A_{3,b}A_{2,b}^* - A_{3,b}^*A_{2,b}}{A_{1,b}^*A_{2,b} - A_{1,b}A_{2,b}^*} \end{aligned}$$

y la siguiente ecuación

$$A_{4,b} + a_b(b^h - 1)A_{3,b} + \left(\frac{\sigma_b^2}{2} - c_b \right) hA_{5,b} - \sigma_b^2 h(k-d) = 0, \quad (13)$$

que no se puede resolver de forma exacta y, por tanto, deberá ser tratada mediante métodos numéricos. Una vez que hayamos calculado \hat{b} , se deduce que $\hat{a} = a_b$, $\hat{\sigma}^2 = \sigma_b^2$ y $\hat{c} = c_b$.

Así, una vez obtenidos los estimadores máximo verosímiles de los parámetros a , b , c y σ^2 , los correspondientes a los parámetros originales del modelo, m y β son

$$\hat{\beta} = -\ln \hat{b} \quad \text{y} \quad \hat{m} = \hat{a} \cdot \hat{\beta}.$$

6. Cuestiones numéricas. Métodos alternativos de estimación

Debido a que la ecuación (13) tiene una forma algebraica que dificulta su resolución, especialmente cuando el número de datos de la muestra es grande, se hace necesario recurrir a métodos numéricos, como por ejemplo el método de Newton-Raphson. Recordemos que estos métodos dependen de la solución inicial considerada y no siempre se puede asegurar su convergencia.

Una alternativa a este tipo de métodos es realizar un procedimiento recursivo de estimación de los parámetros utilizando no sólo la información que aportan las trayectorias sino también el tipo de curva que tiene asociado el proceso. Concretamente, dado que el conocimiento de b proporciona, mediante sustitución directa, las estimaciones

de los parámetros a , c y σ^2 (y por consiguiente de m y β), proponemos el siguiente algoritmo recursivo para la estimación de todos los parámetros, en el caso en el que se disponga de trayectorias que permitan visualizar el punto de inflexión donde se pasa de cóncava a convexa¹.

1. Se toma $i=0$ y se parte de un valor inicial de b , comprendido entre 0 y 1, $b^{(0)}$. Se calcula a partir de él $\beta^{(0)} = -\ln b^{(0)}$.
2. Se obtienen los valores $a_{b^{(i)}}$, $m^{(i)}$, $\sigma_{b^{(i)}}^2$ y $c_{b^{(i)}}$ mediante las ecuaciones

$$a_{b^{(i)}} = \frac{A_{1,b^{(i)}} A_{3,b^{(i)}}^* - A_{1,b^{(i)}}^* A_{3,b^{(i)}}}{((b^{(i)})^h - 1)[A_{1,b^{(i)}}^* A_{2,b^{(i)}} - A_{1,b^{(i)}} A_{2,b^{(i)}}^*]}$$

$$m^{(i)} = a_{b^{(i)}} \beta^{(i)}$$

$$\sigma_{b^{(i)}}^2 = \frac{1}{h(k-d)} \left(\frac{A_{4,b^{(i)}} A_{1,b^{(i)}}^* A_{2,b^{(i)}} - A_{4,b^{(i)}} A_{1,b^{(i)}} A_{2,b^{(i)}}^* + A_{1,b^{(i)}} A_{3,b^{(i)}}^* A_{3,b^{(i)}}}{A_{1,b^{(i)}}^* A_{2,b^{(i)}} - A_{1,b^{(i)}} A_{2,b^{(i)}}^*} \right.$$

$$\left. - \frac{A_{1,b^{(i)}}^* A_{3,b^{(i)}}^2 + A_{3,b^{(i)}} A_{2,b^{(i)}}^* A_{5,b^{(i)}} - A_{3,b^{(i)}}^* A_{2,b^{(i)}} A_{5,b^{(i)}}}{A_{1,b^{(i)}}^* A_{2,b^{(i)}} - A_{1,b^{(i)}} A_{2,b^{(i)}}^*} \right)$$

$$c_{b^{(i)}} = \frac{\sigma_{b^{(i)}}^2}{2} - \frac{1}{h} \frac{A_{3,b^{(i)}} A_{2,b^{(i)}}^* - A_{3,b^{(i)}}^* A_{2,b^{(i)}}}{A_{1,b^{(i)}}^* A_{2,b^{(i)}} - A_{1,b^{(i)}} A_{2,b^{(i)}}^*}$$

3. Teniendo en cuenta que los instantes en los que se alcanzan los puntos de inflexión de las trayectorias son los mismos en todas ellas

$$t = -\frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{\beta - 2c \pm \sqrt{\beta(\beta - 4c)}}{2m} \right)$$

se puede obtener un nuevo valor del parámetro $\beta^{(i+1)}$, mediante la resolución de la ecuación

$$e^{-\beta^{(i+1)} t_1} = \frac{\beta^{(i+1)} - 2c_{b^{(i)}} - \sqrt{\beta^{(i+1)}(\beta^{(i+1)} - 4c_{b^{(i)}})}}{2m^{(i)}}$$

donde t_1 es el instante de tiempo² en el cual se produce el cambio de curvatura de cóncava a convexa y, a partir del valor obtenido para $\beta^{(i+1)}$, se puede obtener $b^{(i+1)}$.

4. Hacer $i=i+1$, volver al paso 2 y repetir el proceso hasta conseguir la convergencia, entendiendo la misma en términos de una tolerancia, entre dos etapas sucesivas, en términos de b .

¹Como se puede apreciar en la gráfica 1, en caso de visualizarse solamente un punto de inflexión, éste sería el del cambio de curvatura de cóncava a convexa

²Para obtener el valor de t_1 se puede ajustar una curva del tipo mixto exponencial-Gompertz (1) a una de las trayectorias y determinar a partir de ella dónde se alcanzan los puntos de inflexión.

Aplicando este procedimiento a las trayectorias simuladas, se obtienen resultados que en este caso mejoran a los obtenidos mediante el método de Newton-Raphson.

Partiendo del valor inicial $b=0.1$, y en el caso de considerar la distribución inicial lognormal $\Lambda(0, 1)$, la aplicación de ambos métodos nos llevan a las estimaciones que se resumen en el cuadro 1.

Cuadro 1: Estimación de los parámetros de los procesos simulados mediante ambos métodos.

Valores	Estimación Newton-Raphson	Estimación Iterativa
$m=3$	3.19982	3.15551
$\beta=2.9$	3.10781	3.0181
$c=0.15$	0.141785	0.140202
$\sigma^2=0.001$	0.000875252	0.000926178
$m=5$	5.07102	5.03648
$\beta=1.5$	1.52482	1.5006
$c=0.15$	0.153518	0.150364
$\sigma^2=0.001$	0.00101747	0.000902611

Referencias

- [1] Capocelli, R. M. y Ricciardi, L. M. (1974). Growth with regulation in random environment. *Kybernetik*, **15**:147-157.
- [2] Cox, D. R. y Miller, H. D. (1965). The theory of stochastic processes. *Wiley*.
- [3] Gutiérrez, R., González, A. y Torres, F. (1997). Estimation in multivariate lognormal diffusion process with exogenous factors. *Applied Statistics*, **46**(1):140-146.
- [4] Gutiérrez, R., Rico, N., Román, P., Romero, D., Serrano, J.J. y Torres, F. (2006). Approximating the nonhomogeneous lognormal diffusion process via polynomial exogenous factors. *Cybernetics and Systems: An International Journal*, **37**: 293-309.
- [5] Gutiérrez, R., Rico, N., Román, P., Romero, D. y Torres, F. (2003). Obtención de procesos de difusión no homogéneos a partir de esquemas discretos. *Actas del decimoséptimo congreso nacional de la S.E.I.O. (Lérida)*, 4274-4279.
- [6] Gutiérrez, R., Rico, N., Román, P., Romero, D. y Torres, F. (2003). Obtención de un proceso de difusión no homogéneo a partir de modelos de crecimiento. *Actas del decimoséptimo congreso nacional de la S.E.I.O. (Lérida)*, 4280-4287.
- [7] Gutiérrez, R., Rico, N., Román, P., y Torres, F. (2007). Approximate and generalized confidence bands for the mean and mode functions of the lognormal diffusion process. *Computational Statistics and Data Analysis*, **51**:4038-4053.

- [8] Gutiérrez, R., Román, P., Romero, D., Serrano, J.J. y Torres, F. (2007). A new Gompertz-type diffusion process with application to random growth. *Mathematical Biosciences*, **208**:147-165.
- [9] Gutiérrez, R., Román, P., Romero, D. y Torres, F. (2003). Applications of the univariate lognormal diffusion process with exogenous factors in forecasting. *Cybernetics and Systems: An International Journal*, **34**(8):709-724.
- [10] Gutiérrez, R., Román, P. y Torres, F. (1999). Inference and first-passage-times for the lognormal diffusion process with exogenous factors: application to modelling in economics. *Applied Stochastic Models in Business and Industry*, **15**:325-332.
- [11] Gutiérrez, R., Román, P., y Torres, F. (2001). Inference on some parametrics functions in the univariate lognormal diffusion process with exogenous factors. *Test*, **10**(2):357-373.
- [12] Kloeden, P. E., Platen, E. y Schurz, H. (1994). Numerical solution of SDE through computer experiments, *Springer-Verlag*.
- [13] Rao, N. J., Borwankar, J. D. y Ramkrishna, D. (1974). Numerical solution of Ito integral equations. *SIAM Journal on Control and Optimization*, **12**:124-139.
- [14] Ricciardi, L.M. (1976). On the transformation of diffusion processes into the Wiener Process. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, **54**:185-199.
- [15] Ricciardi, L.M. (1977). Diffusion processes and related topics in Biology. *Springer-Verlag*.
- [16] Rico, N. (2005). Aportaciones al estudio del proceso de difusión lognormal: Bandas de confianza aproximadas y generalizadas. Estudio del caso polinómico. *Tesis Doctoral. Universidad de Granada*.
- [17] Romero, D. (2005). Aportaciones al estudio de modelos estocásticos asociados a curvas de crecimiento: un nuevo proceso de difusión tipo Gompertz. *Tesis Doctoral. Universidad de Granada*.

Ramón Gutiérrez, Nuria Rico, Patricia Román, Desirée Romero y Francisco Torres

Universidad de Granada, Departamento de Estadística e Investigación Operativa,

Facultad de Ciencias, Avda. Fuentenueva s.n., Granada

nrico@ugr.es

Este trabajo ha sido parcialmente subvencionado por el proyecto MTM 2005-09209 del MEC y por el proyecto P06-FQM-02271 de la Junta de Andalucía.